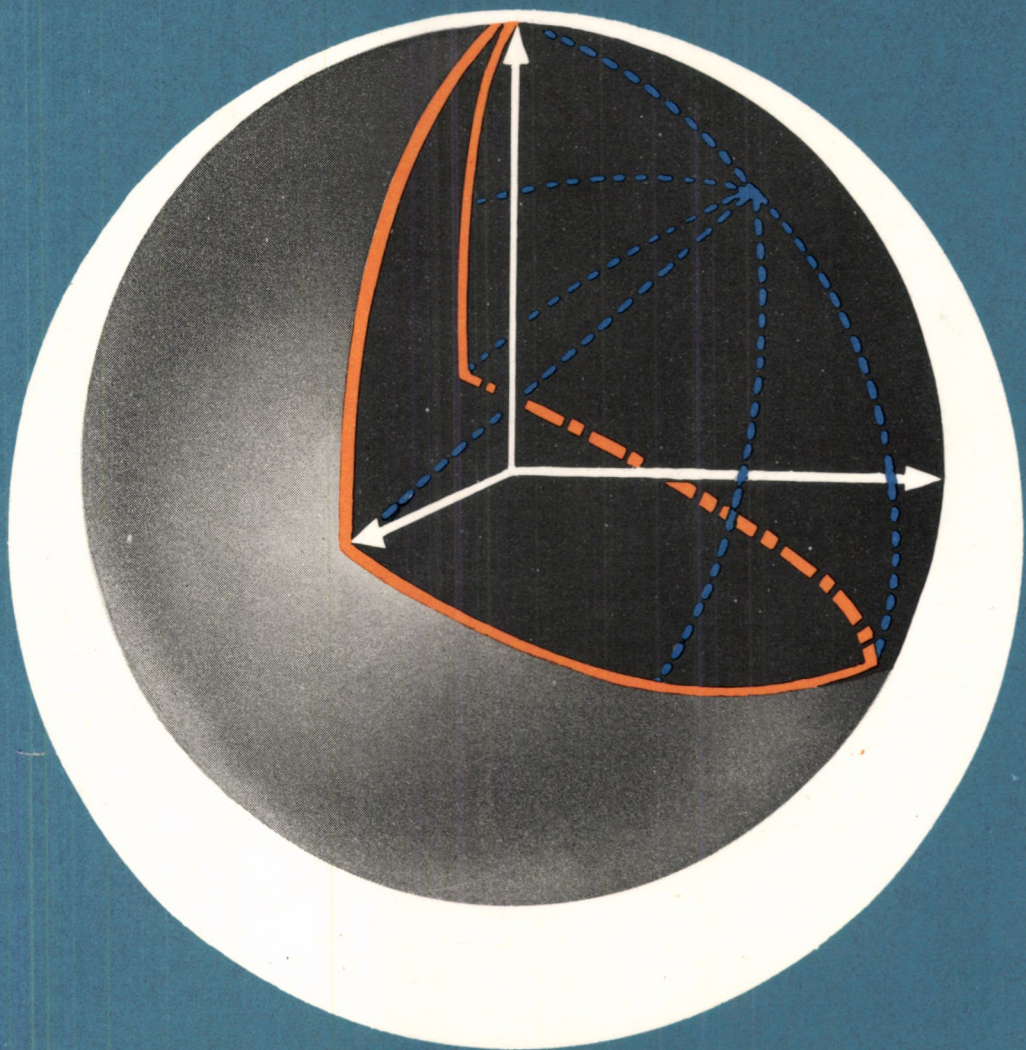


WIGNER JENŐ

# Csoportelméleti módszer a kvantum- mechanikában



AKADÉMIAI KIADÓ · BUDAPEST

WIGNER JENŐ

# Csoportelméleti módszer a kvantum- mechanikában

Fél évszázaddal ezelőtt született a kvantummechanika. Az eltelt 50 év alatt hazánkban is ezreknek vált természetes gondolkodásmódjává. Fizikusok, kémikusok, mérnökök, sőt újabban biológusok is használják a kvantumelméleti fogalmakat, modelleket, gondolatmeneteket. A szokásos tankönyvek azonban a kvantummechanika felépítése során éppen azokból a klasszikus képekből indulnak ki, amelyeket a kvantummechanika joggal kritizál. Így a kvantummechanika tanulóiban és alkalmazóiban bizonytalanság maradhat a használt fogalmak logikai tisztaságát illetően.

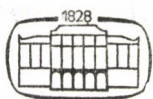
*Wigner Jenő* pár évvel a kvantummechanika megszületése után az anyagi világ egyetemes szimmetriatulajdonságai-ból kiindulva a kvantummechanika olyan szép és következetes felépítését mutatta be, amely nem csupán a klasszikus emlékképek zavaró hatását oszlatta el, hanem hatékony eszköznek bizonyult a kvantummechanika atomfizikai alkalmazása során is. A szimmetriatörvények szemléletesek és egyben általánosabbak, mint a *Schrödinger*-egyenlet közelítő potenciálfüggvényei. Így a szimmetriákra alapozó kvantummechanikai tárgyalás erőteljes vezető az

CSOPORTELMÉLETI MÓDSZER  
A KVANTUMMECHANIKÁBAN



# CSOPORTELMÉLETI MÓDSZER A KVANTUMMECHANIKÁBAN

WIGNER JENŐ



AKADÉMIAI KIADÓ · BUDAPEST 1979

*Az eredeti mű adatai:*

Eugene P. Wigner

GROUP THEORY AND ITS APPLICATION TO THE QUANTUM MECHANICS  
OF ATOMIC SPECTRA

Academic Press, New York and London 1959

*Fordította*

GYÖRGYI GÉZA,

a fizikai tudományok doktora

(1—14. fejezet)

SEBESTYÉN ÁKOS,

a fizikai tudományok kandidátusa

(15. fejezettől végig)

*Ellenőrző szerkesztő*

MARX GYÖRGY,

a Magyar Tudományos Akadémia levelező tagja

*Szerkesztette*

SEBESTYÉN ÁKOS,

a fizikai tudományok kandidátusa

ISBN 963 05 1599 7

© Akadémiai Kiadó, Budapest 1979

Printed in Hungary

# TARTALOM

Előszó a magyar kiadáshoz . . . . .	7
1. Vektorok és mátrixok . . . . .	9
Lineáris transzformációk . . . . .	9
Vektorok lineáris függetlensége . . . . .	18
2. Általánosítások . . . . .	21
3. A főtengety-transzformáció . . . . .	28
Speciális mátrixok . . . . .	31
Unitér mátrixok és a skalársorozat . . . . .	32
Unitér és hermitikus mátrixok főtengety-transzformációja . . . . .	34
Valós ortogonális és szimmetrikus mátrixok . . . . .	38
4. A kvantummechanika elemei . . . . .	39
5. Perturbációs számítás . . . . .	48
6. Transzformációelmélet és a kvantummechanika statisztikus értelmezésének alapjai . . . . .	55
7. Absztrakt csoportelmélet . . . . .	66
Véges csoportokra vonatkozó tételek . . . . .	68
Példák csoportokra . . . . .	70
Konjugált elemek és osztályok . . . . .	73
8. Invariáns alcsoportok . . . . .	75
A faktorcsoporthoz . . . . .	76
Izomorfizmus és homomorfizmus . . . . .	77
9. Az ábrázolások általános elmélete . . . . .	80
10. Folytonos csoportok . . . . .	97
11. Ábrázolások és sajátfüggvények . . . . .	112
12. Az ábrázoláselmélet algebrája . . . . .	123
13. A szimmetrikus csoport . . . . .	135
Függelék a 13. fejezethez. Segéd-tétel a szimmetrikus csoportokra vonatkozóan . . . . .	151
14. Forgáscsoportok . . . . .	154
15. A háromdimenziós valódi forgáscsoport . . . . .	166
A gömbharmonikusok . . . . .	166
A kétdimenziós unitér csoport homomorf a forgáscsoportra . . . . .	170

Az unitér csoport ábrázolásai . . . . .	174
A háromdimenziós valódi forgáscsoport ábrázolásai . . . . .	180
16. A direkt szorzat ábrázolásai . . . . .	184
17. Atomszínképek . . . . .	189
Sajátértékek és kvantumszámok . . . . .	189
A vektorösszeadási modell . . . . .	196
Függelék a 17. fejezethez. Összefüggés a binomiális együtthatók között . . . . .	206
18. Kiválasztási szabályok és a színképvonalak felhasadása . . . . .	207
19. A sajátfüggvények részleges meghatározása transzformációs tulajdonságaik alapján . . . . .	221
20. Az elektronspin . . . . .	231
Pauli elméletének fizikai alapjai . . . . .	231
A leírás invarianciája térbeli forgatásokkal szemben . . . . .	235
Kapcsolat az ábrázoláselmélettel . . . . .	238
Függelék a 20. fejezethez. A forgásoperátorok linearitása és uniteritása . . . . .	244
21. A teljes impulzusmomentum kvantumszáma . . . . .	249
22. A színképvonalak finomszerkezete . . . . .	264
23. A spin figyelembevételével adódó kiválasztási és intenzitásszabályok . . . . .	279
A Hönl—Kronig-intenzitásképletek . . . . .	288
A Landé-féle $g$ -képlet . . . . .	292
Az intervallumszabály . . . . .	294
24. A Racah-együtthatók . . . . .	298
A komplex konjugált ábrázolások . . . . .	299
A vektorcsatolási együtthatók szimmetrikus alakja . . . . .	303
A kovariáns és kontravariáns vektorcsatolási együtthatók . . . . .	307
A Racah-együtthatók . . . . .	311
Spinmentes tenzoroperátorok mátrixelemei . . . . .	318
Általános kétoldalú tenzoroperátorok . . . . .	320
25. Az építkezési elv . . . . .	324
26. Az időtükrözés . . . . .	340
Az időtükrözés és az antiunitér operátorok . . . . .	340
Az időtükrözés operátorának meghatározása . . . . .	345
A sajátfüggvények transzformációja antiunitér operátorokra . . . . .	348
A csillagos ábrázolások kiredukálása . . . . .	351
Az irreducibilis csillagos ábrázolások meghatározása . . . . .	355
Az időtükrözési invariancia következményei . . . . .	360
27. Az ábrázolási együtthatók fizikai jelentése és klasszikus határértéke . . . . .	365
Ábrázolási együtthatók . . . . .	366
A vektorcsatolási együtthatók . . . . .	367
A Racah-együtthatók . . . . .	371
A. Függelék. Megállapodások . . . . .	374
B. Függelék. Képletgyűjtemény . . . . .	378
Tárgymutató . . . . .	383



Mindig örömet okoz, ha régi hazámból hírt kapok, de MARX GYÖRGY levele, amiben értesített, hogy a csoportelmélet fizikai alkalmazásáról írt könyvem az Akadémiai Kiadó magyar nyelven publikálni fogja, nemcsak örömmel, hanem büszkeséggel is töltött meg. Hiszen már valami 45 éve, hogy azt a könyvet megírtam — legnagyobb részét jó édesapám házának emeleti szobájában, amikor a szünidőket szüleimmel töltöttem.

A mai olvasók valószínűleg meglepőnek fogják találni, hogy születése idején a csoportelmélet fizikai alkalmazása nagyon népszerűtlen volt. Vezető fizikusok „csoportvész”-ről beszéltek (Gruppenpest), és hangsúlyozták, hogy a fizikai törvények minden következményét, melyet a csoportelmélet szolgáltat, másképpen is le lehet vezetni. Ez persze igaz maradt, amint igaz minden matematikai következtetésre, hogy többféleképpen előállítható. Ma mégis úgy érezzük, hogy ha valamely szabályosság invariancia posztulátumok segítségével megszerezhető, akkor érdemes azt azok alapján levezetni.

Ennek a nézetnek két támasza van. Az első talán az, hogy az invarianciaelvek következményei könnyebben áttekinthetők és általánosabbak, mint e legtöbb részletes számítással kapható következtetés. Másodsor, lelkünk mélyén azt hisszük, hogy az invarianciatörvények, melyek sokkal, sokkal egyszerűbbek és így talán szebbek is, mint a részletes fizikai egyenletek, tartósabbak is azoknál. Ez okból persze a tér- és időtükrözés érvényességének lebontása kellemetlen meglepetés volt. Úgy érzem, lelkünk mélyén még ma is rejtélyeseknek találjuk azt.

A jelen könyv csak az atomszerkezetre vonatkozó következtetésekkel foglalkozik. Ez a korlátozás sok fejtörésnek volt az eredménye, hiszen amikor a könyvet írtam, sok érdekes eredmény volt ismeretes molekulákra is. Ma azonban úgy érzem, hogy az elhatározás helyes volt. A csoportelmélet alkalmazásai nagyon megsaporodtak az idők folyamán, és ma nemcsak atom- és molekulafizikában használjuk a csoportelméletet, hanem fontos szerepe van annak a magfizika és a részecskefizika területén is. Így annak idején úgysem volt lehetséges a csoportelmélet és a szimmetriatörvények alkalmazásait összefoglalóan tárgyalni (talán manapság sem

lehetséges), és talán jó, ha a témakör világosan el van határolva, még akkor is, ha a határok szűkek.

Amit a szimmetriaelvek maradandóbb érvényességéről írtam, azt a gondolatot ébresztheti, és azt a gondolatot ébresztette bennem, hogy a fizika nem két-, hanem háromféle koncepcióval foglalkozik. Az események azok, amik érdeklődésünknek alapjai, amelyeket közvetlenül észlelünk. A fizika ezeket nem akarja individuálisan leírni, még csak az élettelen világra sem, csak összefüggéseket akar felfedezni közöttük. A fizika nem akarja megokolni, miért van a hold mostan ott, ahol van, csak azt írja le, mik az összefüggések a hold helyzetei között különböző időpontokban. Úgy tűnik fel nekem, a szimmetria- és invarianciaelvek szintén összefüggéseket szolgáltatnak, de nem eseményekre, hanem részlettörvényekre vonatkozóan. Hogy ez a hierarchia valóban fennáll-e, hogy az élettelen világra szóló törvényeknél nagyobb-e a szimmetriatörvények hatásköre és termékenységese — ezek a jövő titkai, de talán még a mi sejtéseink is konkrétabbakká válnak e kérdésekre vonatkozóan is az idők folyamán.

WIGNER JENŐ

# 1. VEKTOROK ÉS MÁTRIXOK

## LINEÁRIS TRANSZFORMÁCIÓK

A  $(v_1, v_2, v_3, \dots, v_n)$  szám- $n$ -est  $n$ -dimenziós vektornak, másképpen az  $n$ -dimenziós tér vektorának nevezzük; a számok maguk e vektor komponensei. Az  $n$ -dimenziós tér egy pontjának koordinátáit szintén felfoghatjuk mint vektort, mely a koordináta-rendszer kezdőpontját a szóban forgó ponttal köti össze. A vektorokat vastag betűkkel jelöljük; komponenseik latin indexet kapnak, mely a koordinátatengelyt jelzi. Eszerint  $v_k$  vektorkomponens (szám),  $\mathbf{v}$  pedig vektor, vagyis egy szám- $n$ -es.

Két vektort egyenlőnek mondunk, ha a megfelelő komponenseik egyenlők. Így tehát

$$\mathbf{v} = \mathbf{w} \quad (1.1)$$

egyenértékű a következő  $n$  egyenlettel:

$$v_1 = w_1, v_2 = w_2, \dots, v_n = w_n.$$

Ha egy vektor minden komponense eltűnik, nullvektornak nevezzük. A  $c$  szám és a  $\mathbf{v}$  vektor  $c\mathbf{v}$  szorzata egy vektor, melynek komponensei  $\mathbf{v}$  komponenseinek  $c$ -szeresei;  $(c\mathbf{v})_k = cv_k$ . A vektorok összeadását oly módon definiáljuk, hogy az összeg komponensei megegyezzenek a megfelelő komponensek összegével. Formálisan

$$(\mathbf{v} + \mathbf{w})_k = v_k + w_k. \quad (1.2)$$

Matematikai problémákban gyakran előnyös új változókat bevezetni az eredeti változók helyett. A legegyszerűbb esetben az  $x'_1, x'_2, \dots, x'_n$  új változók lineáris függvényei az  $x_1, x_2, \dots, x_n$  régi változóknak:

$$\begin{aligned} x'_1 &= \alpha_{11}x_1 + \dots + \alpha_{1n}x_n, \\ x'_2 &= \alpha_{21}x_1 + \dots + \alpha_{2n}x_n, \\ &\vdots \\ x'_n &= \alpha_{n1}x_1 + \dots + \alpha_{nn}x_n, \end{aligned} \quad (1.3)$$

vagy

$$x'_i = \sum_{k=1}^n \alpha_{ik}x_k. \quad (1.3a)$$

Az új változók  $e$  bevezetésének neve *lineáris transzformáció*. A transzformációt az  $\alpha_{11}, \dots, \alpha_{nn}$  együtthatók teljesen meghatározzák. Ezt az  $n^2$  együtthatót egy négyzetes szkémába elrendezve kapjuk az (1.3) lineáris transzformáció *mátrixát*:

$$\begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \dots & \alpha_{1n} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \dots & \alpha_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \dots & \alpha_{nn} \end{pmatrix} \quad (1.4)$$

Tömörebb írásmóddal élve az  $(\alpha_{ik})$  vagy egyszerűen az  $\alpha$  jelölést is használni fogjuk.

Ahhoz, hogy (1.3) ténylegesen új változók bevezetését jelentse, szükséges, hogy ne csak az  $x'$  változókat fejezhessük ki az  $x$  változókkal, hanem megfordítva is, az  $x$ -ek is kifejezhetők legyenek az  $x'$ -k segítségével. Ha az  $x_i$ -ket az (1.3) egyenletekben ismeretleneknek tekintjük, ezeknek az egyenleteknek egyértelműen megoldhatóknak kell lenniök, hogy az  $x$ -eket megkapjuk az  $x'$ -k kifejezéseiként. Ennek szükséges és elégséges feltétele, hogy az  $\alpha_{ik}$  együtthatókból alkotott determináns zérustól különböző legyen:

$$\begin{vmatrix} \alpha_{11} & \dots & \alpha_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ \alpha_{n1} & \dots & \alpha_{nn} \end{vmatrix} \neq 0. \quad (1.4a)$$

Az olyan transzformációkat, melyek mátrixának determinánsa zérustól különböző, *nemelfajult* transzformációknak nevezzük. Az (1.4) együttható-szkémát azonban mindig mátrixnak nevezzük, függetlenül attól, hogy nemelfajult transzformációt indukál-e vagy sem. A mátrixok jelölésére vastag betűket használunk; az együtthatókat, más néven mátrixelemeket a megfelelő koordinát tengelyeket jellemző indexekkel látjuk el. Eszerint  $\alpha$  mátrixot, azaz  $n^2$  számból álló négyzetes szkémát jelöl;  $\alpha_{ik}$  pedig mátrixelemet (egy számot) jelöl.

Két mátrix egyenlő, ha az összes megfelelő elemeik egyenlők. Eszerint

$$\alpha = \beta \quad (1.5)$$

egyenértékű a következő  $n^2$  egyenlettel:

$$\alpha_{jk} = \beta_{jk} \quad (j, k = 1, 2, \dots, n).$$

Az

$$x'_i = \sum_{k=1}^n \alpha_{ik} x_k \quad (1.3a)$$

egyenlet másképpen is értelmezhető; ahelyett, hogy az  $x'_j$ -ket az eredeti vektor komponenseinek tekintenénk egy új koordináta-rendszerben, tekinthetjük őket egy új vektor komponenseinek az *eredeti koordináta-rendszerben*. Azt mondjuk ekkor,

hogy az  $\alpha$  mátrix az  $\mathbf{x}$  vektort az  $\mathbf{x}'$  vektorba viszi át, vagy ha  $\alpha$ -t  $\mathbf{x}$ -re alkalmazzuk,  $\mathbf{x}'$ -t kapjuk:

$$\mathbf{x}' = \alpha \mathbf{x}. \quad (1.3b)$$

Ez az egyenlet teljesen egyenértékű (1.3a)-val.

Egy  $n$ -dimenziós mátrix az  $n$ -dimenziós vektorokra ható *lineáris operátor*. *Operátor*, mert egy vektort egy másik vektorba transzformál; *lineáris*, mivel az  $a$ ,  $b$  tetszőleges számokra, és az  $\mathbf{r}$ ,  $\mathbf{v}$  tetszőleges vektorokra igaz az

$$\alpha(\mathbf{ar} + \mathbf{bv}) = \alpha\mathbf{ar} + \alpha\mathbf{bv} \quad (1.6)$$

összefüggés. Ahhoz, hogy (1.6)-ot igazoljuk, csak expliciten ki kell írunk a bal és a jobb oldalt. Az  $\mathbf{ar} + \mathbf{bv}$  vektor  $k$ -adik komponense  $ar_k + bv_k$ , úgyhogy a bal oldalon álló vektor  $i$ -edik komponense

$$\sum_{k=1}^n \alpha_{ik}(ar_k + bv_k).$$

Ez azonban azonos az (1.6) jobb oldalán álló vektor  $i$ -edik komponensével:

$$a \sum_{k=1}^n \alpha_{ik} r_k + b \sum_{k=1}^n \alpha_{ik} v_k.$$

Ezzel a mátrix-operátorok lineáris voltát igazoltuk.

Az  $n$ -dimenziós mátrix a *legáltalánosabb* lineáris operátor az  $n$ -dimenziós vektortérben. Vagyis e térben minden lineáris operátor egyenértékű egy mátrixszal. Ennek igazolása céljából tekintünk az  $\mathbf{O}$  tetszőleges lineáris operátort, mely az  $\mathbf{e}_1 = (1, 0, 0, \dots, 0)$  vektort az  $\mathbf{r}_1$  vektorba, az  $\mathbf{e}_2 = (0, 1, 0, \dots, 0)$  az  $\mathbf{r}_2$  vektorba, és végül az  $\mathbf{e}_n = (0, 0, 0, \dots, 1)$  vektort  $\mathbf{r}_n$ -be transzformálja, ahol az  $\mathbf{r}_k$  vektor komponensei  $r_{1k}, r_{2k}, \dots, r_{nk}$ . Az  $(r_{ik})$  mátrix mármint az  $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_n$  vektorok mindegyikét ugyanazokba az  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n$  vektorokba transzformálja, mint az  $\mathbf{O}$  operátor. Azonkívül bármely  $\mathbf{a}$   $n$ -dimenziós vektor lineáris kombinációja az  $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_n$  vektoroknak. Eszerint mind  $\mathbf{O}$ , mind pedig  $(r_{ik})$  — mivel lineárisak — tetszőleges  $\mathbf{a}$  vektort egyugyanazon  $a_1 \mathbf{r}_1 + \dots + a_n \mathbf{r}_n$  vektorba transzformál. Az  $(r_{ik})$  mátrix ennél fogva egyenértékű az  $\mathbf{O}$  operátorral.

A lineáris transzformációk legfontosabb tulajdonsága az, hogy két ilyen transzformáció, ha egymást követően alkalmazzuk őket, egyetlen lineáris transzformációval helyettesíthető. Tegyük fel például, hogy először bevezetjük az  $x'$  változókat az eredeti  $x$  változók helyett, és ezt követően bevezetjük az  $x''$  változókat egy *második lineáris transzformáció* segítségével:

$$\begin{aligned} x_1'' &= \beta_{11}x_1' + \beta_{12}x_2' + \dots + \beta_{1n}x_n', \\ &\vdots \\ x_n'' &= \beta_{n1}x_1' + \beta_{n2}x_2' + \dots + \beta_{nn}x_n'. \end{aligned} \quad (1.7)$$

A két átalakítás *helyettesíthető egyetleneggyel*, oly módon, hogy az  $x''$  változókat közvetlenül vezetjük be az  $x$  változók helyett egyetlen lineáris transzformáció segítségével. (1.3)-at (1.7)-be helyettesítve kapjuk:

$$\begin{aligned} x_1'' &= \beta_{11}(\alpha_{11}x_1 + \dots + \alpha_{1n}x_n) + \dots + \beta_{1n}(\alpha_{n1}x_1 + \dots + \alpha_{nn}x_n), \\ x_2'' &= \beta_{21}(\alpha_{11}x_1 + \dots + \alpha_{1n}x_n) + \dots + \beta_{2n}(\alpha_{n1}x_1 + \dots + \alpha_{nn}x_n), \\ &\vdots \\ x_n'' &= \beta_{n1}(\alpha_{11}x_1 + \dots + \alpha_{1n}x_n) + \dots + \beta_{nn}(\alpha_{n1}x_1 + \dots + \alpha_{nn}x_n). \end{aligned} \quad (1.8)$$

Eszerint az  $x''$ -k lineáris függvényei az  $x$ -eknek. Tömörebb alakban is felírhatjuk (1.8)-at, (1.3) és (1.7) rövidebb

$$x_j' = \sum_{k=1}^n \alpha_{jk} x_k \quad (j=1, 2, \dots, n), \quad (1.3c)$$

$$x_i'' = \sum_{j=1}^n \beta_{ij} x_j' \quad (i=1, 2, \dots, n) \quad (1.7a)$$

írasmódját felhasználva. Ekkor (1.8) így írható:

$$x_i'' = \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \beta_{ij} \alpha_{jk} x_k. \quad (1.8a)$$

Definiáljuk  $\gamma$ -t a

$$\gamma_{ik} = \sum_{j=1}^n \beta_{ij} \alpha_{jk} \quad (1.9)$$

képlettel; egyszerűen írhatjuk:

$$x_i'' = \sum_{k=1}^n \gamma_{ik} x_k. \quad (1.8b)$$

Ez mutatja, hogy a két lineáris transzformáció: a  $(\beta_{ik})$  mátrixszal megadott (1.7) s az  $(\alpha_{ik})$  mátrixszal meghatározott (1.3) helyettesíthető egyetlen lineáris transzformációval, melynek mátrixa  $(\gamma_{ik})$ .

A  $(\gamma_{ik})$  mátrixot, melyet az  $(\alpha_{ik})$ ,  $(\beta_{ik})$  mátrixok segítségével az (1.9) egyenlet definiál, a  $(\beta_{ik})$  és az  $(\alpha_{ik})$  mátrixok *szorzatának* nevezzük. Mínthogy  $(\alpha_{ik})$  az  $\mathbf{r}$  vektort  $\mathbf{r}' = \alpha \mathbf{r}$ -be,  $(\beta_{ik})$  pedig  $\mathbf{r}'$ -t  $\mathbf{r}'' = \beta \mathbf{r}'$ -be transzformálja, a  $(\gamma_{ik})$  szorzatmátrix — definíciója szerint — az  $\mathbf{r}$  vektort közvetlenül  $\mathbf{r}'' = \gamma \mathbf{r}$ -be transzformálja. A transzformációk összetevésének e módszerét „mátrixszorzás”-nak nevezik. Ez több egyszerű tulajdonságot mutat, melyeket most mint tételeket sorolunk fel.

Mindenekelőtt megjegyezzük, hogy a mátrixszorzás formális szabálya ugyanaz, mint a determinánsok szorzási szabálya.

1. *Két mátrix szorzatának a determinánsa egyenlő a két tényező determinánsának a szorzatával.*

$$\alpha\beta = \beta\alpha \quad (1.E.1)$$

nem szükségképpen igaz. Tekintsük például a következő két mátrixot:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Ekkor

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

és

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Ezzel megállapítottuk a mátrixszorzás egy másik tulajdonságát:

2. *Két mátrix szorzata általában függ a tényezők sorrendjétől.*

Abban az igen speciális esetben, amikor (1.E.1) fennáll, azt mondjuk, hogy az  $\alpha$  és a  $\beta$  mátrix felcserélhető, *kommutál*.

A kommutatív törvénnyel ellentétben,

3. *a szorzás asszociatív törvénye érvényes a mátrixszorzásra.*

Azaz

$$\gamma(\beta\alpha) = (\gamma\beta)\alpha. \quad (1.10)$$

Eszerint mindegy, hogy  $\gamma$ -t szorozzuk-e meg  $\beta$  és  $\alpha$  szorzatával, vagy  $\gamma$  és  $\beta$  szorzatát  $\alpha$ -val. Ennek igazolása céljából jelöljük az (1.10) bal oldalán álló mátrix  $i-k$  elemét  $\varepsilon_{ik}$ -val. Ekkor

$$\varepsilon_{ik} = \sum_{j=1}^n \gamma_{ij}(\beta\alpha)_{jk} = \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n \gamma_{ij}\beta_{jl}\alpha_{lk}. \quad (1.10a)$$

Az (1.10) egyenlet jobb oldalán álló  $i-k$  indexű elem:

$$\varepsilon'_{ik} = \sum_{l=1}^n (\gamma\beta)_{il}\alpha_{lk} = \sum_{l=1}^n \sum_{j=1}^n \gamma_{ij}\beta_{jl}\alpha_{lk}. \quad (1.10b)$$

Eszerint  $\varepsilon_{ik} = \varepsilon'_{ik}$  és az (1.10) egyenletet igazoltuk. Ennélfogva (1.10) mindkét oldala helyett egyszerűen  $\gamma\beta\alpha$  írható.

Az asszociatív törvény érvényessége közvetlenül nyilvánvaló, ha a mátrixokat lineáris operátoroknak tekintjük. Transzformálja  $\alpha$  az  $\mathbf{r}$  vektort  $\mathbf{r}' = \alpha\mathbf{r}$ -be,  $\beta$  az  $\mathbf{r}'$  vektort  $\mathbf{r}'' = \beta\mathbf{r}'$ -be,  $\gamma$  pedig  $\mathbf{r}''$ -t  $\mathbf{r}''' = \gamma\mathbf{r}''$ -be. Ekkor két mátrix összeszorozása (helyettesítése egyetlen mátrixszal: azok szorzatával) egyszerűen két operáció összetevését jelenti. A  $\beta\alpha$  szorzat  $\mathbf{r}$ -et közvetlenül  $\mathbf{r}''$ -be,  $\gamma\beta$  az  $\mathbf{r}'$  vektort közvetlenül  $\mathbf{r}'''$ -be viszi át. Így tehát mind  $(\gamma\beta)\alpha$ , mind  $\gamma(\beta\alpha)$  az  $\mathbf{r}$  vektort  $\mathbf{r}'''$ -be transzformálja, s a két operáció ekvivalens.

#### 4. Az

$$\mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} \quad (1.11)$$

*egységmátrix* a mátrixszorzásban speciális szerepet játszik, mely hasonló az 1 számnak a közönséges szorzásban betöltött szerepéhez. Tetszőleges  $\alpha$  mátrixra fennáll:

$$\alpha \cdot \mathbf{1} = \mathbf{1} \cdot \alpha.$$

Vagyis az  $\mathbf{1}$  kommutál minden mátrixszal, s ha bármilyen mátrixot megszorunk vele, szorzatként újból ugyanazt a mátrixot kapjuk. Az egységmátrix elemeit a  $\delta_{ik}$  szimbólummal jelöljük:

$$\begin{aligned} \delta_{ik} &= 0 & (i \neq k), \\ \delta_{ik} &= 1 & (i = k). \end{aligned} \quad (1.12)$$

Az ily módon definiált  $\delta_{ik}$  neve *Kronecker-féle delta-szimbólum*. A transzformáció, melyet a  $(\delta_{ik}) = \mathbf{1}$  mátrix ír le, az *azonosság*, mely a változókat változatlanul hagyja.

Ha az adott  $\alpha$  mátrixhoz létezik olyan  $\beta$  mátrix, amelyre fennáll:

$$\beta\alpha = \mathbf{1}, \quad (1.13)$$

akkor  $\beta$ -t az  $\alpha$  mátrix *inverzének* vagy *reciprokának* nevezzük. Az (1.13) egyenlet azt jelenti, hogy létezik olyan transzformáció, amelyet a  $\beta$  mátrix ír le, és amely  $\alpha$ -val kombinálva az azonos transzformációt adja. Ha  $\alpha$  determinánsa nem egyenlő zérussal ( $|\alpha_{jk}| \neq 0$ ), akkor az inverz transzformáció mindig létezik [amint korábban említettük; lásd (1.4a)]. Ennek igazolására az (1.13) egyenletet részletesebben kiírjuk;  $n^2$  egyenletet kapunk:

$$\sum_{j=1}^n \beta_{ij} \alpha_{jk} = \delta_{ik} \quad (i, k = 1, 2, \dots, n). \quad (1.14)$$

Tekintsük most az  $i$  index valamely meghatározott — mondjuk  $l$  — értékéhez tartozó  $n$  egyenletet. Az  $n$  számú  $\beta_{l1}, \beta_{l2}, \dots, \beta_{ln}$  ismeretlenre  $n$  lineáris egyenlet vonatkozik. Ezeknek egy és csak egy megoldásuk van, feltéve, hogy az  $|\alpha_{jk}|$  determináns nem tűnik el. Ugyanez vonatkozik a többi  $n-1$  egyenletrendszerre is. Ezzel megállapítottuk az ötödik tulajdonságot, melyet említeni kívánunk:

5. Ha  $\alpha$  determinánsa nem zérus:  $|\alpha_{jk}| \neq 0$ , létezik egy és csak egy olyan  $\beta$  mátrix, amelyre fennáll:  $\beta\alpha = \mathbf{1}$ .



Azonfelül a  $|\beta_{jk}|$  determináns reciproka az  $|\alpha_{jk}|$  determinánsnak, minthogy az 1. tétel szerint

$$|\beta_{jk}| \cdot |\alpha_{jk}| = |\delta_{jk}| = 1. \quad (1.15)$$

Ebből következik, hogy  $\alpha$ -nak nincs inverze, ha  $|\alpha_{jk}| = 0$ , és hogy  $\beta$ -nak,  $\alpha$  inverzének szükségképpen ugyancsak van inverze.

Most megmutatjuk, hogy ha (1.13) igaz, akkor

$$\alpha\beta = \mathbf{1} \quad (1.16)$$

ugyancsak igaz. Azaz ha  $\beta$  inverze  $\alpha$ -nak, akkor  $\alpha$  is inverze  $\beta$ -nak. Ez a legegyszerűbben oly módon látható be, hogy (1.13)-at jobbról megszorozzuk  $\beta$ -val:

$$\beta\alpha\beta = \beta, \quad (1.17)$$

s ezt balról  $\beta$  inverzével, melyet  $\gamma$ -val jelölünk. Ekkor

$$\gamma\beta\alpha\beta = \gamma\beta,$$

és mivel a feltevés szerint  $\gamma\beta = \mathbf{1}$ , ez azonos (1.16)-tal. Megfordítva, (1.13) fennállítására könnyen következtethetünk (1.16)-ból. Ezzel a 6. tételt igazoltuk ( $\alpha$  inverzét  $\alpha^{-1}$ -gyel jelöljük).

6. Ha  $\alpha^{-1}$  az inverze  $\alpha$ -nak, akkor  $\alpha$  viszont  $\alpha^{-1}$ -nek az inverze.

Nilvánvaló, hogy az inverz mátrixok kommutálnak egymással.

*Szabály:* Egy  $\alpha\beta\gamma\delta$  szorzat inverzét úgy kapjuk, hogy az egyes tényezők inverzeit fordított sorrendben szorozzuk össze ( $\delta^{-1}\gamma^{-1}\beta^{-1}\alpha^{-1}$ ). Azaz

$$(\delta^{-1}\gamma^{-1}\beta^{-1}\alpha^{-1}) \cdot (\alpha\beta\gamma\delta) = \mathbf{1}.$$

További fontos mátrix

7. a zérusmátrix, melynek minden eleme zérus:

$$\mathbf{0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.18)$$

Nilvánvalóan bármely  $\alpha$  mátrixra fennáll:

$$\alpha \cdot \mathbf{0} = \mathbf{0} \cdot \alpha = \mathbf{0}.$$

A zérusmátrix fontos szerepet játszik egy másik mátrixműveletben, az összeadásban. Két mátrix,  $\alpha$  és  $\beta$  összege az a  $\gamma$  mátrix, melynek elemei

$$\gamma_{ik} = \alpha_{ik} + \beta_{ik}. \quad (1.19)$$

A (1.19) alatt felírt  $n^2$  egyenlet egyenértékű a

$$\gamma = \alpha + \beta \quad \text{vagy a} \quad \gamma - \alpha - \beta = \mathbf{0}$$

egyenlettel. A mátrixösszeadás nyilvánvalóan kommutatív:

$$\alpha + \beta = \beta + \alpha. \quad (1.20)$$

Azonfelül az összeg szorzása disztributív:

$$\gamma(\alpha + \beta) = \gamma\alpha + \gamma\beta,$$

$$(\alpha + \beta)\gamma = \alpha\gamma + \beta\gamma.$$

Továbbá egy  $\alpha$  mátrix és egy  $a$  szám szorzata — a definíció szerint — az a  $\gamma$  mátrix, amelynek egyes elemei  $\alpha$  megfelelő elemeinek  $a$ -szorosai:

$$\gamma_{ik} = a\alpha_{ik}. \quad (1.21)$$

Az

$$(ab)\alpha = a(b\alpha), \quad \alpha a\beta = a\alpha\beta, \quad a(\alpha + \beta) = a\alpha + a\beta$$

képletek érvényessége ekkor közvetlenül belátható.

Mínt hogy valamely  $\alpha$  mátrix egész kitevős hatványai könnyűszerrel definiálhatók szukcesszív szorzás segítségével:

$$\begin{aligned} \alpha^2 &= \alpha \cdot \alpha, & \alpha^3 &= \alpha \cdot \alpha \cdot \alpha, & \dots; \\ \alpha^{-2} &= \alpha^{-1} \cdot \alpha^{-1}, & \alpha^{-3} &= \alpha^{-1} \cdot \alpha^{-1} \cdot \alpha^{-1}, & \dots; \end{aligned} \quad (1.22)$$

pozitív és negatív egész kitevős hatványokat tartalmazó polinomokat szintén definiálhatunk:

$$\dots + a_{-n}\alpha^{-n} + \dots + a_{-1}\alpha^{-1} + a_0\mathbf{1} + a_1\alpha + \dots + a_n\alpha^n + \dots \quad (1.23)$$

Az  $a$  együtthatók a fenti kifejezésben nem mátrixok, hanem számok. Az  $\alpha$  mátrix (1.23) alakú függvényei  $\alpha$  bármely más függvényével kommutálnak (speciálisan önmagával  $\alpha$ -val is).

A mátrixok további fontos típusa, amellyel gyakran találkozunk, az átlós mátrix.

8. Az átlós mátrix főátlóján kívül álló minden mátrixeleme zérus:

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} D_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & D_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & D_n \end{pmatrix} \quad (1.24)$$

Ezen átlós mátrix általános eleme

$$D_{ik} = D_i \delta_{ik}. \quad (1.25)$$

Az átlós mátrixok mind kommutálnak egymással, és két átlós mátrix szorzata ismét átlós mátrix. Ez közvetlenül látható a szorzat definíciója alapján:

$$(\mathbf{D}\mathbf{D}')_{ik} = \sum_j D_{ij}D'_{jk} = \sum_j D_i \delta_{ij} D'_j \delta_{jk} = D_i D'_i \delta_{ik} \quad (1.26)$$

Megfordítva, ha az  $\alpha$  mátrix kommutál a  $D$  átlós mátrixszal, melynek átlós elemei mind különbözőek, akkor  $\alpha$  maga is szükségképpen átlós mátrix. Írjuk ki részletesen az

$$\alpha D = D \alpha$$

szorzatot:

$$(\alpha D)_{ik} = \alpha_{ik} D_k = (D \alpha)_{ik} = D_i \alpha_{ik}. \quad (1.27)$$

Azaz

$$(D_i - D_k) \alpha_{ik} = 0; \quad (1.27a)$$

az  $\alpha_{ik}$  nemdiagonális elemek ( $i \neq k$ ) a  $D_i \neq D_k$  feltevés folyamányaképpen mind egyenlők zérussal. Így tehát  $\alpha$  átlós mátrix.

Egy mátrix átlós elemeinek összegét *átlósösszegnek*, *átlónak* vagy *spurnak* nevezzük:

$$\text{Sp } \alpha = \sum_j \alpha_{jj} = \alpha_{11} + \alpha_{22} + \dots + \alpha_{nn}. \quad (1.28)$$

Az  $\alpha \beta$  szorzat átlója:

$$\text{Sp } \alpha \beta = \sum_i (\alpha \beta)_{ii} = \sum_{jk} \alpha_{jk} \beta_{jk} = \text{Sp } \beta \alpha. \quad (1.29)$$

Ezzel a mátrixok további tulajdonságát állapítottuk meg:

9. *Két mátrix szorzatának átlója nem függ a két tényező sorrendjétől.*

E szabály legfontosabb alkalmazása a mátrixok *hasonlósági transzformációival* kapcsolatos. Hasonlósági transzformációról akkor beszélünk, ha az  $\alpha$  mátrixot oly módon transzformáljuk, hogy jobbról megszorozzuk  $\beta$ -val, balról pedig  $\beta$  reciprokával. Az  $\alpha$  mátrixot a transzformáció tehát  $\beta^{-1} \alpha \beta$ -ba viszi át. *A hasonlósági transzformáció a mátrix átlóját változatlanul hagyja*, minthogy a fenti szabály szerint  $\beta^{-1} \alpha \beta$  átlója megegyezik  $\alpha \beta \beta^{-1} = \alpha$  átlójával.

A hasonlósági transzformációk fontossága abban rejlik, hogy

10. *egy mátrixegyenlet igaz marad, ha benne minden mátrixot ugyanannak a hasonlósági transzformációnak vetünk alá;*

Például az  $\alpha \beta = \gamma$  szorzat transzformációjával kapjuk:

$$\sigma^{-1} \alpha \sigma \sigma^{-1} \beta \sigma = \sigma^{-1} \gamma \sigma.$$

Egy másik példa. Ha

$$\alpha \beta = 1,$$

akkor

$$\sigma^{-1} \alpha \sigma \sigma^{-1} \beta \sigma = \sigma^{-1} 1 \sigma = 1.$$

Látható, hogy a mátrixok összegeire, valamint a mátrixok és számok szorzataira vonatkozó összefüggések is megőrzik érvényességüket hasonlósági transzformációval szemben. Így a

$$\gamma = \alpha + \beta$$

egyenlőségből következik, hogy

$$\sigma^{-1}\gamma = \sigma^{-1}(\alpha + \beta) = \sigma^{-1}\alpha + \sigma^{-1}\beta$$

és

$$\sigma^{-1}\gamma\sigma = \sigma^{-1}\alpha\sigma + \sigma^{-1}\beta\sigma.$$

Hasonlóképpen

$$\beta = a \cdot \alpha$$

maga után vonja

$$\sigma^{-1}\beta\sigma = a\sigma^{-1}\alpha\sigma$$

fennállását. A 10. tétel ennél fogva érvényes minden mátrixegyenletre, melyben mátrixoknak számokkal vagy más mátrixokkal képezett szorzatai, mátrixok (pozitív vagy negatív) egész kitevőjű hatványai és mátrixok összegei lépnek fel.

A mátrixokkal való műveletekre vonatkozó eme tíz tétel megtalálható BORN és JORDAN legelső dolgozatában, melyet a kvantummechanikáról közöltek.<sup>1</sup> Azok már sok olvasó előtt kétségtelenül ismertek. Itt azért ismételtük el őket, mert a következőkben — és gyakorlatilag minden kvantummechanikai számításban — nélkülözhetetlen ezen alapvető szabályok biztos ismerete. Amellett igen gyakran fel kell őket használnunk hallgatólagosan, másként még a legegyszerűbb bizonyítások is rendkívül fáradságossá válnak.<sup>2</sup>

## VEKTOROK LINEÁRIS FÜGGETLENSÉGE

A  $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_k$  vektorokat lineárisan függetleneknek mondjuk, ha nem áll fenn közöttük

$$a_1\mathbf{v}_1 + a_2\mathbf{v}_2 + \dots + a_k\mathbf{v}_k = 0 \quad (1.30)$$

alakú összefüggés, kivéve ha az  $a_1, a_2, \dots, a_k$  együtthatók mindegyike zérus. Eszerint lineárisan független vektorok rendszerében nincs olyan vektor, amelyet kifejezhetnénk a rendszer többi vektorának lineáris kombinációja alakjában. Abban az esetben, amikor a vektorok egyike, mondjuk  $\mathbf{v}_1$ , zérusvektor, akkor a rendszer nem lehet lineárisan független, mivel az

$$1 \cdot \mathbf{v}_1 + 0 \cdot \mathbf{v}_2 + \dots + 0 \cdot \mathbf{v}_k = 0$$

összefüggés biztosan teljesül, megsértve a lineáris függetlenség feltételét.

<sup>1</sup> M. BORN és P. JORDAN, Z. Physik **34**, 858 (1925). (Magyarul megjelent: Kvantummechanika, cikkgyűjtemény. Szerkesztette JÁNOSSY LAJOS. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1971. 25. o.)

<sup>2</sup> A szorzás asszociatív törvénye (a 3. tétel) pl. háromszor kerül impliciten felhasználásra az inverz mátrixokra vonatkozó tétel levezetésében (6. tétel). Írjuk ki gyakorlatképpen valamennyi zárójelet!

Mint példát a lineáris függőségre vizsgáljuk meg a  $\mathbf{v}_1=(1, 2, -1, 3)$ ,  $\mathbf{v}_2=(0, -2, 1, -1)$  és  $\mathbf{v}_3=(2, 2, -1, 5)$  négydimenziós vektorokat. Ezek lineárisan összefüggnek, minthogy

$$2\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_3 = 0.$$

Másrésről a  $\mathbf{v}_1$  és  $\mathbf{v}_2$  vektorok lineárisan függetlenek.

Ha a  $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_k$  vektorok lineárisan összefüggnek, akkor e  $k$  számú vektor között lehet találni  $k'$  lineárisan független vektort ( $k' < k$ ). Azonfelül e  $k'$  számú vektor lineáris kombinációjaként a  $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_k$  vektorok mindegyike kifejezhető.

A  $k'$  lineárisan független vektor felkutatásához látva mindenekelőtt elhagyjuk az összes zérusvektort. Zérusvektor ugyanis, amint láttuk, sohasem lehet lineárisan független rendszer tagja. Ezután sorra vesszük a fennmaradó vektorokat, és elhagyjuk mindazokat, amelyek kifejezhetők a már megtartott vektorok lineáris kombinációjaként. A  $k'$  számú vektor, melyeket így módon megtartottunk, lineárisan független. Ha ugyanis egyikük sem fejezhető ki a többi vektor lineáris kombinációjaként, nem állhat fenn közöttük (1.30) típusú kapcsolat. Azonfelül az elhagyott vektorok (és így az eredetileg adott  $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_k$  vektorok valamennyien) kifejezhetők segítségükkel. Éppen ez volt ugyanis az elhagyás kritériuma.

Ha a  $k$  számú  $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_k$  vektor lineárisan összefügg, ill. lineárisan független, ugyanez igaz az ezekből az  $\alpha$  nemelfajult transzformáció segítségével kapott  $\alpha\mathbf{v}_1, \dots, \alpha\mathbf{v}_k$  vektorokra is. Azaz

$$a_1\mathbf{v}_1 + a_2\mathbf{v}_2 + \dots + a_k\mathbf{v}_k = 0 \quad (1.31)$$

fennállásából következik

$$a_1\alpha\mathbf{v}_1 + a_2\alpha\mathbf{v}_2 + \dots + a_k\alpha\mathbf{v}_k = 0. \quad (1.31a)$$

Ezt úgy láthatjuk be, hogy  $\alpha$ -t alkalmazzuk (1.31) mindkét oldalára;  $\alpha$  lineáris voltát felhasználva kapjuk (1.31a)-t. Megfordítva, (1.31a)-ból következik (1.31). A  $\mathbf{v}_i$  vektorok között fennálló minden egyes lineáris összefüggésnek megfelel egy-egy az  $\alpha\mathbf{v}_i$ -k között fennálló lineáris összefüggés, és megfordítva.

Az  $n$ -dimenziós vektorok közt legfeljebb  $n$  lehet lineárisan független. Ennek igazolása céljából megjegyezzük, hogy a lineáris függést kifejező

$$a_1\mathbf{v}_1 + \dots + a_{n+1}\mathbf{v}_{n+1} = 0 \quad (1.32)$$

összefüggés  $n$  számú, a vektorkomponensekre vonatkozó homogén lineáris egyenlettel egyenértékű:

$$\begin{aligned} a_1(\mathbf{v}_1)_1 + \dots + a_n(\mathbf{v}_n)_1 + a_{n+1}(\mathbf{v}_{n+1})_1 &= 0, \\ &\vdots \\ a_1(\mathbf{v}_1)_n + \dots + a_n(\mathbf{v}_n)_n + a_{n+1}(\mathbf{v}_{n+1})_n &= 0. \end{aligned} \quad (1.32a)$$

Tekintsük ezekben az egyenletekben az  $a_1, a_2, \dots, a_n, a_{n+1}$  együtthatókat ismeretleneknek. Abból, hogy  $n$  számú,  $n+1$  ismeretlenes homogén lineáris egyenletnek

mindig van nemtriviális megoldása, azonnal következik, hogy az (1.32) összefüggés mindig fennáll. Eszerint  $n+1$  számú  $n$ -dimenziós vektor mindenkor összefügg egymással lineárisan.

A fenti tétel közvetlen folyománya, hogy tetszőleges,  $n$  számú lineárisan független  $n$ -dimenziós vektor teljes vektorrendszert képez; azaz: tetszőleges  $\mathbf{w}$   $n$ -dimenziós vektor kifejezhető azok lineáris kombinációjaként. Valóban, a tétel azt állítja, hogy egy

$$a_1 \mathbf{v}_1 + \dots + a_n \mathbf{v}_n + b \mathbf{w} = 0$$

alakú összefüggésnek fenn kell állnia az  $n$  számú  $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n$  vektor, valamint a tetszőleges  $\mathbf{w}$  vektor között. Azonfelül, ha  $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n$  lineárisan független vektorok, a  $b$  együttható nem lehet zérus. Így tehát tetszőleges  $\mathbf{w}$  vektor felírható a  $\mathbf{v}_i$ -k lineáris kombinációjaként, így ezek teljes vektorrendszert képeznek.

Egy  $n$ -dimenziós mátrix valamely sora vagy oszlopa felfogható mint vektor. Az  $\alpha_{\cdot k}$  vektor  $\alpha_{1k}, \alpha_{2k}, \dots, \alpha_{nk}$  komponensei alkotják a  $k$ -edik oszlopot, az  $\alpha_i$  vektor  $\alpha_{i1}, \dots, \alpha_{in}$  komponensei pedig az  $i$ -edik sort. Az  $\alpha_{\cdot 1}, \dots, \alpha_{\cdot n}$  oszlopvektorok között fennálló nemtriviális lineáris

$$a_1 \alpha_{\cdot 1} + \dots + a_n \alpha_{\cdot n} = 0$$

kapcsolat egyszerűen azt fejezi ki, hogy az  $a_1, a_2, \dots, a_n$  együtthatókra vonatkozó

$$a_1 \alpha_{11} + \dots + a_n \alpha_{1n} = 0,$$

$$\vdots$$

$$a_1 \alpha_{n1} + \dots + a_n \alpha_{nn} = 0$$

homogén lineáris egyenletrendszernek létezik zérustól különböző megoldása. Annak szükséges és elégséges feltétele, hogy ilyen megoldás létezzék, az  $|\alpha_{ik}|$  determináns eltűnése. Ennélfogva, ha ez a determináns zérustól különbözik ( $|\alpha_{ik}| \neq 0$ ), az  $\alpha_{\cdot 1}, \dots, \alpha_{\cdot n}$  vektorok lineárisan függetlenek és teljes vektorrendszert képeznek. Megfordítva, ha  $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n$  lineárisan független vektorok, annak a mátrixnak, melynek oszlopait e vektorok alkotják, zérustól különböző a determinánsa. Természetesen mindezek a megjegyzések a sorvektorokra ugyancsak érvényesek.

## 2. ÁLTALÁNOSÍTÁSOK

1. Most általánosítjuk az előző fejezet eredményeit. Az első általánosítás teljesen formális lesz; a második inkább érinti a lényegét. A vektorkomponenseket és a mátrixelemeket a megfelelő koordinátatengelyekre utaló indexekkel láttuk el. A koordinátatengelyeket eddig az  $1, 2, 3, \dots, n$  számokkal jellemeztük. A következőkben a koordinátatengelyeket tetszőleges halmaz elemei segítségével nevezzük meg. Ha  $G$  a  $g, h, i, \dots$  objektumok halmaza, akkor a  $G$  halmaz terének egy  $\mathbf{v}$  vektorán a  $v_g, v_h, v_i, \dots$  számok sorozatát értjük. Természetesen csak olyan vektorok tehetők egyenlővé (adhatók össze stb.), amelyek ugyanazon térben vannak értelmezve; csak ekkor felelnek meg komponenseik ugyanannak a halmaznak.

A mátrixokkal hasonlóképpen járunk el. Ahhoz, hogy az  $\alpha$  mátrixot a  $v_g, v_h, v_i, \dots$  komponensekkel rendelkező  $\mathbf{v}$  vektorra alkalmazhassuk,  $\alpha$  oszlopait ugyanazon  $G$  halmaz elemeivel kell jellemeznünk, amelynek segítségével  $\mathbf{v}$  komponenseit jellemeztük. A legegyszerűbb esetben a sorokat ugyancsak e halmaz  $g, h, i, \dots$  elemei jellemzik, és  $\alpha$  a  $G$  terébe tartozó  $\mathbf{v}$  vektort ugyanezen tér  $\alpha\mathbf{v}$  vektorába transzformálja. Azaz

$$v'_j = \sum_{i \in G} \alpha_{ji} v_i \quad (2.1)$$

ahol  $j$  a  $G$  halmaz egy eleme és  $l$  e halmaz minden elemét befutja.

A koordinátatengelyek indexelhetők például az  $x, y, z$  betűkkel. Ekkor  $v_x = 1, v_y = 0, v_z = -2$  egy  $\mathbf{v}$  vektor komponensei,

$$\alpha = \begin{pmatrix} & x & y & z \\ \begin{matrix} x \\ y \\ z \end{matrix} & \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 5 & -1 \\ -4 & -2 & 4 \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$

pedig egy mátrix. (Feltüntetjük a sorokat és az oszlopokat jelző szimbólumokat.) Ebben a példában  $\alpha_{xx} = 1, \alpha_{xy} = 2, \alpha_{xz} = 3$ . A (2.1) egyenlet szerint a  $\mathbf{v}' = \alpha\mathbf{v}$  vektor  $x$ -komponensét

$$v'_x = \alpha_{xx} v_x + \alpha_{xy} v_y + \alpha_{xz} v_z \\ = 1 \cdot 1 + 2 \cdot 0 + 3(-2) = -5$$

adja meg.

A fenti egyszerű általánosítás teljesen formális; csupán más módon indexeltük a koordinátatengelyeket, valamint a vektorok és a mátrixok komponenseit. Két, ugyanazon tér vektoraira ható mátrix egymással összeszorozható, ugyanúgy, ahogy az előző fejezetben láttuk. A

$$\gamma = \beta\alpha \quad (2.2)$$

egyenlet ugyanazt fejezi ki, mint a

$$\gamma_{jk} = \sum_{l \in G} \beta_{jl} \alpha_{lk},$$

ahol  $j$  és  $k$  a  $G$  halmaz két eleme, és  $l$  a halmaz valamennyi elemén végigfut.

2. További általánosítás, amikor a mátrixok sorait és oszlopait *különböző halmazok*,  $F$  és  $G$  elemeivel jellemezzük. A (2.1) egyenlet helyett most

$$\mathbf{w}_j = \sum_{l \in G} \alpha_{jl} \mathbf{v}_l \quad (2.1a)$$

írható, ahol  $j$  az  $F$  halmaz egy eleme és  $l$  a  $G$  halmaz minden elemén végigfut. Az ilyen mátrixot, melynek sorait és oszlopait különböző halmazok indexelik, *derékszögű mátrixnak* nevezzük, szemben az előző fejezetben bevezetett *négyzetes mátrixokkal*; ez a  $G$  halmaz terének  $\mathbf{v}$  vektorát az  $F$  halmaz terének egy  $\mathbf{w}$  vektorába viszi át. Általában az  $F$  halmaz elemeinek száma nem szükségképpen egyenlő  $G$  elemeinek számával. Ha  $F$  és  $G$  egyenlő számú elemet tartalmaz, a mátrix sorainak és oszlopainak száma megegyezik; ilyenkor azt mondjuk, hogy a mátrix „tágabb értelemben négyzetes”.

A  $G$  halmaz álljon a  $*$ ,  $\Delta$ ,  $\square$  szimbólumokból,  $F$  pedig az 1 és 2 számokat tartalmazza. Ekkor

$$\alpha = \begin{matrix} & * & \Delta & \square \\ \begin{pmatrix} 5 & 7 & 3 \\ 0 & -1 & -2 \end{pmatrix} & 1 & & 2 \end{matrix}$$

derékszögű mátrix. (Most is feltüntettük a sorok és oszlopok jellemzőit.) A  $\mathbf{v}_* = 1$ ,  $\mathbf{v}_\Delta = 0$ ,  $\mathbf{v}_\square = -2$  vektort  $\alpha$  a

$$\mathbf{w} = \alpha \mathbf{v}$$

vektorba transzformálja. A  $\mathbf{w}_1$  és  $\mathbf{w}_2$  komponensek ekkor

$$\mathbf{w}_1 = \alpha_{1*} \mathbf{v}_* + \alpha_{1\Delta} \mathbf{v}_\Delta + \alpha_{1\square} \mathbf{v}_\square = 5 \cdot 1 + 7 \cdot 0 + 3(-2) = -1,$$

$$\mathbf{w}_2 = \alpha_{2*} \mathbf{v}_* + \alpha_{2\Delta} \mathbf{v}_\Delta + \alpha_{2\square} \mathbf{v}_\square = 0 \cdot 1 + (-1)(0) + (-2)(-2) = 4.$$

Két derékszögű mátrix,  $\beta$  és  $\alpha$ , csak akkor szorozható össze, ha az első tényező oszlopait s a második tényező sorait ugyanazon  $F$  halmaz segítségével indexeltük; azaz ha a második tényező sorai és az első tényező oszlopai „összeillenek”. Az első tényező sorai és a második tényező oszlopai azonban különböző  $E$  és  $G$  halmazoknak felelhetnek meg. Ekkor

$$\gamma = \beta\alpha \quad (2.2a)$$



a következőt jelenti:

$$\gamma_{jk} = \sum_{l \in F} \beta_{jl} \alpha_{lk},$$

ahol  $j$  az  $E$ ,  $k$  pedig a  $G$  halmaz eleme, és  $l$  az  $F$  halmaz összes elemén fut végig. Az  $\alpha$  derékszögű mátrix  $G$  terének valamely vektorát  $F$  terének egy vektorába viszi át; majd a  $\beta$  mátrix ezt a vektort  $E$  terének egy vektorába transzformálja. A  $\gamma$  mátrix ennél fogva  $G$  terének valamely vektorát  $E$  terének egy vektorába viszi át.

Legyen  $G$  ismét a  $*$ ,  $\Delta$ ,  $\square$  halmaz,  $F$  tartalmazza az  $x$  és  $y$  betűket,  $E$  pedig az 1 és 2 számokat. Ekkor ha

$$\beta = \begin{matrix} & \begin{matrix} x & y \end{matrix} \\ \begin{matrix} 1 \\ 2 \end{matrix} & \begin{pmatrix} 7 & 8 \\ 9 & 3 \end{pmatrix} \end{matrix} \quad \text{és} \quad \alpha = \begin{matrix} & \begin{matrix} * & \Delta & \square \end{matrix} \\ \begin{matrix} x \\ y \end{matrix} & \begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 5 & 6 & 7 \end{pmatrix} \end{matrix},$$

a szorzatmátrix  $1*$ ,  $2\Delta$  elemei például

$$\gamma_{1*} = \beta_{1x} \alpha_{x*} + \beta_{1y} \alpha_{y*} = 7 \cdot 2 + 8 \cdot 5 = 54,$$

$$\gamma_{2\Delta} = \beta_{2x} \alpha_{x\Delta} + \beta_{2y} \alpha_{y\Delta} = 9 \cdot 3 + 3 \cdot 6 = 45$$

és

$$\gamma = \begin{matrix} & \begin{matrix} * & \Delta & \square \end{matrix} \\ \begin{matrix} 1 \\ 2 \end{matrix} & \begin{pmatrix} 54 & 69 & 84 \\ 33 & 45 & 57 \end{pmatrix} \end{matrix} \begin{matrix} 1 \\ 2 \end{matrix}.$$

3. Most megvizsgáljuk, miképpen kell módosítani a derékszögű mátrixok esetében a mátrixkalkulus tíz tételét, melyeket az 1. fejezetben vezettünk le. Azonnal látjuk, hogy e tételek az e fejezet elején említett általánosított négyzetes mátrixokra igazak maradnak, mivel az indexek speciális *numerikus természetét* sehol sem használtuk ki az első fejezetben.

Két derékszögű mátrix összeadása — akárcsak két vektoré — feltételezi, hogy azok ugyanazon koordinátarendszerben vannak definiálva, azaz *a sorok a sorokkal és az oszlopok az oszlopokkal* összeillenek. Az

$$\alpha + \beta = \gamma$$

egyenletben az  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  mátrixok sorainak, valamint oszlopainak indexelése meg kell hogy egyezzek. Szorzás esetén viszont az első tényező oszlopainak és a második tényező sorainak kell összeilleniök; csakis ekkor szerkeszthető meg a szorzat, s ennek teljesülése mellett mindig megszerkeszthető. A kapott szorzat sorainak indexelése az előző tényező sorindexelésével, oszlopainak indexelése pedig a második tényező oszlopainak indexelésével egyezik meg.

1. tétel. Ha a derékszögű mátrix sorainak és oszlopainak száma egyenlő, beszélhetünk a mátrix determinánsáról, még ha a sorok és oszlopok indexelése külön-

bőzik is. A „tágabb értelemben négyzetes” mátrixokra ugyancsak érvényes a szabály, hogy a szorzat determinánsa egyenlő a determinánsok szorzatával.

2. és 3. tétel. Az asszociatív törvény fennáll a derékszögű mátrixok szorzására is:

$$(\alpha\beta)\gamma = \alpha(\beta\gamma). \quad (2.3)$$

Nyilvánvaló, hogy a jobb oldalon kijelölt valamennyi szorzás elvégezhető, ha a bal oldali szorzások elvégezhetőek, és megfordítva.

4., 5. és 6. tétel. Az  $\mathbf{1}$  mátrixon mindig négyzetes mátrixot értünk, melynek sorait és oszlopait ugyanaz a halmaz indexeli. Az  $\mathbf{1}$  mátrixszal való szorzás mindenkor elhagyható.

A szó tágabb értelmében négyzetes mátrixoknak csak akkor van reciprokuk, ha determinánsuk nem tűnik el. Derékszögű mátrixok esetében, amelyek sorainak és oszlopainak száma különböző, az inverz nincs definiálva. Ha az  $\alpha$  mátrix csupán tágabb értelemben négyzetes, a

$$\beta\alpha = \mathbf{1}$$

egyenlet maga után vonja, hogy  $\beta$  oszlopai és  $\alpha$  sorai összeillenek. Azonfelül az  $\mathbf{1}$  mátrix sorainak és  $\beta$  sorainak, valamint  $\mathbf{1}$  oszlopainak és  $\alpha$  oszlopainak is össze kell illeniök. Minthogy  $\mathbf{1}$  szoros értelemben vett négyzetes mátrix,  $\alpha$  oszlopainak és  $\beta$  sorainak is illeszkedniök kell.

Az  $\alpha$  mátrix  $\beta$  inverzének sorait ugyanaz a halmaz jellemzi, amely az  $\alpha$  oszlopai-ban álló elemek jelzésére szolgál;  $\beta$  oszlopainak indexelése pedig  $\alpha$  soraiéval egyezik meg. Minden  $\alpha$  mátrixnak, mely tágabb értelemben négyzetes és determinánsa zérustól különböző, van inverze; a  $\beta$  inverz mátrixra

$$\beta\alpha = \mathbf{1} \quad (2.4)$$

teljesül. Fennáll azonkívül

$$\alpha\beta = \mathbf{1} \quad (2.4a)$$

is. Meg kell azonban jegyezni, hogy az  $\mathbf{1}$  mátrix sorainak és oszlopainak indexelése (2.4) és (2.4a) alatt különböző.

7. tétel. Ami az összeadást és a zérusmátrixot illeti, a derékszögű mátrixokra ugyanazok a szabályok érvényesek, mint a négyzetes mátrixokra. A derékszögű mátrixok hatványai azonban nem képezhetőek, minthogy  $\alpha$ -nak  $\alpha$ -val való szorzása feltételezi, hogy  $\alpha$  oszlopai és  $\alpha$  sorai összeillenek, azaz hogy  $\alpha$  négyzetes mátrix.

8., 9. és 10. tétel. A derékszögű mátrixok esetében az átlós mátrix és az átlós-összeg fogalmának nincs értelme; a hasonlósági transzformáció sincs definiálva. Vegyük szemügyre a

$$\sigma\alpha\sigma^{-1} = \beta$$

egyenletet. Ez maga után vonja, hogy  $\beta$  és  $\sigma$  sorainak indexelése megegyező. Ez egyszersmind  $\sigma^{-1}$  oszlopainak, és így  $\beta$  oszlopainak indexelésével is megegyezik.

Ebből következik, hogy  $\beta$  szoros értelemben vett négyzetes mátrix; hasonlóképpen  $\alpha$  sorainak is illeszkedniök kell  $\sigma$  oszlopaihoz, oszlopainak pedig  $\sigma^{-1}$  soraihoz, aminek következtében  $\alpha$  is szükségképpen szoros értelemben vett négyzetes mátrix.

Másrészeztől azonban  $\sigma$  maga lehet tágabb értelemben vett négyzetes mátrix:  $\alpha$  és  $\beta$  oszlopai és sorai ekkor más-más halmaz elemeinek felelnek meg. Az olyan hasonlósági transzformációk, amelyek újraindexelik a sorokat és oszlopokat, különösen fontosak. Ilyen transzformációkra a kvantummechanika transzformációelmélete szolgáltat példát.

A derékszögű mátrixok bevezetése igen előnyös, annak ellenére, hogy látszólag bonyodalmakkal jár; segítségükkel ugyanis lényeges egyszerűsítések érhetők el. Amit fent felvázoltunk, ne mint merev skémát fogjuk fel. Inkább az volt vele a célunk, hogy az olvasó megszokja, hogy ezen objektumok segítségével gondolkodják. Az ilyen komplikáltabb mátrixok használatát mindig tüzetesen meg fogjuk magyarázni, hacsak a sorok és oszlopok indexelése nem annyira világos az elemek alakjából és definíciójából, hogy a további magyarázat szükségtelen.

4. Igen gyakran előfordul, hogy a sorokat nem egy, hanem két vagy több szám segítségével jelöljük meg. Egy példa:

$$\gamma = \begin{pmatrix} a_1 b_1 c_1 d_1 & a_1 b_1 c_1 d_2 & a_1 b_1 c_2 d_1 & a_1 b_1 c_2 d_2 \\ a_1 b_2 c_1 d_1 & a_1 b_2 c_1 d_2 & a_1 b_2 c_2 d_1 & a_1 b_2 c_2 d_2 \\ a_2 b_1 c_1 d_1 & a_2 b_1 c_1 d_2 & a_2 b_1 c_2 d_1 & a_2 b_1 c_2 d_2 \\ a_2 b_2 c_1 d_1 & a_2 b_2 c_1 d_2 & a_2 b_2 c_2 d_1 & a_2 b_2 c_2 d_2 \end{pmatrix}. \quad (2.E.1)$$

Az első oszlopot „1,1 oszlop”-nak, a másodikat „1,2 oszlop”-nak, a harmadikat „2,1 oszlop”-nak, a negyediket „2,2 oszlop”-nak nevezzük; a sorokat hasonlóképpen jelöljük meg. A (2.E.1) mátrix elemei:

$$\gamma_{ij;kl} = a_i b_j c_k d_l.$$

Félreértések elkerülése miatt a sorok és oszlopok indexeit pontosvessző segítségével különválasztjuk.

Az ilyen mátrixok közül különösen fontos két mátrix,  $(\alpha_{ik})$  és  $(\beta_{jl})$

$$\gamma = \alpha \times \beta \quad (2.5)$$

direkt szorzata. A (2.5) egyenlet egyenértékű a

$$\gamma_{ij;kl} = \alpha_{ik} \beta_{jl} \quad (2.6)$$

egyenlettel.<sup>1</sup> Ha  $\alpha$  sorainak száma  $n_1$ , oszlopainak száma  $n_2$ ,  $\beta$  sorainak és oszlo-

<sup>1</sup> A közönséges mátrixszorzat  $a, \bar{a}$  tényezőit egyszerűen egymás mellé írjuk:  $a\bar{a}$ . A (2.E.1) mátrix a következőképpen írható fel mint két mátrix direkt szorzata:

$$\begin{pmatrix} a_1 c_1 & a_1 c_2 \\ a_2 c_1 & a_2 c_2 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} b_1 d_1 & b_1 d_2 \\ b_2 d_1 & b_2 d_2 \end{pmatrix} = \gamma.$$

painak száma pedig  $n_1'$ , ill.  $n_2'$ , akkor  $\gamma$ -nak pontosan  $n_1 n_1'$  sora és  $n_2 n_2'$  oszlopa van. Speciálisan, ha  $\alpha$  és  $\beta$  mindkettő négyzetes mátrixok, akkor  $\alpha \times \beta$  szintén négyzetes mátrix.

1. tétel. Ha  $\overline{\alpha\alpha} = \overline{\alpha}$  és  $\overline{\beta\beta} = \overline{\beta}$ , és ha  $\alpha \times \beta = \gamma$  és  $\overline{\alpha} \times \overline{\beta} = \overline{\gamma}$ , akkor  $\gamma\overline{\gamma} = \overline{\alpha} \times \overline{\beta}$ , részletesen:

$$(\alpha \times \beta)(\overline{\alpha} \times \overline{\beta}) = \overline{\alpha\alpha} \times \overline{\beta\beta}. \quad (2.7)$$

Azaz két direkt szorzat mátrixszorzata egyenlő a mátrixszorzatok direkt szorzatával. Abból a célból, hogy ezt megmutassuk, tekintsük a következő kifejezéseket:

$$(\alpha \times \beta)_{ik; i'k'} = \alpha_{ii'} \beta_{kk'}, \quad (\overline{\alpha} \times \overline{\beta})_{i'k'; i''k''} = \overline{\alpha}_{i'i''} \overline{\beta}_{k'k''}$$

és

$$(\alpha \times \beta)(\overline{\alpha} \times \overline{\beta})_{ik; i''k''} = \sum_{i'k'} \alpha_{ii'} \beta_{kk'} \overline{\alpha}_{i'i''} \overline{\beta}_{k'k''}. \quad (2.8)$$

Fennáll azonban:

$$(\overline{\alpha\alpha})_{ii''} = \sum_{i'} \alpha_{ii'} \overline{\alpha}_{i'i''}, \quad (\overline{\beta\beta})_{kk''} = \sum_{k'} \beta_{kk'} \overline{\beta}_{k'k''}$$

és

$$(\overline{\alpha\alpha} \times \overline{\beta\beta})_{ik; i''k''} = \sum_{i'} \alpha_{ii'} \overline{\alpha}_{i'i''} \sum_{k'} \beta_{kk'} \overline{\beta}_{k'k''}. \quad (2.9)$$

Ennélfogva (2.8) és (2.9) alapján megkapjuk az 1. tételt:

$$(\alpha \times \beta)(\overline{\alpha} \times \overline{\beta}) = \overline{\alpha\alpha} \times \overline{\beta\beta}.$$

2. tétel. Két átlós mátrix direkt szorzata ugyancsak átlós mátrix; két egység-mátrix direkt szorzata egységmátrix. Ez könnyen látható a direkt szorzatok definíciójából.

A formális mátrixműveletek elvégzésekor meg kell bizonyosodnunk arról, hogy a kijelölt szorzás ténylegesen elvégezhető-e. Az első fejezetben, ahol mindvégig  $n$ -soros,  $n$ -oszlopos négyzetes mátrixokkal volt dolgunk, természetesen mindig elvégezhetőek voltak a műveletek. Általában azonban meg kell állapítanunk, hogy a mátrixszorzat első tényezőjének sorai illeszkednek-e a második tényező oszlopaihoz, azaz kettejüknek azonos-e az indexelése (elnevezése). Két mátrix direkt szorzata mindig megszerkeszthető (2.6) szerint.

A mátrix egy általánosított fajtáját M. BORN és P. JORDAN „szupermátrix”-nak nevezi. Az  $(\alpha_{ij;kl})$  mátrix értelmezésük szerint olyan  $(A_{ik})$  mátrix, amelynek  $A_{ik}$  elemei maguk is mátrixok.  $A_{ik}$  azt a mátrixot jelenti, melyben az  $\alpha_{ij;kl}$  szám a  $j$ -edik sorban és az  $l$ -edik oszlopban lép fel:

$$(\alpha_{ij;kl}) = \alpha = (A_{ik}), \quad \text{ahol } (A_{ik})_{jl} = \alpha_{ij;kl}. \quad (2.10)$$

3. tétel. Ha  $\alpha = (A_{i' i'})$  és  $\beta = (B_{i' i'})$ , akkor  $\alpha\beta = \gamma = (C_{i' i'})$ , ahol

$$C_{i' i''} = \sum_{i'} A_{i' i'} B_{i' i''}. \quad (2.11)$$

A (2.11) egyenlet jobb oldala *mátrixszorzással* kapott szorzatok összege:

$$(\alpha\beta)_{ik; i''k''} = \sum_{i', k'} \alpha_{ik; i'k'} \beta_{i'k'; i''k''};$$

másrésről

$$\gamma_{ik; i''k''} = (C_{ii'')_{kk''}} = \sum_{i'} (A_{ii'} B_{i'i''})_{kk''}$$

és

$$(A_{ii'} B_{i'i''})_{kk''} = \sum_{k'} (A_{ii'})_{kk'} (B_{i'i''})_{k'k''} = \sum_{k'} \alpha_{ik; i'k'} \beta_{i'k'; i''k''}.$$

Ennélfogva

$$(\alpha\beta)_{ik; i''k''} = \gamma_{ik; i''k''},$$

amivel a 3. tételt bebizonyítottuk. Természetesen (2.11) jobb oldalán ügyelnünk kell a tényezőik sorrendjére (az egyszerű mátrixok szorzására vonatkozó egyenletben erre nem volt szükség). Ezzel az egyetlen korlátozással a supermátrixok az egyszerű mátrixokra vonatkozó szabályok szerint szorozhatók össze.

Egyszerű eset a

$$\begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} & \alpha_{14} & \alpha_{15} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} & \alpha_{24} & \alpha_{25} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} & \alpha_{34} & \alpha_{35} \\ \alpha_{41} & \alpha_{42} & \alpha_{43} & \alpha_{44} & \alpha_{45} \\ \alpha_{51} & \alpha_{52} & \alpha_{53} & \alpha_{54} & \alpha_{55} \end{pmatrix} \quad \text{és} \quad \begin{pmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \beta_{13} & \beta_{14} & \beta_{15} \\ \beta_{21} & \beta_{22} & \beta_{23} & \beta_{24} & \beta_{25} \\ \beta_{31} & \beta_{32} & \beta_{33} & \beta_{34} & \beta_{35} \\ \beta_{41} & \beta_{42} & \beta_{43} & \beta_{44} & \beta_{45} \\ \beta_{51} & \beta_{52} & \beta_{53} & \beta_{54} & \beta_{55} \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

négyzetes mátrixok szorzása. A szaggatott vonalak segítségével ezeket almátrixokra oszthatjuk fel, vigyázva, hogy az oszlopok felosztása az első mátrixban (2 : 3) megegyezzen a második mátrixban a sorok felosztásával. A (2.12) alatt álló két mátrix rövidebb alakban így írható fel:

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \quad \text{és} \quad \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix}.$$

A (2.12) alatt megadott két mátrix szorzata a következőképpen írható:

$$\begin{pmatrix} A_{11}B_{11} + A_{12}B_{21} & A_{11}B_{12} + A_{12}B_{22} \\ A_{21}B_{11} + A_{22}B_{21} & A_{21}B_{12} + A_{22}B_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{pmatrix}.$$

Másrésről viszont a

$$\begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_{11}A_{11} + B_{12}A_{21} & B_{11}A_{12} + B_{12}A_{22} \\ B_{21}A_{11} + B_{22}A_{21} & B_{21}A_{12} + B_{22}A_{22} \end{pmatrix}$$

kifejezés értelmetlen, minthogy pl.  $B_{11}$  oszlopainak száma különbözik  $A_{11}$  sorainak számától.

### 3. A FŐTENGELY-TRANSZFORMÁCIÓ

Az első fejezetben a hasonlósági transzformációk egy igen fontos tulajdonságát állapítottuk meg. A mátrix átlósösszegét változatlanul hagyják;<sup>1</sup> az  $\alpha$  mátrixnak ugyanaz az átlósösszege, mint a  $\sigma^{-1}\alpha\sigma$  mátrixé. Vajon egyedül a mátrix átlósösszege invariáns hasonlósági transzformációval szemben? Nyilvánvalóan nem, mivel pl. a  $|\sigma^{-1}\alpha\sigma|$  determináns szintén egyenlő az  $|\alpha|$  determinánssal. Abból a célból, hogy további invariánsokat kapjunk, képezzük a következő,  $\lambda$ -ban  $n$ -edfokú determinánsegyenletet:

$$\begin{vmatrix} \alpha_{11}-\lambda & \alpha_{12} & \dots & \alpha_{1n} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22}-\lambda & \dots & \alpha_{2n} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \dots & \alpha_{nn}-\lambda \end{vmatrix} = 0, \quad (3.1)$$

vagy rövidebb alakban:

$$|\alpha - \lambda \mathbf{1}| = 0. \quad (3.2)$$

Ennek neve:  $\alpha$  *szekuláris egyenlete*. A  $\beta = \sigma^{-1}\alpha\sigma$  mátrix szekuláris egyenlete

$$|\beta - \lambda \mathbf{1}| = |\sigma^{-1}\alpha\sigma - \lambda \mathbf{1}| = 0. \quad (3.3)$$

Nyilvánvaló, hogy a  $|\sigma^{-1}(\alpha - \lambda \mathbf{1})\sigma|$  determináns ugyancsak egyenlő zérussal; ez így írható:

$$|\sigma^{-1}| \cdot |\alpha - \lambda \mathbf{1}| \cdot |\sigma| = 0. \quad (3.4)$$

A (3.4) egyenlet mutatja, hogy a  $|\beta - \lambda \mathbf{1}| = 0$  szekuláris egyenlet  $n$  gyöke megegyezik<sup>2</sup> az  $|\alpha - \lambda \mathbf{1}| = 0$  szekuláris egyenlet  $n$  számú gyökével. *A szekuláris egyenlet gyökeit a mátrix sajátértékeinek nevezzük. Ezek mind invariánsak hasonlósági transzformációkkal szemben.* Később látni fogjuk, hogy a mátrixnak általában nincs más invariánsa. Az átló a sajátértékek összege, a determináns pedig a sajátértékek szorzata, tehát ezek invarianciája is benne van a fent kimondott tételben.

<sup>1</sup> Ama mátrix, amelyre hasonlósági transzformációt alkalmazunk, csak négyzetes mátrix lehet. Ennélfogva a sorokat és oszlopokat újból az 1, 2, ...,  $n$  számokkal jellemezzük.

<sup>2</sup>  $|\sigma^{-1}|$  és  $|\sigma|$  számok!

Legyen  $\lambda_1$  sajátérték. Az  $(\alpha - \lambda_1 \mathbf{1})$  mátrix determinánása zérus, így tehát a

$$\begin{aligned} \alpha_{11}r_1 + \alpha_{12}r_2 + \dots + \alpha_{1n}r_n &= \lambda_1 r_1, \\ \alpha_{21}r_1 + \alpha_{22}r_2 + \dots + \alpha_{2n}r_n &= \lambda_1 r_2, \\ &\vdots \\ \alpha_{n1}r_1 + \alpha_{n2}r_2 + \dots + \alpha_{nn}r_n &= \lambda_1 r_n \end{aligned} \quad (3.5)$$

homogén lineáris egyenleteknek van megoldása. Az  $n$  számú  $\lambda_k$  sajátérték mindegyike esetében felírhatunk egy (3.5)-höz hasonló lineáris homogén egyenletrendszert. Jelöljük ezen egyenletrendszer megoldását (ami csupán egy közös állandó tényező erejéig van meghatározva) a következőképpen:  $r_{1k}, r_{2k}, \dots, r_{nk}$ ; ekkor írható:

$$\sum_j \alpha_{ij} r_{jk} = \lambda_k r_{ik}. \quad (3.5a)$$

Az  $r_{1k}, r_{2k}, \dots, r_{nk}$  szám- $n$ -es az  $\alpha$  mátrix egy  $r_{\cdot k}$  sajátvektora; az  $r_{\cdot k}$  sajátvektor a  $\lambda_k$  sajátértékhez tartozik. A (3.5a) egyenlet tehát így írható:

$$\alpha r_{\cdot k} = \lambda_k r_{\cdot k}. \quad (3.5b)$$

A mátrix a sajátvektort annak állandó számszorosába transzformálja; ez a szám a sajátérték.

Az  $r_{\cdot 1}, r_{\cdot 2}, \dots, r_{\cdot n}$  sajátvektorok összefoglalhatók egy  $Q$  mátrixba oly módon, hogy e mátrix  $k$ -adik oszlopa lesz:

$$Q_{ik} = (r_{\cdot k})_i = r_{ik}.$$

Eszerint (3.5a) bal oldalán az  $\alpha Q$  mátrix  $(ik)$  eleme áll. A jobb oldal ugyancsak értelmezhető egy mátrix  $(ik)$  elemeként; ez a mátrix  $Q\Lambda$ , ahol  $\Lambda$  átlós mátrix a  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  átlós elemekkel:

$$\Lambda_{jk} = \delta_{jk} \lambda_k.$$

Most tehát (3.5a) így írható:

$$(\alpha Q)_{ik} = \sum_j Q_{ij} \delta_{jk} \lambda_k = (Q\Lambda)_{ik};$$

a (3.5a) alatt felírt  $n^2$  számú egyenlet -eszerint az

$$\alpha Q = Q\Lambda \quad (3.6)$$

alakban tömöríthető; vagy másképpen:

$$Q^{-1} \alpha Q = \Lambda \quad (3.6a)$$

*feltéve, hogy  $Q$ -nak van reciproka.*

*Ha hasonlósági transzformációt hajtunk végre ama mátrix segítségével, amelynek oszlopaait az  $n$  sajátvektor alkotja, ez az eredeti mátrixot átlós alakúvá transzformálja; az átlós elemek a mátrix sajátértékei. Két mátrix, melyeknek ugyanazok a sajátértékeik, mindig egymásba transzformálható, mivel transzformáció útján mind a*

ketten ugyanabba a mátrixba vihetők át. A sajátértékek a mátrix egyedüli invariánsai hasonlósági transzformációkkal szemben.

Ez természetesen csak akkor igaz, ha  $\alpha$ -nak van reciproka, azaz ha az  $n$  számú  $r_1, r_2, \dots, r_n$  vektor lineárisan független. Általában ez a helyzet; a sajátvektorok mindig lineárisan függetlenek, ha a sajátértékek mind különböznek egymástól. Mindazonáltal vannak kivételek, amint azt például az

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{vagy} \quad \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & -1 \end{pmatrix}$$

mátrixok mutatják. Ezek semmilyen hasonlósági transzformációval nem hozhatók átlós alakra. Az ilyen mátrixokkal az elemi osztók elmélete foglalkozik; ennek részleteibe nem kell belemennünk, mivel mindig olyan mátrixokkal lesz dolgunk, amelyek a (3.6a) átlós alakra hozhatók (így pl. unitér, hermitikus mátrixokkal).

Két mátrix felcserélhetőségének feltétele a fenti nézőpontból szemlélve könnyen megfogalmazható. Ha két mátrix ugyanazon transzformáció segítségével átlós alakra hozható, azaz ha ugyanazok a sajátvektoraik, akkor ez a két mátrix felcserélhető egymással.<sup>3</sup> A hasonlósági transzformáció elvégzése után mint átlós mátrixok nyilvánvalóan felcserélhetők; kommutálniuk kell tehát eredeti alakjukban is.

Az első fejezetben definiáltuk valamely mátrix

$$f(\alpha) = \dots a_{-3}\alpha^{-3} + a_{-2}\alpha^{-2} + a_{-1}\alpha^{-1} + a_0\mathbf{1} + a_1\alpha + a_2\alpha^2 + a_3\alpha^3 + \dots$$

racionalis függvényét. Abból a célból, hogy  $f(\alpha)$ -t átlós alakra hozzuk, elegendő, ha  $\alpha$ -t átlós alakúvá transzformáljuk:  $\Lambda = \sigma^{-1}\alpha\sigma$ . Ekkor az 1. fejezet 10. tétele szerint

$$\begin{aligned} \sigma^{-1}f(\alpha)\sigma &= \sigma^{-1}(\dots a_{-2}\alpha^{-2} + a_{-1}\alpha^{-1} + a_0\mathbf{1} + a_1\alpha + a_2\alpha^2 + \dots)\sigma = \\ &= \dots a_{-2}\Lambda^{-2} + a_{-1}\Lambda^{-1} + a_0\mathbf{1} + a_1\Lambda + a_2\Lambda^2 + \dots = f(\Lambda) \end{aligned}$$

és ez, ahogy előttünk áll, már átlós mátrix. Ha  $\lambda_k$  a  $\Lambda = (\Lambda_{ik}) = (\delta_{ik}\lambda_k)$  mátrix  $k$ -adik átlós eleme, úgy  $(\lambda_k)^e$  a  $(\Lambda)^e$  mátrix  $k$ -adik átlós eleme, és

$$\dots a_{-2}\lambda_k^{-2} + a_{-1}\lambda_k^{-1} + a_0 + a_1\lambda_k + a_2\lambda_k^2 + \dots = f(\lambda_k).$$

a  $k$ -adik átlós elem  $f(\Lambda)$ -ban.

Az  $\alpha$  mátrix valamely  $f(\alpha)$  racionalis függvénye ugyanazon transzformáció segítségével hozható átlós alakra, mint maga az  $\alpha$  mátrix. Az átlós elemek [azaz  $f(\alpha)$  sajátértékei] ugyanezen függvény segítségével kaphatók meg az  $\alpha$  mátrix  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  átlós elemeiből;  $f(\alpha)$  sajátértékei tehát  $f(\lambda_1), f(\lambda_2), \dots, f(\lambda_n)$ . Feltesszük, hogy ez a törvény nemcsak a racionalis függvényekre, hanem  $\alpha$  tetszőleges  $F(\alpha)$  függvényeire is érvényes; ezt tekintjük az általános mátrixfüggvények definíciójának.

<sup>3</sup> Megjegyezzük, hogy a sajátértékek tetszőlegesen különbözőek lehetnek.



## SPECIÁLIS MÁTRIXOK

Az  $\alpha$  négyzetes mátrixból egy új  $\alpha'$  mátrixot kaphatunk, ha a sorokat és az oszlopokat egymással felcseréljük. Az így képezett  $\alpha'$  mátrix neve:  $\alpha$  *transzponáltja*. A transzponálást a vessző jelzi. Eszerint

$$\alpha'_{ik} = \alpha_{ki}. \quad (3.7)$$

*Szabály:* Valamely  $\alpha\beta\gamma\delta\dots$  szorzat transzponáltja egyenlő a transzponált mátrixok fordított sorrendben képezett szorzatával:

$$(\alpha\beta\gamma\dots\varepsilon)' = \varepsilon' \dots \gamma' \beta' \alpha'. \quad (3.7a)$$

A bal oldal  $ki$  eleme:

$$(\alpha\beta\gamma\dots\varepsilon)'_{ki} = (\alpha\beta\gamma\dots\varepsilon)_{ik} = \sum_{\kappa\lambda\mu\dots\zeta} \alpha_{i\kappa} \beta_{\kappa\lambda} \gamma_{\lambda\mu} \dots \varepsilon_{\zeta k}.$$

A jobb oldal viszont:

$$(\varepsilon' \dots \gamma' \beta' \alpha')_{ki} = \sum_{\zeta \dots \mu \lambda \kappa} \varepsilon'_{k\zeta} \dots \gamma'_{\mu\lambda} \beta'_{\lambda\kappa} \alpha'_{\kappa i}.$$

Ezzel meggyőződünk (3.7a) fennállásáról.

Azt a mátrixot, amelyet úgy kapunk, hogy az  $n^2$  elem mindegyikét a komplex konjugáltjával helyettesítjük,  $\alpha^*$ -gal jelöljük, és az  $\alpha$  mátrix komplex konjugáltjának nevezzük. Ha  $\alpha = \alpha^*$ , valamennyi mátrixelem valós.

Ha az  $\alpha$  mátrix sorait és oszlopait egymással felcseréljük, egyszersmind a komplex konjugáltat képezzük, az  $\alpha^{*'} = \alpha'^*$  mátrixot kapjuk. Ennek jele  $\alpha^\dagger$ ; neve:  $\alpha$  *adjungáltja*. Eszerint

$$\alpha^{*'} = \alpha^\dagger = \alpha'^* \quad (3.8)$$

A szorzat komplex konjugáltja nyilvánvalóan egyenlő a komplex konjugáltak szorzatával:

$$(\alpha\beta\gamma\dots\varepsilon)^* = \alpha^* \beta^* \gamma^* \dots \varepsilon^*.$$

Ha az adjungáltat képezzük, a sorrendet az ellenkezőre kell változtatnunk:

$$\begin{aligned} (\alpha\beta\gamma\dots\varepsilon)^\dagger &= (\alpha\beta\gamma\dots\varepsilon)^{*'} = (\alpha^* \beta^* \gamma^* \dots \varepsilon^*)' \\ &= (\varepsilon^{*'} \dots \gamma^{*'} \beta^{*'} \alpha^{*'}) = \varepsilon^\dagger \dots \gamma^\dagger \beta^\dagger \alpha^\dagger. \end{aligned} \quad (3.8a)$$

Különbféle összefüggéseket feltételezve az  $\alpha$  mátrix, annak adjungáltja, transzponáltja és reciproka között, speciális fajta mátrixokat kaphatunk. Minthogy ezek nevei sűrűn szerepelnek az irodalomban, mindegyik fajtáról megemlékezünk; a következőkben *unitér*, *hermitikus* és *valós ortogonális mátrixokkal* fogunk találkozni.

Ha  $\alpha = \alpha^*$  (azaz  $\alpha_{ik} = \alpha_{ik}^*$ ), *valós mátrixokról* beszélünk; ekkor mind az  $n^2$  mátrixelem valós. Ha  $\alpha = -\alpha^*$  ( $\alpha_{ik} = -\alpha_{ik}^*$ ), akkor a mátrix tisztán képzetes.

Ha  $S=S'$  ( $S_{ik}=S_{ki}$ ), a mátrix *szimmetrikus*; ha  $S=-S'$  ( $S_{ik}=-S_{ki}$ ), a mátrix *antiszimmetrikus*.

Ha  $H=H^\dagger$  ( $H_{ik}=H_{ki}^*$ ), azt mondjuk, hogy a mátrix *hermitikus*; ha  $A=-A^\dagger$ , akkor a mátrix *antihermitikus*.

Ha  $\alpha$  *valós, valamint szimmetrikus*, akkor egyszersmind *hermitikus* is stb.  
 Ha  $O'=O^{-1}$ , akkor  $O$  *komplex ortogonális*. Az  $U$  mátrixot, ha  $U^\dagger=U^{-1}$ , *unitérnek* mondjuk. Ha  $R^\dagger=R^{-1}$  és  $R=R^*$  (valós), akkor  $R'=R^{*'}=R^\dagger=R^{-1}$  és  $R'=R^{-1}$ ;  $R$  neve ekkor *valós ortogonális*, vagy egyszerűen *ortogonális mátrix*.

## UNITÉR MÁTRIXOK ÉS A SKALÁRIS SZORZAT

Az unitér mátrixok tárgyalása előtt be kell vezetnünk még egy új fogalmat. A legelső fejezetben definiáltuk két vektor összegét, valamint egy vektor állandó-szorosát. További fontos elemi fogalom két vektor *skaláris szorzata*. Az  $\mathbf{a}$  vektor-nak a  $\mathbf{b}$  vektorral képezett skaláris szorzata egy szám. Különbséget kell tennünk az

$$a_1^*b_1 + a_2^*b_2 + \dots + a_n^*b_n = (\mathbf{a}, \mathbf{b}) \quad (3.9)$$

hermitikus skalárszorzat és az

$$a_1b_1 + a_2b_2 + \dots + a_nb_n = ((\mathbf{a}, \mathbf{b})) \quad (3.9a)$$

közönséges skalárszorzat között. A következőkben, hacsak nem mondjuk az ellen-kezőjét, skaláris szorzaton nem a közönséges, hanem a *hermitikus* skalárszorzatot értjük. Ha az  $a_1, a_2, \dots, a_n$  vektorkomponensek valósak, a két skalárszorzat meg-egyeznek.

Ha  $(\mathbf{a}, \mathbf{b})=0=(\mathbf{b}, \mathbf{a})$ , akkor azt mondjuk, hogy  $\mathbf{a}$  és  $\mathbf{b}$  ortogonális egymásra. Ha  $(\mathbf{a}, \mathbf{a})=1$ ,  $\mathbf{a}$ -ra azt mondjuk, hogy *egységvektor*, vagy azt, hogy *normált*. Az  $(\mathbf{a}, \mathbf{a})$  szorzat mindig valós és pozitív, és csak akkor tűnik el, ha  $\mathbf{a}$  összes kom-ponense zérus. Ez csak a hermitikus skalárszorzatra vonatkozik, a közönséges skalárszorzatra nem áll. Tegyük fel, hogy  $\mathbf{a}$  az  $(1, i)$  komponensekkel rendelkező kétdimenziós vektor. Ekkor  $((\mathbf{a}, \mathbf{a}))=0$ , ugyanakkor  $(\mathbf{a}, \mathbf{a})=2$ . Ha  $(\mathbf{a}, \mathbf{a})=0$ , ebből következik, hogy  $\mathbf{a}=0$ ;  $((\mathbf{a}, \mathbf{a}))=0$  fennállásából erre nem következtethe-tünk.

*Egyszerű szabályok a skalárszorzatra*

1. A tényezők felcserélésének szabálya:

$$(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = (\mathbf{b}, \mathbf{a})^*, \quad (3.10)$$

ugyanakkor

$$((\mathbf{a}, \mathbf{b})) = ((\mathbf{b}, \mathbf{a})). \quad (3.10a)$$

2. Ha  $c$  szám,

$$(\mathbf{a}, c\mathbf{b}) = c(\mathbf{a}, \mathbf{b}) \quad \text{és} \quad ((\mathbf{a}, c\mathbf{b})) = c((\mathbf{a}, \mathbf{b})), \quad (3.11)$$

ezzel szemben

$$(c\mathbf{a}, \mathbf{b}) = c^*(\mathbf{a}, \mathbf{b}), \quad \text{viszont} \quad ((c\mathbf{a}, \mathbf{b})) = c((\mathbf{a}, \mathbf{b})).$$

3. A skalárszorzat a második tényezőben lineáris, mint hogy

$$(\mathbf{a}, b\mathbf{b} + c\mathbf{c}) = b(\mathbf{a}, \mathbf{b}) + c(\mathbf{a}, \mathbf{c}). \quad (3.12)$$

Az első tényezőben viszont „antilineáris”:

$$(a\mathbf{a} + b\mathbf{b}, \mathbf{c}) = a^*(\mathbf{a}, \mathbf{c}) + b^*(\mathbf{b}, \mathbf{c}). \quad (3.12a)$$

4. A fontos

$$(\mathbf{a}, \alpha\mathbf{b}) = (\alpha^\dagger\mathbf{a}, \mathbf{b}) \quad \text{vagy} \quad (\beta\mathbf{a}, \mathbf{b}) = (\mathbf{a}, \beta^\dagger\mathbf{b}) \quad (3.13)$$

szabály tetszőleges  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$  vektorokra és minden  $\alpha$ ,  $\beta$  mátrixra igaz. Abból a célból, hogy ezt belássuk, írjuk ki részletesen a skalárszorzatokat:

$$(\mathbf{a}, \alpha\mathbf{b}) = \sum_{k=1}^n a_k^* (\alpha\mathbf{b})_k = \sum_{k=1}^n a_k^* \sum_{\lambda=1}^n \alpha_{k\lambda} b_\lambda$$

és

$$(\alpha^\dagger\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \sum_{\lambda=1}^n (\alpha^\dagger\mathbf{a})_\lambda^* b_\lambda = \sum_{\lambda=1}^n \sum_{k=1}^n (\alpha_{k\lambda}^* a_k)^* b_\lambda = \sum_{\lambda=1}^n \sum_{k=1}^n \alpha_{k\lambda} a_k^* b_\lambda.$$

Ahelyett, hogy az egyik faktorra az  $\alpha$  mátrixot alkalmaznánk, alkalmazhatjuk az  $\alpha^\dagger$  adjungáltat a másik tényezőre.

A közönséges skalárszorzat esetében ugyanez a szabály érvényes a transzponált mátrixra, azaz

$$((\mathbf{a}, \alpha\mathbf{b})) = ((\alpha^\dagger\mathbf{a}, \mathbf{b})).$$

5. Az unitér jelleg  $\mathbf{U}^\dagger = \mathbf{U}^{-1}$  feltételét most írjuk ki valamivel részletesebben:  $\mathbf{U}^\dagger\mathbf{U} = \mathbf{1}$  azt jelenti, hogy

$$\sum_{j=1}^n (\mathbf{U}^\dagger)_{ij} U_{jk} = \sum_{j=1}^n U_{ji}^* U_{jk} = \delta_{ik}; \quad (\mathbf{U}_{.i}, \mathbf{U}_{.k}) = \delta_{ik}. \quad (3.14)$$

Ha az unitér mátrix  $n$  oszlopát egy-egy vektornak tekintjük,  $n$  ortogonális egységvektorral állunk szemben. Hasonlóképpen az  $\mathbf{U}\mathbf{U}^\dagger = \mathbf{1}$  összefüggésből következik, hogy

$$\sum_j U_{ij} U_{kj}^* = \delta_{ik}; \quad (\mathbf{U}_{k.}, \mathbf{U}_{i.}) = \delta_{ik}. \quad (3.14a)$$

Az unitér mátrix  $n$  sora szintén  $n$  ortogonális egységvektort képez.

6. Az hermitikus skalárszorzat unitér transzformáció alkalmazásakor változatlan marad; más szavakkal, tetszőleges  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$  vektorokra fennáll:

$$(\mathbf{U}\mathbf{a}, \mathbf{U}\mathbf{b}) = (\mathbf{a}, \mathbf{U}^\dagger\mathbf{U}\mathbf{b}) = (\mathbf{a}, \mathbf{b}). \quad (3.15)$$

Megfordítva, ha (3.15) fennáll az  $U$  mátrixra, ahol  $\mathbf{a}$  és  $\mathbf{b}$  két tetszőleges vektor, akkor  $U$  unitér, mivel a (3.15) egyenlet  $\mathbf{a}=\mathbf{e}_i$ ,  $\mathbf{b}=\mathbf{e}_k$  mellett ugyancsak fennáll [itt  $(\mathbf{e}_k)_l=\delta_{kl}$ ]. Ebben a speciális esetben azonban (3.15) a következő alakot ölti:

$$\begin{aligned}\delta_{ik}=(\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_k)=(U\mathbf{e}_i, U\mathbf{e}_k)&= \sum_j (U\mathbf{e}_i)_j^*(U\mathbf{e}_k)_j= \\ &= \sum_j \left( \sum_l U_{jl}\delta_{il} \right)^* \cdot \sum_l U_{jl}\delta_{kl} = \sum_j U_{ji}^* U_{jk};\end{aligned}$$

ez éppen a (3.14) egyenlet. Eszerint (3.15) annak szükséges és elegendő feltétele, hogy  $U$  unitér legyen.

Ugyanez érvényes a *komplex ortogonális* mátrixokra és a *közönséges skalárszoratra*: komplex ortogonális transzformáció alkalmazásakor a közönséges skalárszorzat változatlan marad.

7. Az  $U$  és  $V$  unitér mátrixok  $UV$  szorzata unitér:

$$(UV)^\dagger = V^\dagger U^\dagger = V^{-1}U^{-1} = (UV)^{-1}. \quad (3.16)$$

Az  $U$  unitér mátrix  $U^{-1}$  reciproka ugyancsak unitér:

$$(U^{-1})^\dagger = (U^\dagger)^\dagger = U = (U^{-1})^{-1}. \quad (3.17)$$

## UNITÉR ÉS HERMITIKUS MÁTRIXOK FŐTENGELY-TRANSZFORMÁCIÓJA

*Bármely  $V$  unitér mátrix és bármely  $H$  hermitikus mátrix átlós alakúvá transzformálható alkalmas  $U$  unitér mátrixszal elvégzett hasonlósági transzformáció segítségével.* Ilyen mátrixok esetében a 30. oldalon említett kivételes eset nem fordulhat elő. Mindenekelőtt megjegyezzük, hogy egy unitér (vagy hermitikus) mátrix, ha unitér transzformációnak vetjük alá, unitér (ill. hermitikus) marad. Az  $U^{-1}VU$  mátrix, mivel három unitér mátrix szorzata, maga is unitér. Ha  $H$  hermitikus,  $U^{-1}HU$  is az, minthogy (3.17) folytán

$$(U^{-1}HU)^\dagger = U^\dagger H U^{-1\dagger} = U^\dagger H U = U^{-1} H U. \quad (3.18)$$

Abból a célból, hogy  $V$ -t vagy  $H$ -t átlós alakra transzformáljuk, határozzuk meg  $V$ , ill.  $H$  egy sajátértékét. Legyen ez  $\lambda_1$ ; a megfelelő  $U_{\cdot 1}=(U_{11}, \dots, U_{n1})$  sajátvektor csupán egy állandó tényező erejéig van meghatározva. Ezt az állandó faktort oly módon választjuk, hogy

$$(U_{\cdot 1}, U_{\cdot 1})=1$$

teljesüljön. Ez mindig elérhető, mivel  $(U_{\cdot 1}, U_{\cdot 1})$  sohasem tűnhet el. Szerkesszünk most egy  $U$  unitér mátrixot, melynek első oszlopa  $U_{\cdot 1}$ .<sup>4</sup> Ezzel az unitér mátrixszal

<sup>4</sup> Lásd a segédtevélt a bizonyítás végén.

$\mathbf{V}$ -t vagy  $\mathbf{H}$ -t  $\mathbf{U}^{-1}\mathbf{V}\mathbf{U}$ -ba, ill.  $\mathbf{U}^{-1}\mathbf{H}\mathbf{U}$ -ba transzformáljuk. Az  $\mathbf{U}^{-1}\mathbf{V}\mathbf{U}$  mátrix első oszlopa például

$$X_{r1} = (\mathbf{U}^{-1}\mathbf{V}\mathbf{U})_{r1} = (\mathbf{U}^\dagger\mathbf{V}\mathbf{U})_{r1} = \sum_r U_{vr}^* \sum_\mu V_{v\mu} U_{\mu1} = \sum_r U_{vr}^* \lambda_1 U_{r1} = \delta_{r1} \lambda_1,$$

mivel itt  $\mathbf{U}_1$  a  $\mathbf{V}$  mátrixnak sajátvektora. Látható, hogy  $\lambda_1$  az első oszlop első sorában áll, és az első oszlop összes többi eleme zérus.

Nyilvánvaló, hogy ez nemcsak  $\mathbf{U}^{-1}\mathbf{V}\mathbf{U}$ -ra, hanem  $\mathbf{U}^{-1}\mathbf{H}\mathbf{U}$ -ra is igaz. Minthogy  $\mathbf{U}^{-1}\mathbf{H}\mathbf{U}$  hermitikus, az első sorban álló elemek is eltűnnek, a legelsőt kivéve;  $\mathbf{U}^{-1}\mathbf{H}\mathbf{U}$  eszerint a következő alakú:

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & & & \\ \vdots & & & \\ 0 & & & \end{pmatrix}. \quad (3.E.1)$$

De  $\mathbf{U}^{-1}\mathbf{V}\mathbf{U}$ -nak is pontosan ilyen alakúnak kell lennie! Minthogy  $\mathbf{X}$  unitér mátrix, az első oszlopát képező  $\mathbf{X}_1$  vektor egységvektor; ebből következik, hogy

$$|\mathbf{X}_{11}|^2 + |\mathbf{X}_{21}|^2 + \dots + |\mathbf{X}_{n1}|^2 = |\lambda_1|^2 = 1. \quad (3.E.2)$$

Ugyanez elmondható  $\mathbf{X}$  első soráról,  $\mathbf{X}_1$ -ről is. A komponensek négyzetösszege

$$|\mathbf{X}_{11}|^2 + |\mathbf{X}_{12}|^2 + \dots + |\mathbf{X}_{1n}|^2 = |\lambda_1|^2 + |\mathbf{X}_{12}|^2 + |\mathbf{X}_{13}|^2 + \dots + |\mathbf{X}_{1n}|^2 = 1,$$

ebből következik, hogy az  $\mathbf{X}_{12}, \mathbf{X}_{13}, \dots, \mathbf{X}_{1n}$  komponensek mindegyike eltűnik.

Így tehát minden unitér vagy hermitikus mátrix alkalmas unitér mátrixszal (3.E.1) alakúvá transzformálható. A (3.E.1) mátrix még nem átlós mátrix, nem is lehet, minthogy még csak egy sajátérték létezését használtuk ki. De már jobban hasonlít egy átlós mátrixhoz, mint az eredeti mátrixok ( $\mathbf{V}$  vagy  $\mathbf{H}$ ). A (3.E.1) mátrix természetes módon felírható mint supermátrix:

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{V}_1 \end{pmatrix} \quad \text{vagy} \quad \begin{pmatrix} \lambda_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{H}_1 \end{pmatrix}, \quad (3.E.3)$$

ahol a  $\mathbf{V}_1$  vagy  $\mathbf{H}_1$  mátrixnak csak  $n-1$  sora és oszlopa van. Transzformáljuk most (3.E.3)-at egy újabb,

$$\begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{U}_1 \end{pmatrix}$$

alakú unitér mátrix segítségével, ahol  $\mathbf{U}_1$ -nek csak  $n-1$  sora és oszlopa van.

Az  $\mathbf{E}$  transzformáció eredményeképpen (3.E.1) a

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{U}_1^\dagger \mathbf{V}_1 \mathbf{U}_1 \end{pmatrix} \quad \text{vagy} \quad \begin{pmatrix} \lambda_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{U}_1^\dagger \mathbf{H}_1 \mathbf{U}_1 \end{pmatrix} \quad (3.E.4)$$

alakot ölti. A fent követett eljárás újból alkalmazható:  $\mathbf{U}_1$ -et oly módon választjuk, hogy  $\mathbf{U}_1^\dagger \mathbf{V}_1 \mathbf{U}_1$ , valamint  $\mathbf{U}_1^\dagger \mathbf{H}_1 \mathbf{U}_1$  a

$$\begin{pmatrix} \lambda_2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{V}_2 \end{pmatrix}, \quad \text{ill.} \quad \begin{pmatrix} \lambda_2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{H}_2 \end{pmatrix}$$

alakot öltse, ahol  $\mathbf{V}_2$ -nek, ill.  $\mathbf{H}_2$ -nek csak  $n-2$  sora és oszlopa van. A transzformált mátrix ekkor a következő alakú:

$$\begin{pmatrix} \Lambda_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{V}_2 \end{pmatrix}, \quad \text{ahol} \quad \Lambda_1 = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}.$$

Nyilvánvaló, hogyha ezt az eljárást megismételjük,  $\mathbf{V}$  vagy  $\mathbf{H}$  végül *teljesen átlós alakot* ölt. A tételt ezzel bebizonyítottuk.

Ez a tétel nem érvényes szimmetrikus vagy komplex ortogonális mátrixokra, mint azt a 30. oldalon közölt második példa mutatja (a második mátrix szimmetrikus és komplex ortogonális). Érvényes azonban a valós szimmetrikus vagy valós ortogonális mátrixokra, amelyek speciális esetei a hermitikus, ill. unitér mátrixoknak.

*Segéd-tétel.* Ha  $(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1) = 1$ , akkor (sok különböző módon) szerkeszthető olyan unitér mátrix, amelynek első oszlopa  $\mathbf{u}_1 = (u_{11}, u_{21}, \dots, u_{n1})$ .

Szerkesszünk először általában olyan mátrixot, melynek első oszlopa  $\mathbf{u}_1$ , és amelynek determinánsa zérustól különböző. Legyen  $\mathbf{e}$  mátrix második oszlopa  $\mathbf{v}_2 = (v_{12}, v_{22}, \dots, v_{n2})$ , harmadik oszlopa  $\mathbf{v}_3$  stb.:

$$\begin{pmatrix} u_{11} & v_{12} & v_{13} & \dots & v_{1n} \\ u_{21} & v_{22} & v_{23} & \dots & v_{2n} \\ u_{31} & v_{32} & v_{33} & \dots & v_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ u_{n1} & v_{n2} & v_{n3} & \dots & v_{nn} \end{pmatrix}.$$

Az  $\mathbf{u}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3, \dots, \mathbf{v}_n$  vektorok lineárisan függetlenek, minthogy a determináns nem zérus. Azt kívánjuk, hogy ezenkívül ortogonálisak is legyenek; ezért a *Schmidt*-féle eljárás felhasználásával „ortogonalizáljuk” őket. Írjuk először  $\mathbf{v}_2$  helyére  $\mathbf{u}_2 = a_{21}\mathbf{u}_1 + \mathbf{v}_2$ -t; ez a determináns értékét változtatlanul hagyja. Ezek után határozzuk meg  $a_{21}$ -et az

$$(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2) = 0 = a_{21}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1) + (\mathbf{u}_1, \mathbf{v}_2) = a_{21} + (\mathbf{u}_1, \mathbf{v}_2)$$

feltételből. Írjuk ezután  $\mathbf{u}_3 = a_{31}\mathbf{u}_1 + a_{32}\mathbf{u}_2 + \mathbf{v}_3$ -at  $\mathbf{v}_3$  helyére és határozzuk meg  $a_{31}$ -et és  $a_{32}$ -t a

$$0 = (\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_3) = a_{31}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1) + (\mathbf{u}_1, \mathbf{v}_3),$$

$$0 = (\mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3) = a_{32}(\mathbf{u}_2, \mathbf{u}_2) + (\mathbf{u}_2, \mathbf{v}_3)$$

feltételekből. Ily módon eljárva, írjuk végül  $\mathbf{v}_n$  helyére  $\mathbf{u}_n$ -et:  $\mathbf{u}_n = a_{n1}\mathbf{u}_1 + a_{n2}\mathbf{u}_2 + \dots + a_{n,n-1}\mathbf{u}_{n-1} + \mathbf{v}_n$ , és határozzuk meg az  $a_{n1}, a_{n2}, a_{n3}, \dots, a_{n,n-1}$  együtthatókat oly módon, hogy a

$$0 = (\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_n) = a_{n1}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1) + (\mathbf{u}_1, \mathbf{v}_n),$$

$$0 = (\mathbf{u}_2, \mathbf{u}_n) = a_{n2}(\mathbf{u}_2, \mathbf{u}_2) + (\mathbf{u}_2, \mathbf{v}_n),$$

⋮

⋮

$$0 = (\mathbf{u}_{n-1}, \mathbf{u}_n) = a_{n,n-1}(\mathbf{u}_{n-1}, \mathbf{u}_{n-1}) + (\mathbf{u}_{n-1}, \mathbf{v}_n)$$

feltételek teljesüljenek.

Így az  $\frac{1}{2}n(n-1)$  számú  $a$  együttható segítségével a  $\mathbf{v}$  vektorokat helyettesítettük az  $\mathbf{u}$  vektorokkal. Az  $\mathbf{u}$ -k ortogonálisak és — a  $\mathbf{v}$ -k lineáris függetlensége folytán — nem zérusvektorok. Tegyük fel például, hogy  $\mathbf{u}_n = 0$ . Ekkor

$$a_{n1}\mathbf{u}_1 + a_{n2}\mathbf{u}_2 + \dots + a_{n,n-1}\mathbf{u}_{n-1} + \mathbf{v}_n = 0$$

volna, és mivel az  $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_n$  vektorok lineáris kombinációi az  $\mathbf{u}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_{n-1}$  vektoroknak,  $\mathbf{v}_n$  felírható lenne, mint eme  $n-1$  vektor lineáris kombinációja, ami azonban a  $\mathbf{v}$ -k lineáris függetlenségének ellentmond.

Végezetül normáljuk az  $\mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3, \dots, \mathbf{u}_n$  vektorokat; így módon olyan unitér mátrixot kapunk, melynek első oszlopa  $\mathbf{u}_1$ .

A "Schmidt-féle ortogonalizálási eljárás", megmutatja, hogy miként szerkeszthetünk lineárisan független vektorok tetszőleges rendszeréből olyan normált ortogonális rendszert, amelyben a  $k$ -adik egységvektor az eredeti vektorok közül az első  $k$  számúnak a lineáris kombinációja. Ha  $n$   $n$ -dimenziós vektorból indulunk ki, melyek teljes rendszert alkotnak, teljes ortogonális rendszert kapunk.

Ha egy  $\mathbf{V}$  unitér vagy egy  $\mathbf{H}$  hermitikus mátrixot hozunk így módon átlós alakra, a kapott  $\Lambda_v$ , ill.  $\Lambda_h$  mátrix szintén unitér, ill. hermitikus lesz:

$$\Lambda_v \Lambda_v^* = \mathbf{1}, \quad \text{vagy} \quad \Lambda_h = \Lambda_h^\dagger \quad (3.19)$$

Valamely unitér mátrix minden sajátértékének 1 az abszolútértéke;<sup>5</sup> hermitikus mátrix esetében a sajátértékek valósak. Ez közvetlenül következik (3.19)-ből; eszerint az unitér mátrix  $\lambda_v$  sajátértékeire fennáll:  $\lambda_v \lambda_v^* = 1$ , a hermitikus mátrixéira pedig  $\lambda_h = \lambda_h^*$ . A  $\mathbf{V}$ ,  $\mathbf{H}$  mátrixok sajátvektorairól, melyek az  $\mathbf{U}$  unitér mátrix oszlopai, feltehetjük, hogy ortogonálisak.

<sup>5</sup> Amint azt már a (3.E.2) egyenlet mutatja.

Végül megvizsgáljuk, milyen következményeket von maga után a követelmény, hogy  $\mathbf{V}$  (vagy  $\mathbf{H}$ ) komplex ortogonális (ill. szimmetrikus), és ugyanakkor unitér (ill. hermitikus) legyen. Ebben az esetben mind a  $\mathbf{V}$ , mind a  $\mathbf{H}$  mátrix valós.

Az  $\mathbf{U}^\dagger \mathbf{V} \mathbf{U} = \Lambda_v$  egyenlet komplex konjugáltja  $\mathbf{U}^{*\dagger} \mathbf{V}^* \mathbf{U}^* = (\mathbf{U}^*)^\dagger \mathbf{V} \mathbf{U}^* = \Lambda_v^*$ . Mínt hogy a sajátértékek (a szekuláris egyenlet gyökei) függetlenek attól, hogy a mátrixot miképpen ( $\mathbf{U}$  vagy  $\mathbf{U}^*$  segítségével) hoztuk átlós alakra, a  $\Lambda_v$  átlós mátrix a  $\Lambda_v^*$  alakban is felírható. A  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  és  $\lambda_1^*, \lambda_2^*, \dots, \lambda_n^*$  tehát ugyanazok a számok. Ez azt jelenti, hogy egy valós ortogonális  $\mathbf{V}$  mátrix komplex *sajátértékei konjugált párokban lépnek fel*. Mínt hogy azonfelül  $\mathbf{V} \mathbf{V}^\dagger = \mathbf{1}$ , valamennyiük abszolútértéke 1; a valós sajátértékek eszerint:  $+1$  vagy  $-1$ . Páratlan dimenziós mátrix esetében legalább egy sajátérték szükségképpen valós.

Ha  $\mathbf{v}$  a  $\lambda$  sajátértékhez tartozó sajátvektor, akkor  $\mathbf{v}^*$  is sajátvektor, mely a komplex konjugált  $\lambda^*$  sajátértékhez tartozik. Abból a célból, hogy ezt belássuk, képezzük  $\mathbf{V} \mathbf{v} = \lambda \mathbf{v}$  komplex konjugáltját:  $\mathbf{V}^* \mathbf{v}^* = \lambda^* \mathbf{v}^* = \mathbf{V} \mathbf{v}^*$ . Azonfelül ha  $\lambda^*$  különbözik  $\lambda$ -tól,  $(\mathbf{v}^*, \mathbf{v}) = 0 = ((\mathbf{v}, \mathbf{v}))$ ; ha tehát a sajátérték nem valós (nem  $\pm 1$ ) a megfelelő sajátvektor önmagával képezett közöséges skalárszorzata eltűnik. A valós sajátvektorok (melyeknek közöséges skalárszorzata nem tűnik el) viszont a  $\pm 1$  sajátértékeknek felelnek meg. Legyen  $\mathbf{v}$  a  $\lambda_1$  sajátértékhez,  $\mathbf{v}^*$  a  $\lambda^*$ -hoz,  $\mathbf{z}$  pedig a  $\lambda_2$ -höz tartozó sajátvektor. Ha  $\lambda_1 \neq \lambda_2$ , fennáll:

$$0 = (\mathbf{v}^*, \mathbf{z}) = ((\mathbf{v}, \mathbf{z})).$$

*Egy valós ortogonális mátrix két sajátvektorának közöséges skalárszorzata zérus, ha a megfelelő sajátértékek nem komplex konjugáltak; ha a sajátértékek komplex konjugáltak, a megfelelő sajátvektorok maguk is komplex konjugáltak.*

Ha a  $\mathbf{V}$  mátrix ortogonális, a determinánsa  $\pm 1$ . Ez a  $\mathbf{V} \mathbf{V}^\dagger = \mathbf{1}$  összefüggés segítségével látható be; ebből következik, hogy  $\mathbf{V}$  determinánsát megszorozva  $\mathbf{V}^\dagger$  determinánsával, 1-et kell kapnunk. A  $\mathbf{V}$  mátrix determinánsa azonban egyenlő  $\mathbf{V}^\dagger$ -ével, úgyhogy mindkettőnek  $+1$ -gyel vagy  $-1$ -gyel kell egyenlőnek lennie.

Ha  $\mathbf{H}$  valós, a (3.5) egyenletrendszer is valós, mivel a  $\lambda_n$  sajátértékek szintén valósak. *Valós hermitikus mátrix sajátvektorairól feltehető, hogy valósak.* (Mínt hogy a sajátvektorok csak egy állandó tényező erejéig vannak meghatározva, tetszőleges komplex tényezővel is megszorozhatók.) Eszerint az  $\mathbf{U}^{-1} \mathbf{H} \mathbf{U} = \Lambda_n$  összefüggésben fellépő  $\mathbf{U}$  mátrixról is feltehetjük, hogy valós.



## 4. A KVANTUMMECHANIKA ELEMEI

1. Az 1925-öt megelőző években az akkor új „kvantummechanika” fő célja a stacionárius állapotok energiáinak meghatározása, vagyis az energiaszintek kiszámítása volt. A régebbi *Epstein—Schwarzschild*-féle „szeparációs elmélet” csak igen speciális rendszerek esetében adott előírást az energiaszintek (termék) meghatározására. Ezek azok a rendszerek, amelyeknek klasszikus mechanikai mozgása periodikus vagy legalábbis kváziperiodikus.

W. HEISENBERG, a *Bohr*-féle korrespondencia-elv precíz megfogalmazására törekedve, körvonalazott egy elgondolást, mely végül e fogatkozás orvoslásához vezetett. A megoldást egymástól függetlenül egyrésztől B. BORN és P. JORDAN, másrésztől P. A. M. DIRAC adta meg. Ennek lényege az a követelmény, hogy a számításokban csak azok a mozgások szerepeljenek, amelyeket azután kvantummechanikailag megengedett mozgásoknak tekintünk. Ennek az elgondolásnak a kerestülvitele az említett szerzőket végtelen sok sorból és oszlopból álló mátrixok bevezetésére készítette. Ezek reprezentálják formálisan a hely- és impulzuskordinátákat. Ama formális számításokra, amelyeket e „*q*-számokkal” végzünk, az asszociatív törvény érvényes, a kommutatív törvény azonban nem.

Így pl. a lineáris oszcillátor<sup>1</sup> energiájára vonatkozó egyenletet oly módon kapjuk meg, hogy az energia klasszikus kifejezésének *Hamilton-féle alakjába a q és p hely-, ill. impulzuskordináták helyére formálisan behelyettesítjük a q és p mátrixokat:*

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{K}{2} q^2. \quad (4.1)$$

Megköveteljük, hogy *H* átlós mátrix legyen. Ekkor a *H<sub>mn</sub>* átlós elemek adják meg a rendszer lehetséges energiaértékeit, a stacionárius szinteket. A *q* mátrix *q<sub>nk</sub>* elemeinek abszolútérték-négyzete pedig arányos a *H<sub>mn</sub>* energiájú állapotból a *H<sub>kk</sub>* energiájú állapotba vezető spontán átmenet valószínűségével. Ily módon tehát az  $\omega \frac{H_{mn} - H_{kk}}{\hbar}$  frekvenciájú vonal intenzitását kapjuk. Mindez éppen ama megfon-

<sup>1</sup> Itt *m* a rezgő részecske tömege, *K* az erőkonstans; *q* és *p* a hely-, ill. impulzuskordináta.

tolásokból következik, amelyek  $\mathbf{p}$ -nek és  $\mathbf{q}$ -nak mátrixokkal való helyettesítését sugallják.

A probléma teljes meghatározásához be kell még vezetnünk a  $\mathbf{p}$ -re és  $\mathbf{q}$ -ra vonatkozó „felcserélési összefüggést”. A feltevés szerint

$$\mathbf{pq} - \mathbf{qp} = \frac{\hbar}{i} \mathbf{1}, \quad (4.2)$$

ahol  $\hbar$  a  $2\pi$ -vel osztott *Planck-állandó*.

Az  $e$  mennyiségekkel végzett számítások, bár gyakran meglehetősen fáradságosak, igen gyorsan szép és fontos, nagy horderejű eredményekre vezettek. Így az impulzusmomentumra vonatkozó „kiválasztási szabályokat” és bizonyos „összegszabályokat”, amelyek valamely színképvonal *Zeeman*-komponenseinek relatív intenzitásait határozzák meg, a kísérlettel egyezésben lehetett kiszámítani. Eme eredmények leszármaztatására a szeparációs elmélet elégtelen volt.

E. SCHRÖDINGER — a *Heisenberg*-féle nézőponttól független úton — a fentebb említettekkel matematikailag ekvivalens eredményeket kapott. Módszere mélyreható hasonlóságot mutat L. DEBROGLIE elgondolásaival. A következő tárgyalás folyamán a *Schrödinger*-féle megközelítést vesszük alapul.

Tekintsünk egy sokdimenziós teret; a dimenziók száma legyen egyenlő az adott rendszer jellemzéséhez szükséges helykoordináták számával. A rendszert alkotó részecskék helyzetének minden egyes konfigurációja (elrendezése) egy-egy pontnak felel meg ebben a sokdimenziós „konfigurációs térben”. Ez a pont, amint az idő múlik, mozgást végez: egy görbét ír le, amely klasszikusan maradéktalanul jellemzi a rendszer mozgását. E pont — a konfigurációs térbeli rendszerpont — klasszikus mozgása, valamint az ugyancsak a konfigurációs térben tovaterjedő hullámcsomag mozgása között alapvető megfelelés áll fenn,<sup>2</sup> hacsak feltételezzük, hogy a törésmutató kifejezése  $e$  hullámokra vonatkozóan  $[2m(E-V)]^{1/2}/E$ ; itt  $E$  a rendszer teljes energiája,  $V$  pedig a potenciális energia, mely a konfiguráció függvénye.

A megfelelés a következőkben áll: minél kisebb a hullámcsomag felépítésében résztvevő hullámhosszaknak és a konfigurációs térbeli pályagörbe görbületi sugarának a viszonya, annál pontosabban követi a hullámcsomag az említett pályát. Ha viszont a hullámcsomag oly nagy hullámhosszakat is tartalmaz, melyek elérik a konfigurációs térbeli pálya klasszikus görbületi sugarát, akkor a kétféle mozgás között lényeges a különbség a hullámok interferenciája folytán.

SCHRÖDINGER felteszi, hogy a konfigurációs pont mozgása nem a klasszikus elmélet alapján számított mozgásnak, hanem a hullámok mozgásának felel meg.

<sup>2</sup> A tárgyalás itt szorosabban követi SCHRÖDINGER gondolatait, mint ahogy az jelenleg szokásos (az 1959. évi angol kiadás fordítójának megjegyzése).

Ha a hullámok skaláris amplitúdóját  $\psi$ -vel jelöljük, a hullámegyenlet a következőképpen fest:

$$\frac{E-V}{E^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \frac{1}{2m_1} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1^2} + \frac{1}{2m_2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_2^2} + \dots + \frac{1}{2m_f} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_f^2}, \quad (4.3)$$

ahol  $x_1, x_2, \dots, x_f$  az adott rendszert alkotó részecskék helykoordinátái,  $m_1, m_2, \dots, m_f$  a megfelelő tömegek,  $V(x_1, x_2, \dots, x_f)$  pedig a potenciális energia mint a részecskék  $x_1, x_2, \dots, x_f$  koordinátáinak függvénye.

A rendszer teljes energiája (4.3) alatt expliciten fellép. Másrésztől a hullámok frekvenciája vagy periódusa mindaddig meghatározatlan maradt. SCHRÖDINGER felteszi, hogy az  $E$  teljes energiájú rendszer mozgásához rendelt hullám frekvenciáját  $\hbar\omega = E$  határozza meg. A (4.3) egyenletbe ennél fogva a

$$\psi = \psi_E \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right) \quad (4.4)$$

kifejezést helyettesíti be, ahol  $\psi_E$  független  $t$ -től. Ily módon kapja az

$$\frac{1}{\hbar^2} (V-E)\psi_E = \frac{1}{2m_1} \frac{\partial^2 \psi_E}{\partial x_1^2} + \frac{1}{2m_2} \frac{\partial^2 \psi_E}{\partial x_2^2} + \dots + \frac{1}{2m_f} \frac{\partial^2 \psi_E}{\partial x_f^2} \quad (4.5)$$

sajátérték-egyenletet, ahol  $\psi_E$  a részecskék  $x_1, x_2, \dots, x_f$  helykoordinátáinak a függvénye. Szükséges megkövetelnünk, hogy  $\psi_E$  négyzetesen integrálható legyen, vagyis a teljes konfigurációs térre kiterjesztett

$$\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_E(x_1, x_2, \dots, x_f)|^2 dx_1 dx_2 \dots dx_f$$

integrál véges legyen. Speciálisan a végtelenben a  $\psi$  függvénynek el kell tűnnie. Azokat az  $E$  értékeket, amelyek mellett ilyen  $\psi_E$  függvény található, a (4.5) egyenlet „sajátértékei”-nek nevezzük; ezek adják meg a rendszer lehetséges energiaértékeit. A (4.5) egyenlet megfelelő — négyzetesen integrálható — megoldásának neve: az  $E$  sajátértékhez tartozó sajátfüggvény.

A (4.5) egyenlet felírható a

$$\mathbf{H}\psi_E = E\psi_E \quad (4.5a)$$

alakban is, ahol  $\mathbf{H}$  lineáris operátor (a Hamilton-operátor vagy energiaoperátor):

$$\mathbf{H} = -\hbar^2 \left( \frac{1}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{1}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \dots + \frac{1}{2m_f} \frac{\partial^2}{\partial x_f^2} \right) + V(x_1, x_2, \dots, x_f); \quad (4.5b)$$

az utolsó tag a  $V(x_1, x_2, \dots, x_f)$  függvénnyel való szorzást jelent. Ez az  $x_1, x_2, \dots, x_f$  változók valamely függvényét egy másik függvénybe transzformálja. A (4.4) alatt felírt  $\psi$  függvényre teljesül az

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi \quad (4.6)$$

egyenlet. Ebben a rendszer teljes energiája nem lép fel expliciten, így az általánosan érvényes minden mozgásra, függetlenül a rendszer energiájától. (4.6) neve: *időtől független Schrödinger-egyenlet*.

A (4.5) [vagy (4.5a), (4.5b)] és (4.6) egyenletek a kvantummechanika alapegyenletei. Közülük az utóbbi határozza meg a konfigurációs hullám változását az időben. (Ennek — mint látni fogjuk — messzemenő fizikai realitást kell tulajdonítanunk.) (4.5) [vagy (4.5a), (4.5b)] az  $\omega = E/\hbar$  frekvenciát, ill. az  $E$  energiát határozza meg, és kifejezi a  $\psi$  hullámfüggvény periodikus időfüggését. Valóban, a (4.5a) egyenletet a (4.6) egyenletből megkaphatjuk

$$\psi = \psi_E \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right)$$

feltételezésével.

2. Most összefoglaljuk (4.5b) sajátértékeinek és sajátfüggvényeinek legfontosabb tulajdonságait. Ebből a célból definiáljuk először két függvény,  $\varphi$  és  $g$  skaláris szorzatát a következőképpen:

$$(\varphi, g) = \int \dots \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x_1 \dots x_f)^* g(x_1 \dots x_f) dx_1 \dots dx_f = d\varphi^* g. \quad (4.7)$$

Erre a skalárszorzatra a 3. fejezet összes egyszerű számítási szabálya érvényes. Így ha  $a_1$  és  $a_2$  állandó számok, fennáll

$$(\varphi, a_1 g_1 + a_2 g_2) = a_1 (\varphi, g_1) + a_2 (\varphi, g_2),$$

és

$$(\varphi, g) = (g, \varphi)^*.$$

$(\varphi, \varphi)$  valós és pozitív, és csak akkor tűnik el, ha  $\varphi = 0$ . Ha  $(\varphi, \varphi) = 1$ , azt mondjuk, hogy  $\varphi$  normált. Ha a

$$(\varphi, \varphi) = \int \dots \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x_1 \dots x_f)|^2 dx_1 \dots dx_f = c^2$$

integrál véges, a  $\varphi$  függvény normálása mindig lehetséges; egy állandóval kell szoroznunk (a fent látott esetben ez az állandó  $1/c$ , minthogy  $(\frac{\varphi}{c}, \frac{\varphi}{c}) = 1$ ). Két *függvény* ortogonális, ha skaláris szorzatuk zérus.

A (4.7) egyenlettel megadott skalárszorzat kifejezésében az  $x_1, x_2, \dots, x_f$  változók  $\varphi(x_1, \dots, x_f), g(x_1, \dots, x_f)$  függvényeit vektoroknak tekinthetjük, melyeknek komponenseit  $f$  számú folytonos index jellemzi. A  $\varphi(x_1, \dots, x_f)$  függvényvektor  $f$ -szeresen végtelen dimenziós térben van értelmezve. Minden egyes  $x_1, \dots, x_f$  értékrendszer, azaz minden egyes konfiguráció egy-egy dimenzióknak felel meg. A  $\varphi$  és  $g$  függvények skaláris szorzata vektor-nyelven

$$(\varphi, g) = \sum_{x_1 \dots x_f} \varphi(x_1, \dots, x_f)^* g(x_1, \dots, x_f);$$

ezt helyettesítettük a (4.7) integrállal.

A függvények lineáris függőse vagy függetlensége ugyancsak összhangban van a vektorok tárgyalása folyamán bevezetett megfelelő fogalmakkal. Az

$$a_1 \varphi_1 + a_2 \varphi_2 + \dots + a_k \varphi_k = 0$$

lineáris összefüggés akkor áll fenn a  $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_k$  függvények között, ha ez az egyenlet igaz minden vektorkomponensre, vagyis minden  $x_1, \dots, x_f$  értékrendszerre, adott  $a_1, a_2, \dots, a_k$  állandók mellett. A  $H$  operátort lineárisnak mondjuk, ha

$$H(a\varphi + bg) = aH\varphi + bHg \quad (4.8)$$

igaz minden  $\varphi$  és  $g$  függvényre. Általában csak lineáris operátorokkal fogunk foglalkozni. A függvényvektorokra ható lineáris operátor felel meg a közönséges vektorra ható mátrixnak. Mind az egyik, mind a másik vektorra alkalmazva azt más vektorba transzformálja. A linearitás feltétele — a (4.8) egyenlet — minden mátrixra teljesül. Láttuk, hogy véges dimenziós vektorokra alkalmazható minden operátor mátrixszal ekvivalens.<sup>3</sup> A végtelen dimenziós operátoroknak is van mátrixalakjuk, az azonban sokszor erősen szinguláris.

Egy példa: az „ $x_1$ -gyel való szorzás” operációjának megfelelő  $\mathbf{q}_1$  mátrix elemei

$$(\mathbf{q}_1)_{x_1 x_2 \dots x_f; x'_1 x'_2 \dots x'_f} = x_1 \delta_{x_1 x'_1} \delta_{x_2 x'_2} \dots \delta_{x_f x'_f} \quad (4.E.1)$$

Ez a mátrix a  $\psi$  vektort a  $\mathbf{q}_1 \psi$  vektorba transzformálja; ennek komponensei

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_1 \psi(x_1 x_2 \dots x_f) &= \sum_{x'_1 \dots x'_f} (\mathbf{q}_1)_{x_1 \dots x_f; x'_1 \dots x'_f} \psi(x'_1 \dots x'_f) = \\ &= \sum_{x'_1 \dots x'_f} x_1 \delta_{x_1 x'_1} \delta_{x_2 x'_2} \dots \delta_{x_f x'_f} \psi(x'_1 \dots x'_f) = x_1 \psi(x_1 \dots x_f). \end{aligned}$$

E vektor éppen az  $x_1 \psi$  függvény, amelybe  $\psi$ -t az „ $x_1$ -gyel való szorzás” operációja transzformálja.

Azt a mátrixot, amely az „ $x_1$  szerint való differenciálás” operátorának felel meg,  $(i/\hbar)\mathbf{p}_1$ -gyel jelöljük, minthogy  $(\hbar/i)\partial/\partial x_1$  felel meg  $\mathbf{p}_1$ -nek:

$$\left( \frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_1 \right)_{x_1 \dots x_f; x'_1 \dots x'_f} = \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta} (\delta_{x_1 + \frac{1}{2} \Delta, x'_1} - \delta_{x_1 - \frac{1}{2} \Delta, x'_1}) \delta_{x_2 x'_2} \dots \delta_{x_f x'_f}. \quad (4.E.2)$$

Ez a  $\psi$  vektort a

$$\begin{aligned} \sum_{x'_1 \dots x'_f} \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta} (\delta_{x_1 + \frac{1}{2} \Delta, x'_1} - \delta_{x_1 - \frac{1}{2} \Delta, x'_1}) \delta_{x_2 x'_2} \dots \delta_{x_f x'_f} \psi(x'_1, x'_2, \dots, x'_f) = \\ = \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta} \left[ \psi \left( x_1 + \frac{1}{2} \Delta, x_2, \dots, x_f \right) - \psi \left( x_1 - \frac{1}{2} \Delta, x_2, \dots, x_f \right) \right] \end{aligned}$$

vektorba transzformálja; ez éppen  $\psi$ -nek  $x_1$  szerint képezett deriváltja.

<sup>3</sup> Lásd 1. fejezet, 11. o.

A  $\mathbf{H}$  mátrixot hermitikusnak mondjuk, ha  $\mathbf{H}=\mathbf{H}^\dagger$ , azaz ha

$$(\mathbf{v}, \mathbf{H}\mathbf{w}) = (\mathbf{H}^\dagger \mathbf{v}, \mathbf{w}) = (\mathbf{H}\mathbf{v}, \mathbf{w})$$

fennáll tetszőleges  $\mathbf{v}$ ,  $\mathbf{w}$  vektorok mellett. Más szóval, a  $\mathbf{H}$  mátrix hermitikus, ha a skalárszorzatban az egyik tényezőről áthárítható a másikra. Az operátorok hermitikus jellegének ez a követelmény a *definiója*.

A  $\mathbf{H}$  operátor hermitikus, ha

$$(\varphi, \mathbf{H}g) = (\mathbf{H}\varphi, g) \quad (4.9)$$

fennáll bármely két  $\varphi$ ,  $g$  függvény mellett, amelyek eleget tesznek bizonyos feltételeknek (pl. négyzetesen integrálhatóknak kell lenniük, ami maga után vonja a függvény eltűnését a végtelenben). Hermitikus operátorok összege és valós számszorosa is lineáris és hermitikus. Ugyanez áll a hermitikus operátorok hatványaira, reciprokára is.

A *Hamilton*-operátor, amelyet (4.5b) alatt írtunk fel, hermitikus. Abból a célból, hogy ezt megmutassuk, először is jegyezzük meg, hogy a  $V(x_1, x_2, \dots, x_f)$  valós függvénnyel való szorzás hermitikus operátor:

$$\begin{aligned} (\varphi, Vg) &= \int \dots \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x_1 \dots x_f)^* V(x_1 \dots x) g(x_1 \dots x) dx_1 \dots dx_f = \\ &= \int \dots \int_{-\infty}^{\infty} (V(x_1 \dots x) \varphi(x_1 \dots x_f))^* g(x_1 \dots x_f) dx_1 \dots dx_f = \\ &= (V\varphi, g). \end{aligned} \quad (4.9a)$$

A  $(\hbar/i)\partial/\partial x_k$  operátor szintén hermitikus. Parciális integrálással kapjuk:

$$\begin{aligned} \left( \varphi, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k} g \right) &= \int \dots \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x_1 \dots x_f)^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k} g(x_1 \dots x_f) dx_1 \dots dx_f = \\ &= \int \dots \int_{-\infty}^{\infty} -\frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial x_k} \varphi(x_1 \dots x_f) \right)^* g(x_1 \dots x) dx_1 \dots dx_f = \\ &= \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k} \varphi, g \right); \end{aligned} \quad (4.10)$$

$\varphi$  ugyanis  $x_k = \pm \infty$  mellett eltűnik, azonkívül  $i^* = -i$ . Ennélfogva négyzete, a  $-\hbar^2 \partial^2 / \partial x_k^2$  operátor, szintén hermitikus, amint az két parciális integrálással közvetlenül megmutatható. Így  $\mathbf{H}$  minden tagja hermitikus, tehát maga  $\mathbf{H}$  is hermitikus.

Jól ismeretes, hogy a  $\psi$ -re vonatkozó

$$\mathbf{H}\psi = E\psi$$

egyenletnek el nem tűnő, négyzetesen integrálható megoldása csak bizonyos  $E$  értékek mellett van. Azoknak az  $E$  értékeknek a neve, amelyek mellett ilyen megoldás létezik: *sajátértékek*; összességük  $\mathbf{H}$  *spektruma*.

Hermitikus operátor sajátértékei valamennyien valósak. Szorozzuk meg a  $\mathbf{H}\psi_E = E\psi_E$  egyenletet skalárisan  $\psi_E$ -vel:

$$(\psi_E, \mathbf{H}\psi_E) = (\psi_E, E\psi_E) = E(\psi_E, \psi_E). \quad (4.11)$$

A (4.11) egyenletben a következő átalakítás végezhető:  $(\psi_E, \mathbf{H}\psi_E) = (\mathbf{H}\psi_E, \psi_E) = (\psi_E, \mathbf{H}\psi_E)^*$ . Eszerint, mivel  $(\psi_E, \psi_E)$  valós,  $E$  szükségképpen ugyancsak valós.

Valamely hermitikus operátornak egyaránt lehet *diszkrét* és *folytonos* spektruma. A diszkrét spektrum sajátértékei diszkrét számok (a számuk lehet véges vagy megszámlálhatóan végtelen); a megfelelő sajátfüggvények normálhatók (esetünkben ez azt jelenti, hogy a  $(\psi_E, \psi_E)$  négyzetes integrál véges), és a következőkben feltesszük, hogy már normáltak. A sajátfüggvényeket egymástól indexekkel különböztetjük meg:  $\psi_E, \psi_F, \dots$ . Rendszerint a diszkrét sajátértékek képezik a spektrum érdekes részét. Ahol eddig egyszerűen „sajátértékekre” történt hivatkozás, e diszkrét sajátértékeket kell érteni.

A sajátérték-egyenlet ama  $\psi(x_1, x_2, \dots, x_f; E)$  megoldásainak, amelyek *folytonos spektrum* sajátértékeinek felelnek meg, a négyzetes integrálja nem véges. Azt gondolhatnánk ezért, hogy e megoldások egyáltalán nem tartoznak hozzá a spektrumhoz. A  $\psi(x_1, x_2, \dots, x_f; E)$  függvényekből megszerkeszthető azonban az

$$\int_E^{E+\Delta} \psi(x_1, x_2, \dots, x_f; E) dE = \psi(x_1, x_2, \dots, x_f; E, E+\Delta) \quad (4.E.3)$$

ún. „sajátdifferenciál”, mely már négyzetesen integrálható és így normálható. Nem ez volna a helyzet, ha  $E$  tényleg nem tartozna hozzá a spektrumhoz. A (4.E.3) sajátátdifferenciál az  $E$  és  $E+\Delta$  közé eső intervallumhoz tartozik. Ez mutatja, hogy a folytonos spektrum nem pontokból, hanem folytonos tartományokból áll. A sajátérték-egyenlet  $\psi(x_1, x_2, \dots, x_f; E)$  megoldásait nevezik a folytonos spektrum sajátfüggvényeinek, jóllehet nem normálhatók. Az  $E$  sajátértékektől azok folytonosan függenek; a különböző kontinuum-sajátfüggvények megkülönböztetésére  $E$ -t nem mint indexet, hanem inkább mint változót vezetjük be. Ha a folytonos spektrumot meghatározott  $\Delta$  hosszúságú kicsiny tartományokra osztjuk fel, ezek mindegyikéhez definiálható egy-egy sajátátdifferenciál, amelyek — miután normáltuk őket — a diszkrét spektrum sajátfüggvényeihez annál inkább hasonló tulajdonságúakká válnak, minél kisebbnek választjuk  $\Delta$ -t.

A diszkrét spektrum különböző sajátértékeihez tartozó sajátfüggvények ortogonálisak egymásra. Ennek igazolása céljából megjegyezzük, hogy  $\mathbf{H}\psi_E = E\psi_E$  fennállásából következik

$$(\psi_F, \mathbf{H}\psi_E) = (\psi_F, E\psi_E) \quad \text{és} \quad (\mathbf{H}\psi_F, \psi_E) = E(\psi_F, \psi_E).$$

Hasonlóképpen  $\mathbf{H}\psi_F = F\psi_F$ , valamint a sajátértékek valós volta maga után vonja

$$(\mathbf{H}\psi_F, \psi_E) = (F\psi_F, \psi_E) = F^*(\psi_F, \psi_E) = F(\psi_F, \psi_E)$$

fennállását. Kivonva egymásból a két egyenletet látjuk, hogy  $E \neq F$  mellett  $(\psi_E, \psi_F)$ -nek zérusnak kell lennie. Hasonlóképpen, a diszkrét sajátfüggvények ortogonálisak valamennyi saját differenciálra, és a saját differenciálok is ortogonálisak egymásra, amennyiben a megfelelő tartományok nem fedik át egymást.

Megtörténhet, hogy egy — mondjuk a diszkrét spektrumban fekvő — sajátértékhez több lineárisan független sajátfüggvény tartozik. Ha ez a helyzet, azt mondjuk, hogy a sajátérték „elfajult”. Az elfajult sajátfüggvények minden lehetséges lineáris kombinációja ugyancsak sajátfüggvény, ugyanazon sajátérték mellett. A sajátfüggvények lineáris seregéből ki lehet választani egy lineárisan független sorozatot; ekkor a szóban forgó sajátértékhez tartozó összes sajátfüggvényt kifejezhetjük eme lineárisan független sorozat lineáris kombinációja alakjában. E rendszer ortogonalizálható, pl. a *Schmidt*-féle eljárással. Természetes, hogy a kiválasztás szükségképpen önkényes. Világos, hogy a *Schmidt*-féle eljárás sok különböző ortogonális sorozatot adhat attól függően, hogy milyen sorrendben vesszük a sajátfüggvényeket. Ezzel azonban most nem kell törődnünk.

A következőkben mindenkor fel fogjuk tenni, hogy az elfajult sajátfüggvények közül valamiképpen kiválasztottunk egy ortogonális sorozatot. A sajátfüggvények és saját differenciálok összessége ekkor *ortogonális rendszert* képez. Ha  $\psi$  és  $\psi'$  e rendszer két tetszőleges függvénye, úgy

$$(\psi, \psi') = 0 \tag{4.12}$$

és

$$(\psi, \psi) = 1. \tag{4.12a}$$

Ez az ortogonális rendszer teljes is, hacsak a folytonos spektrum felosztása elég finom (azaz ha  $\Delta$  elég kicsiny). Más szavakkal, minden  $\varphi(x_1 \dots x_r)$  függvény, melyre  $(\varphi, \varphi)$  konvergens, sorba fejthető:

$$\varphi = \sum_{\kappa} g_{\kappa} \psi_{\kappa} + \sum_E g(E, \Delta) \psi(E, E + \Delta), \tag{4.13}$$

ahol  $\kappa$  az összes diszkrét sajátértéken,  $E$  pedig az alsó határtól kezdődően az összes saját differenciálon fut végig. Ez a sorfejtés tulajdonképpen csak végtelen kicsiny  $\Delta$  mellett érvényes; a második összeg eszerint integrállal helyettesítendő:

$$\varphi = \sum_{\kappa} g_{\kappa} \psi_{\kappa} + \int g(E) \psi(E) dE; \tag{4.13a}$$



itt integrálni az egész folytonos spektrumtartományra kell. Ha a folytonos spektrum egy sajátértékéhez több lineárisan független sajátfüggvény tartozik, úgy (4.13a) alatt több integrál, sőt — amennyiben a sajátfüggvények száma végtelen — egy vagy több kétszeres vagy többszörös integrál lép fel. Ha viszont a vizsgált problémának nincs folytonos spektruma, (4.13) második tagja  $s$  az integrál (4.13a) alatt elmarad. Ha képezzük  $\psi_x$  és (4.13) skaláris szorzatát, a  $g_x$  együtthatóra láthatóan a következő kifejezést kapjuk:

$$(\psi_x, \varphi) = g_x. \quad (4.14)$$

Hasonlóképpen

$$(\psi(E, E + \Delta), \varphi) = g(E, \Delta). \quad (4.14a)$$

Formális számításokban a folytonos spektrumot sokszor mellőzik; a számításokat úgy végzik, mintha csak diszkrét spektrum léteznék. Világos, hogy miben áll a folytonos spektrum létezésének hatása: az összegekhez integrált tartalmazó tagok járulnak.

Az e fejezetben közölt tárgyalás — különösen ami a folytonos spektrumot illeti — nem szigorú. A tetszőleges hermitikus operátorok sajátértékeinek szigorú elmélete<sup>4</sup> kevésbé e könyv első (német) változatát megelőzően született meg. Itt az elmélet eredményeinek csupán egy részét foglaltuk össze. A szigorú elmélet meglehetősen bonyolult. Az elméletet mindamellet csaknem mindig az itt megadott alakban használják.<sup>5</sup>

<sup>4</sup> NEUMANN JÁNOS Math. Ann. **102**, 49 (1929).

<sup>5</sup> A hermitikus (szabatosabban: „önadjungált”) operátorok spektrális felbontásának elméletét M. H. STONE tárgyalja „Linear Transformations in Hilbert Space” című művében (Am. Math. Soc. publication, New York, 1932). Valamivel rövidebb tárgyalás található RIESZ FRIGYES és SZ. NAGY BÉLA „Functional Analysis” c. könyvében, F. Ungar Publ., New York, 1955.

## 5. PERTURBÁCIÓSZÁMÍTÁS

1. Gyakran megtörténik, hogy valamely adott probléma sajátértékei és sajátfüggvényei ismertek, és érdeklődésünk egy hasonló probléma sajátértékeire és sajátfüggvényeire irányul, amelyek energiaoperátora az adott probléma energiaoperátortól egy viszonylag kicsiny tagban különbözik. Ez a „perturbáció”. A perturbációszámítás ilyen fajta problémák megoldásának módszereivel foglalkozik. M. BORN, W. HEISENBERG és P. JORDAN a mátrixelmélet felhasználásával dolgozott ki egy perturbációszámítást. Mi azonban az alábbi tárgyalásban a *Rayleigh—Schrödinger*-féle módszert követjük.

A számításokat úgy végezzük, mintha a kezdeti rendszernek nem volna folytonos spektruma és feltesszük, hogy a perturbált rendszer spektruma szintén tiszta pontspektrum. A folytonos spektrum okozta kisebb bonyodalmakat a végén tárgyaljuk. Az elméletet először a legegyszerűbb alakjában fejtjük ki.

Legyen  $\mathbf{H}$  hermitikus operátor, melynek sajátértékei  $E_1, E_2, \dots$ , sajátfüggvényei pedig  $\psi_1, \psi_2, \dots$ :

$$\mathbf{H}\psi_k = E_k\psi_k. \quad (5.1)$$

Meg szeretnénk határozni a  $\mathbf{H} + \lambda\mathbf{V}$  operátor  $F$  sajátértékeit és  $\varphi$  sajátfüggvényeit, ahol  $\mathbf{V}$  ugyancsak hermitikus,  $\lambda$  pedig egy kicsiny valós szám:

$$(\mathbf{H} + \lambda\mathbf{V})\varphi_k = F_k\varphi_k. \quad (5.2)$$

Először  $F$ -et és  $\varphi$ -t a  $\lambda$  paraméter hatványai szerint haladó hatványsorba fejtjük; a tagokat másodrendig bezárólag írjuk ki:

$$F_k = E_k + \lambda E'_k + \lambda^2 E''_k \dots, \quad (5.3a)$$

$$\varphi = \psi_k + \lambda \psi'_k + \lambda^2 \psi''_k \dots = \psi_k + \lambda \sum_l a_{kl} \psi_l + \lambda^2 \sum_l b_{kl} \psi_l \dots \quad (5.3b)$$

Az (5.3a), (5.3b) kifejezésekben feltételezzük, hogy  $F_k$  és  $\varphi_k$  átmegegyeznek  $E_k$ -ba, ill.  $\psi_k$ -ba, ha  $\lambda=0$ ;  $\psi'_k$ -t és  $\psi''_k$ -t ugyancsak sorba fejtettük a  $\psi_k$  függvények szerint (amint azt az előző fejezetben megbeszéltük),  $a_{kl}$ , ill.  $b_{kl}$  együtthatókkal.

Az (5.3a) és (5.3b) kifejezéseket az (5.2) egyenletbe behelyettesítve kapjuk:

$$\mathbf{H} \left[ \psi_k + \lambda \sum_l a_{kl} \psi_l + \lambda^2 \sum_l b_{kl} \psi_l \right] + \lambda \mathbf{V} \left[ \psi_k + \lambda \sum_l a_{kl} \psi_l \right] = \\ = (E_k + \lambda E'_k + \lambda^2 E''_k) \left( \psi_k + \lambda \sum_l a_{kl} \psi_l + \lambda^2 \sum_l b_{kl} \psi_l \right). \quad (5.4)$$

Az (5.4) egyenlet két oldalán a  $\lambda$  egyenlő hatványaihoz tartozó együtthatóknak meg kell egyezniük egymással. A  $\lambda$ -t nem tartalmazó tagok (5.1) folytán kiesnek. A  $\lambda$  első, ill. második hatványát tartalmazó tagok együtthatóit egyenlővé téve kapjuk:

$$\sum_l a_{kl} E_l \psi_l + \mathbf{V} \psi_k = E'_k \psi_k + E_k \sum_l a_{kl} \psi_l, \quad (5.5a)$$

$$\sum_l b_{kl} E_l \psi_l + \sum_l a_{kl} \mathbf{V} \psi_l = E''_k \psi_k + E'_k \sum_l a_{kl} \psi_l + E_k \sum_l b_{kl} \psi_l. \quad (5.5b)$$

Az (5.5a) egyenletből meghatározható  $E'_k$ , valamint  $a_{kl}$ , ha  $l \neq k$ . Képezve  $\psi_k$  vagy  $\psi_l$  és (5.5a) skaláris szorzatát, és felhasználva az ortogonalitási összefüggést, kapjuk:

$$a_{kk} E_k + (\psi_k, \mathbf{V} \psi_k) = E'_k + a_{kk} E_k, \quad (5.6)$$

$$a_{kl} E_l + (\psi_l, \mathbf{V} \psi_k) = E_k a_{kl} \quad (l \neq k). \quad (5.7)$$

Ha itt bevezetjük a

$$V_{\alpha\beta} = (\psi_\alpha, \mathbf{V} \psi_\beta) = (\mathbf{V} \psi_\alpha, \psi_\beta) = (\psi_\beta, \mathbf{V} \psi_\alpha)^* = V_{\beta\alpha} \quad (5.8)$$

rövid jelölést (a  $V_{\alpha\beta}$ -k neve: a  $\mathbf{V}$  operátor *mátrixelemei*), ezek az összefüggések így írhatók:

$$E'_k = (\psi_k, \mathbf{V} \psi_k) = V_{kk}, \quad (5.6a)$$

$$a_{kl} = \frac{(\psi_l, \mathbf{V} \psi_k)}{E_k - E_l} = \frac{V_{lk}}{E_k - E_l} \quad (l \neq k). \quad (5.7a)$$

Hasonlóképpen, ha az (5.5b) egyenletet megszorozzuk  $\psi_k^*$ -gal és az egész konfigurációs térre integrálunk, a

$$b_{kk} E_k + \sum_l a_{kl} (\psi_k, \mathbf{V} \psi_l) = E''_k + E'_k a_{kk} + E_k b_{kk} \quad (5.9)$$

összefüggést kapjuk. A bal oldalon az  $l$ -re vonatkozó összeget két részre bontjuk, külön írva az  $l=k$  tagot. Ezután behelyettesítjük  $E'_k$ -nek az (5.6a) és  $a_{kl}$ -nek az (5.7a) egyenlettel megadott értékét. Ily módon kapjuk:

$$E''_k = \sum_{l \neq k} \frac{(\psi_l, \mathbf{V} \psi_k)(\psi_k, \mathbf{V} \psi_l)}{E_k - E_l} = \sum_{l \neq k} \frac{|V_{lk}|^2}{E_k - E_l}.$$

Ezzel megkaptuk az  $F_k$  új sajátértéket a  $\lambda^2$  rendű tagokig:

$$F_k = E_k + \lambda V_{kk} + \lambda^2 \sum_{l \neq k} \frac{|V_{lk}|^2}{E_k - E_l}. \quad (5.10)$$

A  $\varphi_k$  új sajátfüggvényt

$$\varphi_k = \psi_k + \lambda \sum_{l \neq k} \frac{V_{lk}}{E_k - E_l} \psi_l + \lambda a_{kk} \psi_k$$

adja meg a  $\lambda$  rendű tagokig bezárólag. Megjegyezzük, hogy az előző egyenletekből az  $a_{kk}$  együttható mindig kiesett. Ez azzal áll kapcsolatban, hogy  $\varphi_k$  normálási állandóját nem rögzítettük. Ha megköveteljük, hogy  $(\varphi_k, \varphi_k) = 1$  legyen, akkor azt is megkövetelhetjük, hogy  $a_{kk} = 0$ ;

$$\varphi_k = \psi_k + \lambda \sum_{l \neq k} \frac{V_{lk}}{E_k - E_l} \psi_l \quad (5.11)$$

ekkor a  $\lambda^2$  rendű tagokig bezárólag normált.

Megjegyzendő, hogyha az eredeti problémában a  $\psi_k, \psi_l$  sajátfüggvények  $E_k$  és  $E_l$  sajátértékei történetesen egybeesnek, az (5.10) és (5.11) összegekben végtelen nagy tagok léphetnek fel. Nyomban látni fogjuk, hogy e tagok kiküszöbölhetőek, így felléptük nem jelent komoly nehézséget. Miután ezt megtettük, a képleteinkben szereplő összegezés a legtöbb gyakorlati esetben elvégezhető.

Mindeddig nem szóltunk az egész eljárás — közelebről az (5.3a) és (5.3b) sorok — konvergenciájáról. Könnyen megeshet, hogy ezek divergálnak; számos példában már a harmadik tag egymaga végtelen nagy! Azonfelül — amint az ismeretes — megtörténhet, hogy egy diszkrét sajátérték, különösen ha azt a folytonos spektrum már a kezdeti problémában átfedte, „szertefoszlik” a perturbáció hatására, azaz teljesen átmegy a folytonos spektrumba.

Mindamellett az (5.11) hullámfüggvénynek továbbra is jól meghatározott értelme van: olyan állapotot ír le, amely kicsiny  $\lambda$  mellett, ha nem is tökéletesen stacionárius, legalábbis közelítőleg az; csupán igen hosszú idő elteltével bomlik el. Az (5.10) alatt felírt  $F_k$  sajátérték szolgáltatja az energia közelítő értékét, melyet  $\hbar$ -sal osztva, eme állapot közelítő frekvenciáját kapjuk. Ha (5.10) és (5.11) segítségével képezzük az  $a = (\mathbf{H} + \lambda \mathbf{V} - F_k) \varphi_k$  függvényt, azt találjuk, hogy az  $\lambda$ -ban másodrendű. Feltételezve tehát, hogy e rendszer  $\varphi(t)$  hullámfüggvénye a  $t=0$  pillanatban megegyezik  $\varphi_k$ -val ( $\varphi(0) = \varphi_k$ ), írhatjuk:

$$\varphi(t) = \varphi_k \exp \left( -i \frac{F_k t}{\hbar} \right) + \chi(t). \quad (5.12)$$

Ezt behelyettesítve az időtől függő Schrödinger-egyenletbe:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} &= F_k \varphi_k \exp \left( -i \frac{F_k}{\hbar} t \right) + i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = (\mathbf{H} + \lambda \mathbf{V}) \varphi(t) = \\ &= F_k \varphi_k \exp \left( -i \frac{F_k}{\hbar} t \right) + a \exp \left( -i \frac{F_k}{\hbar} t \right) + (\mathbf{H} + \lambda \mathbf{V}) \chi, \end{aligned}$$

az

$$i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = a \exp\left(-i \frac{F_k}{\hbar} t\right) + (\mathbf{H} + \lambda \mathbf{V})\chi \quad (5.13)$$

egyenletet kapjuk. Ennek felhasználásával kiszámíthatjuk a  $\frac{\partial}{\partial t}(\chi, \chi)$  deriváltat:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\chi, \chi) = -\frac{i}{\hbar} \left[ \exp\left(-i \frac{F_k}{\hbar} t\right)(\chi, a) - \exp\left(+i \frac{F_k}{\hbar} t\right)(a, \chi) \right].$$

Felhasználva a  $|(\chi, a)|^2 \leq (\chi, \chi) \cdot (a, a)$  Schwarz-féle egyenlőtlenséget, erre az idő-deriváltra felső korlát adható:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\chi, \chi) \leq \frac{2}{\hbar} \sqrt{(\chi, \chi)(a, a)},$$

vagy mivel  $a$  független az időtől,

$$\frac{\partial}{\partial t} \sqrt{(\chi, \chi)} \leq \frac{1}{\hbar} \sqrt{(a, a)}, \quad \sqrt{(\chi, \chi)} \leq \frac{1}{\hbar} \sqrt{(a, a)} t + c. \quad (5.14)$$

Feltettük, hogy  $t=0$  mellett  $\chi=0$ ; ennél fogva a  $c$  állandó is zérus. Ekkor

$$(\chi, \chi) \leq (a, a) \frac{t^2}{\hbar^2}.$$

Azaz:  $\varphi(t)$  és  $\varphi_k \exp\left(-i \frac{F_k}{\hbar} t\right)$  különbsége mindaddig kicsiny, amíg a  $t$  idő kicsiny  $\hbar/\sqrt{(a, a)}$ -hoz viszonyítva. Minthogy  $(a, a)$  arányos  $\lambda^4$ -nel, a  $\varphi_k$  függvény viszonylag hosszú időn keresztül úgy viselkedik, mint egy igazi sajátfüggvény, feltéve, hogy  $\lambda$  kicsiny.

2. Amint már említettük, a fenti tárgyalást módosítanunk kell ha az eredeti problémában elfajulás lép fel, azaz ha több lineárisan független sajátfüggvény tartozik ugyanazon sajátértékhez. Az (5.10) és (5.11) képletekben *valamennyi sajátfüggvényre* összegezni kell, beleértve mindazon sajátfüggvényeket is, amelyek  $E_l$  sajátértéke megegyezik  $E_k$ -val. Ez az összeg ennél fogva csak akkor képezhető, ha  $(\psi_l, \mathbf{V}\psi_k)$  eltűnik mindazon  $\psi_l$  sajátfüggvények mellett, melyek  $E_l$  sajátértéke egyenlő  $E_k$ -val.

Tartozzanak a  $\psi_{k1}, \psi_{k2}, \dots, \psi_{ks}$  sajátfüggvények ugyanazon  $E_k$  sajátértékhez. Amint azt már mondtunk, feltesszük, hogy ezek ortogonálisak egymásra. Van bizonyos önkény abban, hogy a kezdeti sajátfüggvényeket miképpen választjuk ki közelítő eljárásunk céljára;  $\psi_{k1}, \psi_{k2}, \dots, \psi_{ks}$  helyett ugyanis választható pl. a

$$\begin{aligned} \psi'_{k1} &= \alpha_{11}\psi_{k1} + \alpha_{12}\psi_{k2} + \dots + \alpha_{1s}\psi_{ks} \\ \psi'_{k2} &= \alpha_{21}\psi_{k1} + \alpha_{22}\psi_{k2} + \dots + \alpha_{2s}\psi_{ks} \\ &\vdots \\ \psi'_{ks} &= \alpha_{s1}\psi_{k1} + \alpha_{s2}\psi_{k2} + \dots + \alpha_{ss}\psi_{ks} \end{aligned} \quad (5.15)$$

sorozat is. Nincs tehát semmilyen ok arra, hogy feltegyük:  $\varphi_k$  első közelítése egyszerűen a  $\psi_k$  sajátfüggvény. Ha  $(\alpha_{\mu\mu'})$  unitér mátrix, a  $\psi_{kv}$  függvények ugyancsak ortogonálisak egymásra (s — természetesen — ortogonálisak az  $E_k$  sajátértékekhez tartozó többi sajátfüggvényre is):

$$\begin{aligned} (\psi'_{kv}, \psi'_{k\mu}) &= \left( \sum_{\nu'} \alpha_{\nu\nu'} \psi_{k\nu'}, \sum_{\mu'} \alpha_{\mu\mu'} \psi_{k\mu'} \right) = \\ &= \sum_{\nu', \mu'} \alpha_{\nu\nu'}^* \alpha_{\mu\mu'} (\psi_{k\nu'}, \psi_{k\mu'}) = \sum_{\nu', \mu'} \alpha_{\nu\nu'}^* \alpha_{\mu\mu'} \delta_{\nu'\mu'} = \delta_{\nu\mu}. \end{aligned} \quad (5.16)$$

Eszerint a  $\psi'_{kv}$  függvények épp oly alkalmasak arra, hogy a közelítő eljárás alapjául szolgáljanak, mint az eredeti  $\psi_{kv}$  sajátfüggvények.

Így felvetődik a kérdés: Zérussá tehető-e valamennyi  $(\psi'_{kv}, \mathbf{V}\psi'_{k\mu})$  mátrixelem (ahol  $\nu \neq \mu$ ) az  $\alpha$  mátrix alkalmas választásával? Ezt valóban el tudjuk érni. Vizsgáljuk a

$$(\psi'_{kv}, \mathbf{V}\psi'_{k\mu}) = \sum_{\nu', \mu'=1}^s \alpha_{\nu\nu'}^* \alpha_{\mu\mu'} (\psi_{k\nu'}, \mathbf{V}\psi_{k\mu'}) \quad (5.17)$$

kifejezést. Ha a  $(\psi_{k\nu'}, \mathbf{V}\psi_{k\mu'}) = V_{k\nu'; k\mu'} = v_{\nu'\mu'}$  mennyiségekből megalkotott hermitikus mátrixot  $\mathbf{v}$ -vel jelöljük, akkor az  $\alpha$  mátrixot úgy kell meghatároznunk, hogy  $\alpha^* \mathbf{v} \alpha'$  átlós mátrix legyen. Ha  $\alpha$ -t így választjuk, akkor (5.17) alatt  $(\psi'_{kv}, \mathbf{V}\psi'_{k\mu})$  eltűnik, kivéve ha  $\nu = \mu$ ; a perturbációszámításban kiindulásképpen a  $\psi'_{kv}$  függvények sorozatát használva (az a  $\psi_{kv}$  sorozattal minden tekintetben ekvivalens) biztosítható, hogy az (5.10), (5.11) képletekben egy zérus nevezőjű tag se lépjen fel.

Az egész probléma tehát a következőben áll:  $\alpha$ -t úgy kell választanunk, hogy  $\alpha$  a  $\mathbf{v}$ -t átlós alakúvá transzformálja. Minthogy  $\alpha$  unitér,  $\alpha^*$  is az, tehát  $\alpha^* = \alpha'^{-1}$ . Az  $\alpha_{\mu\mu'}$  mátrixelemeket eszerint a

$$\sum_{\mu'} v_{\nu\mu'} \alpha_{\mu\mu'} = \alpha_{\nu\nu} v'_{\nu\nu} \quad (5.18)$$

egyenletek határozzák meg; itt  $v'_{\nu\nu}$  a  $\mathbf{v}$  mátrix sajátértékeinek a jele.

A sajátértékeket ismét a  $\lambda^2$  rendű tagokig, a sajátfüggvényeket pedig a  $\lambda$  rendű tagokig fogjuk kiszámítani. Az előző bekezdésben mondtak alapján feltesszük, hogy az  $E$  sajátérték  $\psi_{k1}, \psi_{k2}, \dots, \psi_{ks}$  sajátfüggvényei ( $E$  az a sajátérték, amelynek eltolódását ki szeretnénk számítani) a következő tulajdonságúak:

$$(\psi_{kv}, \mathbf{V}\psi_{k\mu}) = V_{kv; k\mu} = V_{kv; kv} \delta_{\mu\nu} = v'_{\nu} \delta_{\nu\mu}. \quad (5.19)$$

Más szóval, kezdettől fogva a  $\psi'$  függvényeket használjuk. A többi sajátfüggvény nem szükséges kettős indexszel ellátnunk:  $\psi_l$  az  $E_l$  sajátértékhez tartozik, az  $E_l$  értékeknek azonban nem kell mind különbözőknek lenniük. A  $\mathbf{H} + \lambda \mathbf{V}$  operátor-

nak azt a sajátértékét, amelyhez a  $\varphi_{k\nu}$  sajátfüggvény tartozik,  $F_{k\nu}$ -vel jelöljük; ez jelzi azt, hogy az  $s$ -szeresen elfajult  $E_k$  sajátérték<sup>1</sup> általában  $s$  számú új sajátértékre hasad fel.

Legyen

$$F_{k\nu} = E_k + \lambda E'_{k\nu} + \lambda^2 E''_{k\nu} \dots \quad (5.20)$$

és

$$\varphi_{k\nu} = \psi_{k\nu} + \lambda \sum_{\mu=1}^s \beta_{k\nu; k\mu} \psi_{k\mu} + \lambda \sum_{l \neq k} a_{k\nu; l} \psi_l + \lambda^2 \sum_{\mu=1}^s \gamma_{k\nu; k\mu} \psi_{k\mu} + \lambda^2 \sum_{l \neq k} b_{k\nu; l} \psi_l \quad (5.20a)$$

Ha az (5.20), (5.20a) kifejezéseket behelyettesítjük a  $(\mathbf{H} + \lambda \mathbf{V})\varphi_{k\nu} = F_{k\nu}\varphi_{k\nu}$  egyenletbe, és  $\lambda$  egyenlő hatványainak együtthatóit ismét egyenlővé tesszük, a nulladrendű tagok eltűnnek, a  $\lambda$  és  $\lambda^2$  rendű tagok pedig a következőket adják:

$$\sum_{\mu} E_k \beta_{k\nu; k\mu} \psi_{k\mu} + \sum_{l \neq k} E_l a_{k\nu; l} \psi_l + \mathbf{V} \psi_{k\nu} = \quad (5.21)$$

$$= \sum_{\mu} E_k \beta_{k\nu; k\mu} \psi_{k\mu} + \sum_{l \neq k} E_k a_{k\nu; l} \psi_l + E'_{k\nu} \psi_{k\nu}$$

$$\sum_{\mu} E_k \gamma_{k\nu; k\mu} \psi_{k\mu} + \sum_{l \neq k} E_l b_{k\nu; l} \psi_l + \sum_{\mu} \beta_{k\nu; k\mu} \mathbf{V} \psi_{k\mu} +$$

$$+ \sum_{l \neq k} a_{k\nu; l} \mathbf{V} \psi_l = \sum_{\mu} E_k \gamma_{k\nu; k\mu} \psi_{k\mu} + \sum_{l \neq k} E_k b_{k\nu; l} \psi_l + \quad (5.21a)$$

$$+ \sum_{\mu} E'_{k\nu} \beta_{k\nu; k\mu} \psi_{k\mu} + \sum_{l \neq k} E'_{k\nu} a_{k\nu; l} \psi_l + E''_{k\nu} \psi_{k\nu}$$

Ezekből az egyenletekből az  $E'_{k\nu}$ ,  $E''_{k\nu}$ ,  $a_{k\nu; l}$  és  $\beta_{k\nu; k\mu}$  ismeretleneket ugyanúgy meg lehet határozni, mint a nemelfajult esetben. Az  $F_{k\nu}$  energia számára az

$$F_{k\nu} = E_k + \lambda V_{k\nu; k\nu} + \lambda^2 \sum_{l \neq k} \frac{|V_{l; k\nu}|^2}{E_k - E_l} \quad (5.22)$$

kifejezést kapjuk; a megfelelő sajátfüggvény:

$$\begin{aligned} \varphi_{k\nu} = & \psi_{k\nu} + \lambda \sum_{\mu \neq \nu} \sum_{l \neq k} \frac{V_{k\mu; l} V_{l; k\nu}}{(E_k - E_l)(V_{k\nu; k\nu} - V_{k\mu; k\mu})} \psi_{k\mu} + \\ & + \lambda \sum_{l \neq k} \frac{V_{l; k\nu}}{E_k - E_l} \psi_l. \end{aligned} \quad (5.23)$$

Ezekben a kifejezésekben felhasználtuk azt a tényt, hogy a  $\psi_{k1}$ ,  $\psi_{k2}$ , ...,  $\psi_{ks}$  függvényeket már úgy választottuk, hogy  $\nu \neq \mu$  esetén  $V_{k\nu; k\mu} = 0$  legyen.

Ha  $V_{k\nu; k\nu} = v'_\nu$  ( $\nu = 1, 2, \dots, s$ ) valamennyien különbözőek, az  $E_k$  sajátérték első közelítésben  $s$  új sajátértékre hasad fel. Ekkor valamennyi  $\varphi_{k\nu}$  azonnal megszerkeszthető, mivel (5.23) alatt eltűnő nevező nem lép fel.

<sup>1</sup> Az elnevezés arra utal, hogy  $s$  számú lineárisan független sajátfüggvény tartozik hozzá.

Ha azonban a  $\mathbf{v}$  mátrix  $v_{\nu} = V_{k\nu; k\nu}$  sajátértékei közül egyesek megegyeznek egymással, a perturbált sajátértékek  $\lambda$ -ban elsőrendig elfajultak maradnak. A megfelelő  $\psi_{k\nu}$  zérusrendű hullámfüggvényeket még egy másik unitér transzformációnak kell alávetnünk. Ahhoz, hogy a  $\varphi_{k\mu}$  függvénye ket  $\lambda$ -ban elsőrendig megkapjuk ezeket a függvényeket úgy kell választanunk, hogy a

$$w_{\mu\nu} = \sum_{l \neq k} \frac{V_{k\mu; l} V_{l; k\nu}}{E_k - E_l} \quad (5.24)$$

hermitikus mátrix átlós legyen. Ekkor (5.23) alatt a zérus nevezőjű tagok eltűnnek és az összegezést el lehet végezni. Mindez automatikusan bekövetkezik, ha az (5.15) első közelítésű helyes sajátfüggvényeket más megfontolásokból ismerjük, s kezdettől fogva ezeket használjuk.

Ezzel a változtatással a perturbációs eljárás akkor is alkalmazható, ha több (de nem végtelen sok) sajátfüggvény tartozik ugyanazon diszkrét sajátértékhez. Ilyen esettel a következők során sokszor lesz dolgunk, és az ebben a fejezetben mondottak képezik a legtöbb kvantummechanikai számítás alapját. Valójában az ilyen számítások gyakran korlátozódnak (5.22) lineáris tagjára, azaz a  $V_{k\nu; k\nu} = v_{\nu}$ -t tartalmazó tagra. Ezt az (5.18) szekuláris egyenlet megoldása útján számíthatjuk ki, vagy — közvetlenebbül — egyszerű kvadratúrával, feltéve, hogy ismerjük a „helyes lineáris kombinációkat”, melyekre

$$v_{\nu\mu} = (\psi_{k\nu}, \mathbf{V} \psi_{k\mu}) = 0 \quad (\nu \neq \mu)$$

és

$$w_{\nu\nu'} = 0 \quad (\nu \neq \nu' \text{ és } \nu' = \nu')$$

egyaránt teljesül. Ezek a „helyes lineáris kombinációk” gyakran közvetlenül, csoportelméleti megfontolások segítségével meghatározhatók, anélkül, hogy a szekuláris egyenletet megoldanánk. A hullámfüggvények ilyen meghatározása a csoportelmélet egyik fontos alkalmazása kvantummechanikai feladatokra.



## 6. TRANSZFORMÁCIÓELMÉLET ÉS A KVANTUMMECHANIKA STATISZTIKUS ÉRTELMEZÉSÉNEK ALAPJAI

I. A kvantummechanika korai szakaszában az energiaértékek, a spontán átmeneti valószínűségek stb. meghatározásának szentelték a figyelmet. Később a figyelem egyre inkább az elvi kérdések felé fordult: a mátrixok, az operátorok és a sajátfüggvények fizikai értelmezését keresték. Azt a *kvantummechanika statisztikus értelmezése* adja meg, melynek kifejlesztésében a vezető szerepet M. BORN, P. A. M. DIRAC, W. HEISENBERG, P. JORDAN és W. PAULI játszotta.

Míg a klasszikus mechanikában  $2f$  szám ( $f$  helykoordináta és  $f$  sebességkoordináta) volt szükséges ahhoz, hogy egy  $f$  szabadsági fokú rendszert leírjunk, a kvantummechanika a rendszer állapotát a  $\varphi(x_1, \dots, x_f)$  ( $(\varphi, \varphi) = 1$ ) normált hullámfüggvénnyel írja le, melynek független változói a helykoordináták. Éppúgy, amint a klasszikus elméletben valamely állapotot  $2f$  tetszőleges szám megadásával jellemzünk, a kvantumelmélet az állapotot a

$$\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x_1, x_2, \dots, x_f)|^2 dx_1 \dots dx_f = 1$$

megszorításnak alávetett, egyébként tetszőleges hullámfüggvény segítségével határozza meg. Ez az állapot lehet a *Schrödinger*-egyenlet sajátfüggvénye, vagy ilyen sajátfüggvények lineárkombinációja. Az állapotok serege a kvantummechanikában eszerint sokkal nagyobb, mint a klasszikus elméletben.

A rendszer időbeli fejlődését a klasszikus mechanikában a *Newton*-féle mozgásegyenletek határozzák meg; a kvantummechanikában ezt a szerepet az

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \mathbf{H}\varphi \quad (6.1)$$

időtől függő *Schrödinger*-egyenlet tölti be ( $\mathbf{H}$  a *Hamilton*-operátor). A legegyszerűbb esetben  $\mathbf{H}$  a következő alakú:

$$\mathbf{H} = - \sum_{k=1}^f \frac{\hbar^2}{2m_k} \frac{\partial}{\partial x_k^2} + V(x_1 \dots x_f). \quad (6.2)$$

A  $\mathbf{H}$  operátor pontos alakjának meghatározása a kvantummechanika legfontosabb problémája.

A klasszikus mechanikában az állapot leírására szolgáló  $2f$  szám közvetlenül megadja az egyrészecskék koordinátáit és impulzusait, és ezekből nehézség nélkül kiszámíthatjuk e mennyiségek tetszőleges függvényeit. A kvantummechanikában annak a kérdésnek, hogy mi a részecske helye, általában nincs értelme. Csupán annak valószínűségéről van értelme beszélni, hogy a részecske bizonyos helyen található. Ugyanez érvényes az impulzusra is, és e mennyiségek függvényeire, amilyen pl. az energia.

*A fizikailag jelentős mennyiségek mindegyikének egy-egy hermitikus kvantummechanikai operátor felel meg.* Így például az  $x_k$  koordinátának az „ $x_k$ -val való szorzás” operátora felel meg; az impulzusnak a  $-\hbar(\partial/\partial x_k)$  operátor; az energiának a (6.2) képlettel megadott  $\mathbf{H}$ ; stb. Ez az utóbbi operátor mind között különleges szerepet tölt be: ez lép fel az időtől függő *Schrödinger*-egyenletben.

Ezeket az operátorokat általában oly módon kapjuk, hogy vesszük a klasszikus mennyiségnek a hely- és impulzuskoordinátákkal kifejezett alakját, s abban az  $x_k$  helykoordinátát az „ $x_k$ -val való szorzás” operátorával, a  $p_k$  impulzuskoordinátát a  $-\hbar(\partial/\partial x_k)$  operátorral helyettesítjük. Például a klasszikus harmonikus oszcillátor energiája

$$\frac{1}{2m}(p_1^2 + p_2^2 + p_3^2) + \frac{K}{2}(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2).$$

A kvantummechanikában ezt a

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2}\right) + \frac{K}{2}(x_1 \cdot x_1 + x_2 \cdot x_2 + x_3 \cdot x_3)$$

operátorral helyettesítjük. Ez az operátor pontosan a (6.2) alatt megadott alakú.

Valamely mennyiség (koordináta, energia) mérése általában csak olyan értéket adhat, amely a megfelelő operátor sajátértékei között fellép. Így pl. a lehetséges energiaszintek a  $\mathbf{H}$  operátor sajátértékei. Mi a valószínűsége annak, hogy a  $\mathbf{G}$  operátorral reprezentált mennyiség értéke  $\lambda_k$ , ha a rendszer állapota  $\varphi(x_1 \dots x_f)$ ? Ez a valószínűség bizonyosan zérus, ha  $\lambda_k$  nem sajátértéke  $\mathbf{G}$ -nek; ha azonban  $\lambda_k$  sajátérték és ha  $\psi_k$  a megfelelő normált sajátfüggvény, akkor

$$|\langle \varphi, \psi_k \rangle|^2 = |\langle \psi_k, \varphi \rangle|^2 \quad (6.3)$$

adja meg a kívánt valószínűséget.

A statisztikus értelmezés szerint a mérések különböző lehetséges eredményeinek csupán a valószínűségét számíthatjuk ki; valamely mérés vagy kísérlet eredményét bizonyossággal nem lehet megjósolni.

Ha  $\varphi$ -t kifejtjük  $\mathbf{G}$  sajátfüggvényeinek teljes ortogonális rendszere szerint:

$$\varphi = a_1 \psi_1 + a_2 \psi_2 + \dots, \quad (6.4)$$

és ha

$$\mathbf{G} \psi_k = \lambda_k \psi_k, \quad (6.4a)$$

akkor (6.3) szerint annak valószínűsége, hogy a mérés a  $\lambda_k$  értéket adja,  $|a_k|^2$ -tel egyenlő, ahol

$$(\psi_k, \varphi) = a_k. \quad (6.5)$$

Az összes lehetséges  $\lambda_1, \lambda_2, \dots$  értékhez tartozó valószínűségek összegének természetesen 1-et kell adnia; azaz

$$|a_1|^2 + |a_2|^2 + \dots = 1.$$

Hogy ez valóban így van, az  $\varphi$  normált voltából következik:

$$\begin{aligned} (\varphi, \varphi) &= \left( \sum_k a_k \psi_k, \sum_l a_l \psi_l \right) = \sum_{k,l} a_k^* a_l (\psi_k, \psi_l) = \\ &= \sum_{k,l} a_k^* a_l \delta_{kl} = \sum_k |a_k|^2 = 1. \end{aligned}$$

A  $c\varphi$  hullámfüggvény (ahol  $|c|=1$ ) ugyanannak az állapotnak felel meg, mint a  $\varphi$  függvény; eszerint a hullámfüggvényt a fizikai állapot csak egy egységnyi abszolút értékű tényező erejéig határozza meg. A  $\varphi$  hullámfüggvényből számított valószínűségek mind megegyeznek a  $c\varphi$  hullámfüggvényből számított valószínűségekkel, amint az nyomban belátható:

$$|(\psi_k, c\varphi)|^2 = |c(\psi_k, \varphi)|^2 = |c|^2 |(\psi_k, \varphi)|^2 = |(\psi_k, \varphi)|^2.$$

Mint hogy e valószínűségek az állapot egyedüli reális fizikai jellemzői, a két állapot egymással fizikai tekintetben megegyezik.

Ha ugyanahhoz a  $\lambda_k$  sajátértékhez több lineárisan független sajátfüggvény tartozik:  $\psi_{k1}, \psi_{k2}, \psi_{k3}, \dots$  (ezekről feltesszük, hogy ortogonálisak egymásra), akkor a  $\lambda_k$  értékhez tartozó valószínűség egyenlő a kifejtési együtthatók négyzetösszegével:

$$|(\psi_{k1}, \varphi)|^2 + |(\psi_{k2}, \varphi)|^2 + |(\psi_{k3}, \varphi)|^2 + \dots$$

Az előzőekben mondottak csak a diszkrét sajátértékek valószínűségeire vonatkoznak. A folytonos spektrum egy teljesen meghatározott sajátértékének valószínűsége mindig zérus, minthogy a folytonos spektrumban csak véges tartományokhoz tartozik véges valószínűség. Feltéve, hogy ez a tartomány elég kicsiny, ez a valószínűség egyenlő az eme tartományhoz tartozó saját differenciál kifejtési együtthatójának abszolútérték-négyzetével.

2. A kvantummechanika alapján kiszámított valószínűségi kifejezés egyetlen speciális esetben megy át teljesen determinált kijelentésbe; ez az az eset, amikor a  $\varphi$  állapotfüggvény a mérendő fizikai mennyiség  $\mathbf{G}$  operátorának sajátfüggvénye:  $\mathbf{G}\varphi = \lambda_k \varphi$ . Ekkor  $\varphi$  ortogonális  $\mathbf{G}$  mindazon sajátfüggvényeire, amelyek nem  $\lambda_k$ -hoz

tartoznak; a megfelelő sajátértékek valószínűsége zérus. A  $\lambda_k$  sajátérték valószínűsége így tehát 1. Ebben az esetben a mérés bizonyossággal a  $\lambda_k$  értéket adja.

Ha megmértünk egy mennyiséget és egy bizonyos értéket kaptunk, e mérést elég gyorsan megismételve ugyanazt az értéket kell kapnunk. Másként nem volna értelme a mérés szolgáltatva kijelentésnek, mely szerint a szóban forgó mennyiség ezt vagy azt az értéket veszi fel. Az ismételt mérés valószínűsége és a hullámfüggvény is, mely csupán arra szolgál, hogy segítségével valószínűséget számítsunk ki, a mérés folyamán megváltozik.<sup>1</sup> Valóban, látható, hogy a mérés után, amely  $\mathbf{G}$  számára eredményül a  $\lambda_k$  sajátértéket adta, a hullámfüggvénynek  $\mathbf{G}$  sajátfüggvényének kell lennie a  $\lambda_k$  sajátérték mellett. Csakis ebben az esetben adhatja  $\mathbf{G}$  ismételt mérése bizonyossággal a  $\lambda_k$  eredményt. A  $\mathbf{G}$  operátorral reprezentált mennyiség mérése perturbálja a hullámfüggvényt; az átmege  $\mathbf{G}$  valamely sajátfüggvényébe, speciálisan  $\psi_k$ -ba, ha a mérés eredménye a  $\lambda_k$  sajátérték volt. Általában nem jósolhatjuk meg bizonyossággal, hogy a rendszer állapotfüggvénye a  $\mathbf{G}$  operátor melyik sajátfüggvényébe megy át; a kvantummechanika csupán az egyes  $\psi_k$  sajátfüggvényekhez s a megfelelő  $\lambda_k$  sajátértékekhez tartozó  $|(\psi_k, \varphi)|^2$  valószínűséget adja meg. Minthogy annak valószínűségét, hogy a  $\varphi$  hullámfüggvény  $\mathbf{G}$  mérésének hatására a  $\psi_k$  hullámfüggvénybe megy át, a  $\varphi$ ,  $\psi_k$  függvényekből képezett  $|(\psi_k, \varphi)|^2$  kifejezés adja meg, ezt a mennyiséget a  $\varphi$  állapotból a  $\psi_k$  állapotba vezető átmeneti valószínűségnek nevezzük. Ha ismeretes valamely hullámfüggvény átmeneti valószínűsége minden más hullámfüggvénybe, akkor ezzel minden elgondolható kísérlet különböző eredményeinek valószínűsége adott.

A fentiekkel kapcsolatosan különösen fontos megjegyezni, hogy az átmeneti valószínűségnek invariáns jelentése van; ugyanazon rendszer két ekvivalens leírásában az átmeneti valószínűség értékének ugyanannak kell lennie.

3. *Áttérés új „koordináta-rendszerre”*. Legyenek  $\mathbf{G}, \mathbf{G}', \mathbf{G}'', \dots$  különböző fizikai mennyiségek (pl. energia, impulzus, helykoordináta) operátorai,  $\varphi_1, \varphi_2, \dots$  pedig különböző állapotok hullámfüggvényei. Ekkor ugyanazokat az eredményeket, amelyeket az operátorok és hullámfüggvények e rendszere segítségével kapunk, megkaphatjuk a

$$\bar{\mathbf{G}} = \mathbf{U}\mathbf{G}\mathbf{U}^{-1}, \quad \bar{\mathbf{G}}' = \mathbf{U}\mathbf{G}'\mathbf{U}^{-1}, \quad \bar{\mathbf{G}}'' = \mathbf{U}\mathbf{G}''\mathbf{U}^{-1}, \quad \dots$$

operátorok és a

$$\bar{\varphi}_1 = \mathbf{U}\varphi_1, \quad \bar{\varphi}_2 = \mathbf{U}\varphi_2, \quad \bar{\varphi}_3 = \mathbf{U}\varphi_3, \quad \dots$$

<sup>1</sup> A hullámfüggvény eszerint két, egymástól lényegesen különböző módon változik. Először, a (6.1) differenciálegyenletnek megfelelően változása folytonos az idő múlásával; másodsor, mérések alkalmával ugrásszerűen változik meg, valószínűségi törvények szerint. (Lásd az alább következő tárgyalást.)

állapotfüggvények rendszere segítségével is, ahol  $U$  tetszőleges unitér<sup>2</sup> operátor. Mindenekelőtt a sajátértékek, amelyek  $G$  és  $\bar{G}=UGU^{-1}$  méréseinek lehetséges eredményeit meghatározzák, megegyeznek, minthogy a sajátértékek hasonlósági transzformációkor nem változnak. Ha  $\lambda_k$  a  $G$  operátor valamely sajátértéke és  $\psi_k$  a megfelelő sajátfüggvény, úgy  $\lambda_k$  a  $\bar{G}=UGU^{-1}$  operátornak is sajátértéke és a megfelelő sajátfüggvény  $U\psi_k$ . Ennek igazolása céljából megjegyezzük, hogy  $G\psi_k = \lambda_k \psi_k$  fennállásából következik

$$\bar{G}U\psi_k = UGU^{-1}U\psi_k = UG\psi_k = U\lambda_k\psi_k = \lambda_k U\psi_k$$

fennállása.

Azonfelül a  $\lambda_k$  sajátérték valószínűsége, ha a mérendő mennyiséget az első „koordináta-rendszerben” a  $G$ , a másodikban pedig a  $\bar{G}$  operátor reprezentálja, egyenlő e két esetben. Az első esetben ez a valószínűség

$$|(\psi_k, \varphi)|^2.$$

A második esetben  $\varphi$  helyét  $U\varphi$  foglalja el,  $\psi_k$ -ét pedig  $\bar{G}$ -nek a  $\lambda_k$  sajátértékhez tartozó sajátfüggvénye, azaz  $U\psi_k$ . Eszerint a második „koordináta-rendszerben” a valószínűség számára az

$$|(U\psi_k, U\varphi)|^2$$

kifejezést kapjuk, ami  $U$  unitér jellegének folytán megegyezik a fentebb kapott kifejezéssel. Hasonlóképpen, a megfelelő  $\varphi_1, \varphi_2$  valamint  $U\varphi_1, U\varphi_2$  állapotpárokat összekötő átmeneti valószínűségeket szintén megegyeznek a két koordináta-rendszerben, minthogy

$$(U\varphi_1, U\varphi_2) = (\varphi_1, \varphi_2)$$

fennállásából következik

$$|(U\varphi_1, U\varphi_2)|^2 = |(\varphi_1, \varphi_2)|^2$$

fennállása.

Az ilyen áttérést egy másik koordináta-rendszerre — midőn az operátorokra hasonlósági transzformációt alkalmazunk s a  $\varphi$  hullámfüggvényt egyidejűleg  $U\varphi$ -vel helyettesítjük — *kanonikus transzformációnak* nevezzük. *Két leírás, ha az*

<sup>2</sup> Valamely  $U$  operátor unitér voltát a hermitikus jelleg analógiájára definiáljuk: tetszőleges  $f$  és  $g$  függvények mellett megköveteljük, hogy

$$(f, g) = (Uf, Ug)$$

teljesüljön. Ha  $f$  és  $g$  vektorok,  $U$  mátrix, és ez az egyenlőség az unitér jelleg szokásos (szükséges és elegendő) feltételére redukálódik.

egyik a másiktól kanonikus transzformációval kapható, egymással ekvivalens. Megfordítva, a 20. fejezetben meg fogjuk mutatni, hogy két kvantummechanikai leírás, amely egymással ekvivalens, kanonikus transzformációval egymásba transzformálható (kivéve az időtükrözés esetét, amit a 26. fejezetben tárgyalunk).

4. Kövessük végig egy példán a transzformációelmélet és a statisztikus elmélet alkalmazását. Válasszuk e célra az

$$(x_1 + x_2 + \dots + x_N)_{FE} = (\psi_F, (x_1 + x_2 + \dots + x_N)\psi_E) = X_{FE} \quad (6.6)$$

mátrixelem abszolútérték négyzetének fizikai jelentését mutató *Schrödinger*-féle megfontolást; itt  $N=f/3$  az elektronok száma,  $x_1, x_2, \dots, x_N$  pedig az  $x$  koordinátáik. A mátrixelmélet szerint ez határozza meg az  $x$  tengely mentén polarizált sugárzás által indukált átmenet valószínűségét a  $\psi_E$  stacionárius állapotból a  $\psi_F$  stacionárius állapotba. Az  $E, F$  indexek a két stacionárius állapot energiáit jelölik:

$$\mathbf{H}\psi_E = E\psi_E, \quad \mathbf{H}\psi_F = F\psi_F. \quad (6.7)$$

A sugárzás által indukált átmenet fogalmának nincs semmi köze a kísérlet által előidézett átmenetekhez, amelyekről fentebb volt szó. Az előbbi a statisztikus értelmezés fogalmi szerkezetéből következik és ez vezet el annak — némileg paradoxul hangzó — valószínűségéhez, hogy a  $\varphi'$  állapot valósul meg, ha a rendszer állapota  $\varphi$ . Ez dimenziótlan mennyiség. A most következő tárgyalás során annak a valószínűségét határozzuk meg, hogy az atom a következő másodperc folyamán — egy  $\hbar\omega = F - E$  energiájú fénykvantum elnyelésével — a  $\psi_E$  állapotból a  $\psi_F$  állapotba megy át. Ennek a valószínűségnek a dimenziója  $s^{-1}$ , és csupán két stacionárius állapot (a  $\mathbf{H}_0$  *Hamilton*-operátor két sajátfüggvénye) között végbemenő átmenetre vonatkozóan van értelme, míg az előbbit tetszőleges két  $\varphi, \varphi'$  állapotra vonatkozóan definiáltuk. Minthogy a sugárzás által indukált átmenet valószínűsége időben kibontakozó folyamatot jellemez, azt az időtől függő *Schrödinger*-egyenlet segítségével kell tudnunk kiszámítani.

Valójában ez az utóbbi megállapítás nem teljesen igaz, minthogy az időtől független *Schrödinger*-egyenlet nem képes magyarázni a spontán emissziót. Eme egyenlet szerint az atomok tetszőleges hosszú időn át stabilak, még a gerjesztett állapotokban (így a  $\psi_F$  állapotban) is, minthogy  $\varphi = \psi_F \exp(-i\frac{F}{\hbar}t)$  megoldása a (6.1) egyenletnek. Mindazonáltal a *Schrödinger*-egyenlet felöleli az abszorpció (valamint az indukált emisszió) folyamatát, így mindaddig helyes eredményt kell kapnunk, amíg a spontán emisszió nem játszik szerepet, azaz míg az atom csaknem teljesen a  $\psi_E$  alapállapotban található. Később látni fogjuk, hogy ugyanezen feltevés szükséges ahhoz, hogy a számításokat elvégezhessük; teljesül e feltevés, ha az atom kezdetben a legmélyebb állapotban volt, ha megfontolásainkat vi-

szonylag rövid időtartamokra korlátozzuk, és ha a beeső fényhullámok intenzitása nem túl nagy (ez a gyakorlatban amúgy is nehezen valósítható meg).

Most rátérünk az abszorpciós folyamat tárgyalására. Feltesszük, hogy a  $t=0$  időpontban az atom állapota  $\varphi(0)=\psi_E$  volt; a továbbiakban változását az

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \mathbf{H}\varphi = (\mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_1)\varphi \quad (6.8)$$

egyenlet írja le, ahol  $\mathbf{H}_0$  a *Hamilton-operátor* eltűnő beeső sugárzás mellett,  $\mathbf{H}_1$  pedig a sugárzás hatását tartalmazó operátor. A sugárzás nem más, mint egy elektromos hullámtér:

$$\mathcal{E}_x = P \sin \omega t, \quad \mathcal{E}_y = 0, \quad \mathcal{E}_z = 0. \quad (6.9)$$

A térerősségeknek a koordináta függésétől az atomok kicsiny kiterjedése folytán eltekinthetünk. A potenciál (6.2) alatt a

$$V + \mathbf{H}_1 = V + e(x_1 + x_2 + \dots + x_N)P \sin \omega t \quad (6.8a)$$

kifejezéssel helyettesíthető. Ha  $P=0$  lenne, a hullámfüggvény a következőképpen függne az időtől:

$$\varphi = \psi_E \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right). \quad (6.10)$$

Ha  $P \neq 0$ , ezt az időfüggést módosítja (6.8a) második tagja, melyet mint perturbációt veszünk tekintetbe. Ekkor  $\varphi$ -re az

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \mathbf{H}_0\varphi + (eP \sin \omega t)(x_1 + x_2 + \dots + x_N)\varphi \quad (6.11)$$

egyenlet érvényes.

Eme egyenlet megoldása céljából fejtsük ki  $\varphi$ -t  $\mathbf{H}_0$  sajátfüggvényeinek teljes rendszere szerint:

$$\varphi(t) = a_E(t)\psi_E + a_F(t)\psi_F + a_G(t)\psi_G + \dots, \quad (6.12)$$

ahol az  $a_E, a_F, a_G, \dots$  együtthatók függetlenek az  $x_1, x_2, x_N$  koordinátáktól, a  $\psi_E, \psi_F, \psi_G, \dots$  függvények pedig függetlenek az időtől. Az állapot a  $\varphi$  hullámfüggvény helyett az  $a_E, a_F, a_G, \dots$  együtthatók segítségével is jellemezhető.

Eme együtthatók abszolút értékének négyzetei, az  $|a_E|^2, |a_F|^2, |a_G|^2, \dots$  mennyiségek, az atom *különböző gerjesztett szintjeinek valószínűségeit adják meg*. Ha az atomot nem perturbálja fényhullám, ezek a valószínűségek nem változnak az időben, s minthogy kezdetben csak  $|a_E|^2=1$  volt zérustól különböző, ez így marad minden időben. Másrésztől ha az atomot fényhullám éri, akkor a magasabb állapotok szintén gerjesztődnek. Számítsuk ki e gerjesztés erősségét. Ebből a célból feltesszük, hogy a  $t=0$  időpontban

$$a_E(0)=1, \quad a_F(0)=0, \quad a_G(0)=0, \quad \dots$$

és hogy a fény  $\omega$  frekvenciáját közelítőleg az átmenet

$$(F-E) \approx \hbar\omega \quad (6.E.1)$$

energiakülönbségének megfelelő frekvencia adja meg.

Ha a  $\varphi$  hullámfüggvény (6.12) alatt felírt kifejezését behelyettesítjük a (6.11) egyenletbe, az  $a_E, a_F, a_G, \dots$  együtthatók időfüggésére differenciálegyenletet kapunk. Mivel bennünket a  $\psi_F$  első gerjesztett állapot gerjesztése érdekel, képezzük ezen egyenlet skaláris szorzatát  $\psi_F$ -fel; ekkor a bal oldalon  $\mathbf{H}_0$  sajátfüggvényeinek ortogonalitása folytán csak az  $a_F$ -et tartalmazó tag marad meg (lásd a (4.12), (4.12a) egyenletet), és az

$$i\hbar \frac{\partial a_F(t)}{\partial t} = F a_F + (Pe \sin \omega t)(X_{FE} a_E + X_{FF} a_F + X_{FG} a_G + \dots) \quad (6.13)$$

egyenletet kapjuk, ahol alkalmaztuk a (6.6) jelölést:

$$(\psi_F, (x_1 + x_2 + \dots + x_N) \psi_E) = X_{FE}$$

A (6.13) egyenlet jobb oldalán álló két tag nagyon különböző nagyságrendű. Az  $F$  energia nagyságrendje néhány elektronvolt. Másrésztől, csupán igen intenzív monokromatikus fénynyalámban éri el a  $P$  elektromos vektor amplitúdója a  $10^{-2}$  volt/cm értéket. Az  $\mathbf{X}$  operátor mátrixelemeinek értéke kb.  $10^{-8}$  cm, így  $PeX \approx 10^{-10}$  elektronvolt. A (6.13) egyenlet jobb oldalán a második tagba ennélfogva az

$$a_E = \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right), \quad a_F = 0, \quad a_G = 0, \quad \dots$$

értékeket írhatjuk be. Mivel  $e$  tag kicsiny, ebbe a (6.10) egyenlettel megadott közelítő hullámfüggvényt helyettesítjük. Ez a hullámfüggvény pedig a (6.13) egyenlet jobb oldalán álló perturbáció teljes elhanyagolásával adódik. Ily módon kapjuk:

$$i\hbar \frac{\partial a_F(t)}{\partial t} = F a_F(t) + Pe X_{FE} \sin \omega t \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right). \quad (6.14)$$

Eme egyenlet integrálása céljából végezzük el az

$$a_F(t) = b(t) \exp\left(-i \frac{F}{\hbar} t\right)$$

helyettesítést. Ekkor

$$\begin{aligned} & \exp\left(-i \frac{F}{\hbar} t\right) i\hbar \frac{\partial b(t)}{\partial t} = \\ & = \frac{iPe}{2} X_{FE} \left\{ \exp\left[-i \left(\frac{E}{\hbar} + \omega\right) t\right] - \exp\left[-i \left(\frac{E}{\hbar} - \omega\right) t\right] \right\}, \end{aligned}$$



ezt  $\exp\left(i\frac{F}{\hbar}t\right)$ -vel megszorozva és integrálva kapjuk:

$$i\hbar b(t) = \frac{iPe}{2} X_{FE} \left\{ \frac{\exp\left[-i\left(\omega - \frac{F-E}{\hbar}\right)t\right]}{-i\left(\omega - \frac{F-E}{\hbar}\right)} - \frac{\exp\left[-i\left(-\omega - \frac{F-E}{\hbar}\right)t\right]}{-i\left(-\omega - \frac{F-E}{\hbar}\right)} + C \right\}.$$

Az integrációs állandót a  $b(0)=0$  feltétel határozza meg. A  $b(t)$ -re kapott kifejezés ezután két részre bontható:

$$b(t) = \frac{iPe}{2} X_{FE} \left\{ \frac{\exp\left[-i\left(\omega - \frac{F-E}{\hbar}\right)t\right] - 1}{\hbar\omega - F + E} + \frac{\exp\left[-i\left(-\omega - \frac{F-E}{\hbar}\right)t\right] - 1}{\hbar\omega + F - E} \right\}. \quad (6.15)$$

E kifejezés a  $t=0$  időben tényleg eltűnik, amint annak lennie kell; látható azonkívül, hogy  $b(t)$  két periodikus függvény összege.

Rögzítsük a fény  $P^2$  intenzitását és változtassuk a frekvenciát; ha  $\hbar\omega$  közelítőleg megegyezik  $F-E$ -vel, (6.15) első tagja igen nagyvá válik. Észrevehető mértékű gerjesztés általában csak akkor következik be, ha ez a feltétel teljesül. Ez magyarázatát adja a Bohr-féle frekvenciafeltételnek: az  $E$  energiájú állapotból az  $F$  energiájú állapotba való átmenetet előidéző fény frekvenciájának teljesítenie kell a (6.E.1) feltételt; azaz a  $\hbar\omega \approx (F-E)$  összefüggést.

E feltétel folytán a következőkben (6.15) második tagját az elsőhöz képest elhanyagolhatjuk. Az  $F$  állapot  $|a_F(t)|^2 = |b(t)|^2$  valószínűségére így módon kapjuk:

$$|b(t)|^2 = \frac{P^2 e^2}{2} |X_{FE}|^2 \frac{1 - \cos\left(\omega - \frac{F-E}{\hbar}\right)t}{(\hbar\omega - F + E)^2}. \quad (6.15a)$$

5. Eddig feltettük, hogy az atomra a  $t=0$  időpontban beeső fényhullám alakja tiszta szinusz hullám. Valójában a fény a legtöbb esetben szinusz hullámok olyan szuperpozíciója, amelyeknek frekvenciái  $\omega = (F-E)/\hbar$  körül szimmetrikus intervallumot töltenek ki, fázisaik eloszlása pedig véletlenszerű. A véletlenszerű fazi-

sok miatt feltehető, hogy e szuperponált hullámok hatása összeadódik; ekkor annak teljes valószínűsége, hogy a  $t$  időben az atom az  $F$  állapotban van,

$$|b(t)|^2 = \sum_{\omega} |X_{FE}|^2 \frac{P_{\omega}^2 e^2}{2} \frac{1 - \cos\left(\omega - \frac{F-E}{\hbar}\right)t}{(\hbar\omega - F + E)^2}, \quad (6.16)$$

ahol  $\omega$  a beeső fény frekvenciáin fut végig,  $P_{\omega}$  pedig az  $\omega$  frekvenciájú rezgés amplitúdója. Ha a beeső sugárzás frekvenciái egy  $(F-E)/\hbar = \omega$  körül szimmetrikus kicsiny tartományban tömörülnek, amelyet pl. felülről  $\omega_2$ , alulról  $\omega_1$  határol, írhatjuk:  $P_{\omega}^2 = 4J d\omega$ , ahol  $J$  a fény  $\omega/2\pi$  rezgésszámának egységnyi hosszúságú intervallumára eső intenzitás (energiasűrűség),  $d\omega$  pedig  $\omega$  infinitezimális intervalluma. Ekkor (6.16) helyére az

$$|b(t)|^2 = 2e^2 J |X_{FE}|^2 \int_{\omega_1}^{\omega_2} \frac{1 - \cos\left(\omega - \frac{F-E}{\hbar}\right)t}{(\hbar\omega - F + E)^2} d\omega \quad (6.16a)$$

integrál lép; bevezetve az

$$x = t \left( \omega - \frac{F-E}{\hbar} \right) \quad (6.E.2)$$

új integrációs változót, írhatjuk:

$$|b(t)|^2 = \frac{2}{\hbar^2} e^2 J t |X_{FE}|^2 \int_{x_1}^{x_2} \frac{1 - \cos x}{x^2} dx. \quad (6.16b)$$

Az új integrációs határok

$$x_1 = t \left( \omega_1 - \frac{F-E}{\hbar} \right), \quad x_2 = t \left( \omega_2 - \frac{F-E}{\hbar} \right). \quad (6.E.2)$$

Minthogy azonban (6.16b) alatt az integrandus lényeges mértékben csak egy, az  $x=0$  körül elhelyezkedő szűk tartományban járul hozzá az integrál értékéhez,  $-\infty$ -tól  $+\infty$ -ig integrálhatunk. Az  $F$  energiájú állapot valószínűsége ekkor

$$|b(t)|^2 = \frac{2\pi e^2 J t}{\hbar^2} |X_{FE}|^2. \quad (6.17)$$

Az integrációs tartomány kiterjesztése csak akkor jogos, ha  $x_1, x_2$  nagy számok, ami (6.E.2) szerint azt jelenti, hogy a beeső fény által elfoglalt frekvenciatartománynak  $\omega = (F-E)/\hbar$  mindkét oldalán nagynak kell lennie  $1/t$ -hez képest. Másrésztől számításunk csak az  $F$  állapot  $\tau$  élettartamához képest kicsiny időtartamokra tekinthető jogosnak. Ez azt jelenti, hogy fel kell tennünk: a beeső fény szélessége igen nagy a  $\hbar/\tau$  „természetes vonalszélesség”-hez képest.

Annak valószínűsége, hogy az atomot az  $F$  energiájú állapotban találjuk, (6.17) értelmében arányos a beeső fény  $J$  intenzitásával, a mátrixelem abszolút értékének négyzetével,  $|X_{FE}|^2$ -nel — a mátrixelmélet megállapításával összhangban —, és a fényhullám  $t$  tartamával, megfelelően várakozásunknak. Újból megjegyezzük, hogy (6.17) csak a gerjesztett állapot élettartamához képest rövid és a beeső fény reciprok frekvenciájához képest hosszú idők esetében érvényes.

Ennek, valamint az eredmény közelítő voltának ellenére (6.17) igen szép igazolását nyújtja ama feltevésnek, amely szerint  $|a_F|^2$  az  $F$  energiájú állapot gerjesztésének erőssége. A konfigurációs térbeli hullámcsomag fogalmával együtt ez az egyenlet a kvantummechanika statisztikus értelmezésének hathatós támaszát képezi. Azonfelül (6.17) azt is mutatja, hogy

$$|X_{FE}|^2 = |(\psi_F, (x_1 + x_2 + \dots + x_N)\psi_E)|^2$$

arányos az  $x$  tengely irányában polarizált fény által indukált, a  $\psi_E$  stacionárius állapotból a  $\psi_F$  stacionárius állapotba vezető átmenet valószínűségével. Ezek az eredmények, melyeket az ittenieknél jóval általánosabb feltevések alapján is levezettek, képezik az alapot a színeképvonalak intenzitásainak vagy intenzitásarányainak kiszámításához.

## 7. ABSZTRAKT CSOPORTELMÉLET

Vegyük a következő hat mátrixot:<sup>1</sup>

$$\begin{array}{cccc}
 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, & \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, & \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\sqrt{3} \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, & \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\sqrt{3} \\ -\frac{1}{2}\sqrt{3} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \\
 \mathbf{E} & \mathbf{A} & \mathbf{B} & \mathbf{C} \\
 \\ 
 \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\sqrt{3} \\ -\frac{1}{2}\sqrt{3} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, & \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\sqrt{3} \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} & & \\
 \mathbf{D} & \mathbf{F} & & 
 \end{array} \tag{7.E.1}$$

Képezzük ama 36 szorzatból álló szorzótáblázatot, amelyet úgy kapunk, hogy a (7.E.1) alatt felírt mátrixok mindegyikét megszorozzuk a (7.E.1) mátrixok mindegyikével a mátrixszorzás szabálya szerint. Látnivaló, hogy mind a 36 eredményül kapott mátrix megegyezik a (7.E.1) alatt felírt mátrixok valamelyikével. Az ilyen mátrixhalmaz neve: *csoport*. E mátrixok e tulajdonságát egy táblázat — a *csoport-táblázat* — segítségével lehet szemléltetni:

	<i>E</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>D</i>	<i>F</i>
<i>E</i>	<i>E</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>D</i>	<i>F</i>
<i>A</i>	<i>A</i>	<i>E</i>	<i>D</i>	<i>F</i>	<i>B</i>	<i>C</i>
<i>B</i>	<i>B</i>	<i>F</i>	<i>E</i>	<i>D</i>	<i>C</i>	<i>A</i>
<i>C</i>	<i>C</i>	<i>D</i>	<i>F</i>	<i>E</i>	<i>A</i>	<i>B</i>
<i>D</i>	<i>D</i>	<i>C</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>F</i>	<i>E</i>
<i>F</i>	<i>F</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>A</i>	<i>E</i>	<i>D</i>

Az első tényező az első oszlopban áll, a második tényező az első sorban, a szorzat pedig a táblázatnak azon a helyén, ahol az első tényező sora és a második tényező oszlopa metszi egymást. Ez a táblázat magában foglalja a (7.E.1) mátrixokra vonatkozó összes szorzási szabályt.

A *csoport* pontos definíciója a következő: A *csoport* bizonyos objektumok halmaza (ezek a csoportnak az *elemei*), amelyekre értelmezve van egy művelet, melyet

<sup>1</sup> A csoport egységelemének (németül: Einheit, egység) jelölésére az *E* szimbólumot használjuk:

szorzásnak nevezünk.  $E$  szorzás bármely két csoportelemhez (tényezőhöz) hozzárendel egy harmadik csoportelemet, azok szorzatát.<sup>2</sup>  $E$  csoportműveletnek (szorzásnak), mely a csoportelemekhez lényeges módon hozzá tartozó tulajdonság, azonfelül az alábbi tulajdonságokkal kell rendelkeznie.

1. *Érvényesnek kell lennie az asszociatív törvénynek.* Ha  $AB=F$  és  $BC=G$ , akkor  $FC=AG$ . Ha a csoport elemei mátrixok és csoportműveletnek a mátrixszorzást tekintjük, akkor az asszociatív törvény mindig teljesül (az 1. fejezet 3. tétele folytán). Azokat a csoportokat, melyekben a szorzás kommutatív törvénye is teljesül, vagyis amelyekben  $AB=BA$ , *Abel*-csoportnak mondjuk.

2. Az elemek között van egy (és csak egy), melyet *azonosságnak* vagy *egységlemnek* nevezünk, amelyet  $E$ -vel jelölünk, és amely olyan tulajdonságú, hogy bármely más elemmel képezett szorzata eredményül éppen ezt a másik elemet adja, vagyis  $EA=AE=A$ .

3. Minden elemnek van *reciproka*. Azaz minden  $A$  elemhez létezik olyan  $B$  elem, hogy  $BA=E$ . Ekkor azt is meg lehet mutatni (mint az 1. fejezet 5. tételében), hogy  $AB=E$ . A bizonyítás menete a következő:  $BA=E$  fennállásából következik  $BAB=B$ ; ha  $B$ -nek  $C$  a reciproka, következik, hogy  $CBAB=CB$ , azaz  $AB=E$ . Az  $A$  reciprokát  $A^{-1}$ -nel jelöljük.

A csoportelemek és a csoportművelet e három tulajdonsága képezi a csoport definícióját. Eme (vagy valamilyen más) alakban megfogalmazva mint *csoportaxiómákra* vagy *csoportposztulátumokra* hivatkozunk rájuk.

*Szabály:* Az  $ABCD\dots$  szorzat reciprokát oly módon képezzük, hogy az egyes tényezőik reciprokait *fordított sorrendben* vesszük (ugyanúgy, mint a mátrixok esetében). Eszerint

$$(ABCD\dots)^{-1} = \dots D^{-1}C^{-1}B^{-1}A^{-1}.$$

Ennek helyessége azonnal belátható:

$$(\dots D^{-1}C^{-1}B^{-1}A^{-1})(ABCD\dots) = E.$$

Megjegyzendő, hogy  $AX=B$  és  $AY=B$  fennállásából következik, hogy  $X=Y$ , mivel mind  $X$ , mind  $Y$  nyilvánvalóan egyenlő  $A^{-1}B$ -vel. Hasonlóképpen,  $XA=B$  és  $YA=B$  fennállásából ugyancsak következik, hogy  $X=Y=BA^{-1}$ . Ha a csoportnak csupán véges  $h$  számú eleme van, véges csoportnak mondjuk, és a  $h$  számot a csoport *rendjének* nevezzük.

<sup>2</sup> A csoportot a következőkben mint  $n$ -dimenziós mátrixok rendszerét jeleníthetjük meg gondolatban.

## VÉGES CSOPORTOKRA VONATKOZÓ TÉTELEK<sup>3</sup>

Vegyünk szemügyre egy  $X$  csoportelemet. Ekkor képezhetjük az elemek

$$E, X, X^2, X^3, X^4, X^5, \dots \quad (7.E.2)$$

stb. sorozatát. Minthogy a (7.E.2) alatt felírt elemek valamennyien elemei a csoportnak, és az összes elem száma véges, a (7.E.2) sorozat elemei közül legalább egynek bizonyos számú hatvány után másodszor is fel kell lépnie. Legyen az első olyan elem, amely másodszor is fellép,  $X^n = X^k$  (ahol  $k < n$ ). Ekkor  $k$ -nak zérussal kell egyenlőnek lennie:  $X^n = E$ ; másként  $X^{n-k} = X^{n-k}$  is fellépne a (7.E.2) sorozatban és  $X^n$  nem az első olyan elem volna, mely *másodízben* is fellép. Ha  $n$  a legkisebb olyan szám, amelyre  $X^n = E$  fennáll, akkor  $n$  neve: az  $X$  elem *rendje*. Az

$$E, X, X^2, X^3, \dots, X^{n-1} \quad (7.E.3)$$

sorozatot  $X$  periódusának nevezzük. A (7.E.1) csoportban  $D$  periódusa például  $E, D, D^2 = F$  ( $D^3 = FD = E$ ), és így  $D$  rendje 3. Az  $F$  elem periódusa  $E, F, F^2 = D$  ( $F^3 = DF = E$ )s így  $F$  rendje ugyancsak 3. Az  $A$  elem rendje ezzel szemben 2, mivel  $A^2$  azonnal az  $E$  egységjelemet adja.

Az  $X$  elem periódusa magában véve csoportot (*Abel*-csoportot) képez. A csoportelemek valamely halmazát, amely maga is csoport, *alcsoporthnak* nevezzük. A (7.E.3) alatt megadott példa *Abel*-féle *alcsoporth*.

1. tétel. Ha a  $\mathcal{H}$  csoport rendje  $h$ , elemei pedig  $E, A_2, A_3, \dots, A_h$  és ha  $A_k$  e csoport tetszőleges eleme, akkor az  $EA_k = A_k, A_2A_k, A_3A_k, \dots, A_hA_k$  sorozatban minden elem egyszer és csak egyszer fellép. Legyen  $X$  a csoportnak bármely eleme és legyen  $XA_k^{-1} = A_r$ ; ekkor  $A_rA_k = X$ , és  $X$  fellép a sorozatban. Másrésztől  $X$  nem léphet fel kétszer, mivel  $A_rA_k = X$  és  $A_sA_k = X$  fennállásából  $A_r = A_s$  következik.

Természetesen ugyanez vonatkozik az  $A_kE, A_kA_2, A_kA_3, \dots, A_kA_h$  sorozatra is. Az 1. tétel kifejezi azt a tényt, hogy a csoporttáblázat minden oszlopában (s ugyanúgy: minden sorában) minden egyes elem egyszer és csak egyszer lép fel. E tétel legegyszerűbb és legfontosabb alkalmazása a következő. Ha mindegyik  $X$  csoportelemnek megfeleltetünk egy-egy  $J$  számot oly módon, hogy az egyes csoportelemeknek rendre a  $J_E, J_{A_2}, J_{A_3}, \dots, J_{A_h}$  számok feleljenek meg ( $J$  tehát „a csoporttérben értelmezett függvény”), akkor

$$\sum_{\nu=1}^h J_{A\nu} = \sum_{\nu=1}^h J_{A\nu X} = \sum_{\nu=1}^h J_{XA\nu}.$$

Nyilvánvaló, hogy mindegyik összegben pontosan ugyanazok a számok lépnek fel, eltekintve a sorrendtől.

<sup>3</sup> Valamennyi, véges csoportra vonatkozó tételt verifikáljuk a (7.E.1) csoport esetében! Használjuk fel ehhez a csoporttáblázatot!

Legyen  $\mathcal{B}$  alcsoportja  $\mathcal{H}$ -nak, elemei legyenek:  $E, B_2, B_3, \dots, B_g$ . A  $g$  számú  $EX, B_2X, B_3X, \dots, B_gX$  elem  $\mathcal{B}X$  halmazát *jobb oldali mellékosztálynak* nevezzük, feltéve, hogy  $X$  nem lép fel a  $\mathcal{B}$  alcsoportban.<sup>4</sup> (Ha fellépne,  $\mathcal{B}X$  elemei pontosan ugyanazok volnának, mint a  $\mathcal{B}$  alcsoportéi, amint azt az 1. tétel mutatja.) Egy *mellékosztály semmi esetre sem csoport*, minthogy az  $E$  egységелеmet nem tartalmazhatja, sem pedig  $\mathcal{B}$ -nek bármely más elemét. Tegyük fel például, hogy  $B_kX = B_l$ ; ekkor  $X = B_k^{-1}B_l$  benne lenne a  $\mathcal{B}$  alcsoportban és  $\mathcal{B}X$  megegyezne magával  $\mathcal{B}$ -vel. Hasonlóképpen, az  $XE = X, XB_2, XB_3, \dots, XB_g$  elemek  $\mathcal{B}$  *bal oldali mellékosztályát* képezik.

**2. tétel.** *Valamely  $\mathcal{B}$  alcsoport két jobb oldali mellékosztálya vagy ugyanazon elemekből áll, vagy nincs közös elemük.* Legyen az egyik mellékosztály  $\mathcal{B}X$ , a másik  $\mathcal{B}Y$ . Ekkor  $B_kX = B_lY$  maga után vonja  $YX^{-1} = B_l^{-1}B_k$  fennállását, vagyis az  $YX^{-1}$  elem benne lenne  $\mathcal{B}$ -ben. Ekkor az 1. tétel folytán, ha azt a  $\mathcal{B}$  alcsoportra alkalmazzuk, az  $EYX^{-1}, B_2YX^{-1}, \dots, B_gYX^{-1}$  sorozat azonos az  $E, B_2, B_3, \dots, B_g$  sorozattal, ha a sorrendtől eltekintünk. Eszerint  $EYX^{-1}X, B_2YX^{-1}X, B_3YX^{-1}X, \dots, B_gYX^{-1}X$  ugyancsak megegyeznék az  $EX, B_2X, B_3X, \dots, B_gX$  sorozattal, nem tekintve a sorrendet. Az előbbieket azonban egyszerűen a  $\mathcal{B}Y = EY, B_2Y, B_3Y, \dots, B_gY$  mellékosztály elemei. Eszerint  $\mathcal{B}Y$  elemei megegyeznek  $\mathcal{B}X$  elemeivel, hacsak egyetlen közös elemük van. *Ennek kritériuma, hogy  $YX^{-1}$  benne legyen  $\mathcal{B}$ -ben.*

Például a (7.E.1) alatt megadott csoport egyik alcsoportja az  $A$  elem periódusa, mely az  $E, A$  elemekből áll. Ennek a csoportnak egy jobb oldali mellékosztályát kapjuk, ha eme elemek mindegyikét megszorozzuk jobbról egy másik elemmel, mondjuk  $B$ -vel. Ily módon az  $EB = B, AB = D$  mellékosztályt kapjuk. Mellékosztályokat kapunk akkor is, ha az  $E, A$  elemeket a  $C, a D$ , ill. az  $F$  elemmel szorozzuk meg jobbról. Ha az  $E, A$  elemeket jobbról megszorozzuk

$B$ -vel, akkor a  $B, D$ ,  
 $C$ -vel, akkor a  $C, F$ ,  
 $D$ -vel, akkor a  $D, B$ ,  
 $F$ -vel, akkor az  $F, C$

mellékosztályt kapjuk. Eszerint ebben az esetben a  $B$ -vel és  $D$ -vel (vagy a  $C$ -vel és  $F$ -vel) való szorzás eredményeképpen kapott mellékosztályok megegyeznek. Megjegyezzük még, hogy  $BD^{-1} = BF = A$  (vagy  $BD^{-1} = BF = A$ ) az  $E, A$  alcsoportban benne van.

Tekintsük most  $\mathcal{B}$  összes *különböző* mellékosztályát! Legyenek ezek  $\mathcal{B}X_2, \mathcal{B}X_3, \dots, \mathcal{B}X_l$ . A  $\mathcal{H}$  csoport elemeinek mindegyike fellép vagy  $\mathcal{B}$ -ben, vagy az  $l-1$  mellékosztály egyikében. Ily módon összesen  $lg$  számú elemet kapunk. Minthogy mindegyik elem legalább egyszer fellép és egyikük sem lép fel kétszer,  $lg$ -nek egyenlőnek kell lennie  $h$ -val. Ezzel beláttuk a 3. tételt.

<sup>4</sup>  $X$ -nek természetesen  $\mathcal{H}$  elemének kell lennie.

3. tétel. Valamely alcsoport  $g$  rendje egész számú osztója az egész csoport  $h$  rendjének. A  $h/g=l$  hányadosra mint a  $\mathcal{B}$  alcsoport indexére hivatkozunk a  $\mathcal{H}$  csoportban.

Míthogy egy-egy elem periódusa alcsoportot képez, amelynek annyi eleme van, amekkora a szóban forgó elem rendje, következik, hogy bármely elemnek a rendje osztója a csoport rendjének.

*Kritérium alcsoportokra.* Ha a csoportelemek valamely komplexusa a benne foglalt összes  $A, B$  elempár minden  $AB$  szorzatát tartalmazza, akkor csoportot képez, és így az eredeti csoportnak alcsoportja. A szorzás asszociatív törvénye érvényes a csoport minden elemére, és így a vizsgált komplexusra is. Bármely  $A$  elemmel együtt annak minden hatványa is fellép a komplexusban, ennél fogva az  $E$  egységelem ugyancsak fellép. Végül ha  $n$  az  $A$  elem rendje, akkor  $A^n = E$  és  $A^{n-1} = A^{-1}$ . A komplexusban tehát mindegyik elemmel együtt a reciproka is fellép. Ennél fogva mind a három csoportpszutulátum teljesül.

## PÉLDÁK CSOPORTOKRA

1. Az olyan csoport, mely csak egy elemet tartalmaz, egyedül az  $E$  egységelemből áll.

2. Abban az esetben, ha a csoport rendje 2, a csoporttáblázat

	$E$	$A$
$E$	$E$	$A$
$A$	$A$	$E$

Ez *Abel*-féle csoport. A neve: tükrözési csoport, mivel az egységelem és az  $x' = -x$  tükrözési transzformáció éppen ezt a csoportot alkotja.

3. Ha a csoport rendje 3, a csoport az egységelemen kívül csak olyan elemet tartalmazhat, amelynek rendje 3; ennek ugyanis a 3 egész számú (és 1-től különböző) osztójának kell lennie; Ez a csoport tehát egyetlen periódusból áll. Elemei

$$E, A, A^2 (A^3 = E).$$

Ez tehát *Abel*-csoport.

Ugyanez áll minden olyan csoportra, amelynek rendje valamely  $p$  prímszám. A csoport elemei

$$E, A, A^2, A^3, \dots, A^{p-1}.$$

Az ilyen alakú csoportok neve *ciklikus csoport* (akkor is, ha  $p$  nem prímszám). Ha  $\omega$  egy  $n$ -edik primitív egységgyök (azaz  $\omega^n$  az  $\omega$  szám legkisebb olyan hatványa, mely egyenlő 1-gyel; ilyen például  $\omega = \cos 2\pi/n + i \sin 2\pi/n$ ), akkor az

$$1, \omega, \omega^2, \dots, \omega^{n-1} \quad (7.E.4)$$



számok  $n$ -edrendű ciklikus csoportot alkotnak, ha csoportműveletnek a számok közönséges szorzását tekintjük. A ciklikus csoportok *valamennyien Abel-csoportok*. A

$$0, 1, 2, \dots, n-1 \quad (7.E.5)$$

számok „ugyanazt a csoportot” képezik, mint a (7.E.4) számok, ha csoportműveletnek most az *összeadást* tekintjük *modulo*  $n$ . (Például ha  $n=7$ , akkor  $5 \cdot 4=2$ , minthogy  $5+4=9=7+2=n+2$ .) A (7.E.5) csoport elemei egy-egyértelmű módon megfeleltethetők (7.E.4) elemeinek;  $\omega^k$ -nak  $k$ -t kell megfeleltetni. Ez a megfeleltetés olyan tulajdonságú, hogy „szorzatnak szorzatot feleltet meg”, vagyis  $k_1 \cdot k_2=k_3$  fennállása maga után vonja  $\omega^{k_1} \cdot \omega^{k_2}=\omega^{k_3}$  fennállását. Két ilyen csoportot izomorfoknak mondunk.<sup>5</sup>

Két csoport akkor *izomorf*, ha az egyik csoport  $A$  elemei s a másik csoport  $\bar{A}$  elemei között kölcsönösen egyértelmű megfeleltetés létesíthető oly módon, hogy  $AB=C$  fennállásából  $\bar{A}\bar{B}=\bar{C}$  fennállása következék, vagyis  $\bar{A}\bar{B}=\overline{AB}$ . Az izomorf csoportok lényegében azonosak; csupán az egyes elemek jelölése különböző.

4. Olyan csoport, amelynek a rendje 4, kettő létezik; azaz: kettejük közt izomorfizmus nem áll fenn. Az összes többi e két csoport valamelyikével izomorf. Az első csoport a ciklikus csoport, mondjuk  $1, i, -1, -i$ , csoportműveletnek a számok szorzását tekintve. A másik az ún. *négycsoport*. Ennek csoporttáblázata:

	$E$	$A$	$B$	$C$
$E$	$E$	$A$	$B$	$C$
$A$	$A$	$E$	$C$	$B$
$B$	$B$	$C$	$E$	$A$
$C$	$C$	$B$	$A$	$E$

Mindegyik csoportelemnek (az  $E$  egységelemet kivéve) a rendje 2. Ez is *Abel-csoport*.

5. A négycsoport az első példa a csoportok igen átfogó osztályára: a szimmetriacsoportokra. Tekintsünk egy  $n$  oldalú szabályos sokszöget az  $XY$  síkban. Legyenek az  $n$  csúcspont koordinátái  $x_k=r \cos 2\pi k/n, y_k=r \sin 2\pi k/n$  ( $k=0, 1, 2, 3, \dots$ ), és tekintsük mindazokat az

$$x'=\alpha x+\beta y, \quad y'=\gamma x+\delta y$$

<sup>5</sup> Az eddig levezetett tételek korántsem mind triviálisak. Ennek megmutatása céljából megemlítjük egy számelméleti következményüket. Ha  $n+1$  prímszám, akkor az  $1, 2, 3, \dots, n$  számok még egy másik módon is csoportot képeznek, ha csoportműveletnek a számok szorzását tekintjük modulo  $n+1$ . Ha mondjuk  $n+1=7$ , akkor  $3 \cdot 5=1$ , mivel  $3 \cdot 5=15=2 \cdot 7+1$ . Az egységelem ekkor 1. Minden egyes elem periodusa tört része  $n$ -nek, a csoport rendjének. Így tehát minden esetre fennáll  $A^n=1$ , ha  $A$  a csoport valamely eleme. Ez azonban egyenértékű azzal a megállapítással, hogy  $a^n \equiv 1 \pmod{n+1}$ , ha  $a$  az  $1, 2, 3, \dots, n$  számok valamelyike. Ez speciális esete FERMAT tételének, ami — el kell ismerni — kétségtelenül nem triviális.

lineáris transzformációkat, amelyek a szabályos  $n$ -szöget „önmagába” viszik át, azaz: amelyek mellett a csúcspontok új  $x'_\kappa, y'_\kappa$  koordinátái ugyancsak az

$$x'_\kappa = r \cos 2\pi\kappa/n, \quad y'_\kappa = r \sin 2\pi\kappa/n$$

( $\kappa=0, 1, 2, 3, \dots, n-1$ ) alakban írhatók fel. E lineáris transzformációk mátrixai *csoportot alkotnak*, minthogy bármely két transzformáció szorzata, a transzformációk bármelyikének reciproka, és az  $E$  azonosság mind teljesítik a csoportelemekre vonatkozó követelményeket.

Azok a transzformációk, amelyek az  $n$ -szöget önmagába viszik át, a következők: (A) A sík elforgatásai  $2\pi k/n$  szöggel ( $k=0, 1, 2, \dots, n-1$ ), a megfelelő mátrixok:

$$\begin{pmatrix} \cos \frac{2\pi k}{n} & \sin \frac{2\pi k}{n} \\ -\sin \frac{2\pi k}{n} & \cos \frac{2\pi k}{n} \end{pmatrix} = \mathbf{D}_k. \quad (7.E.6)$$

Ezek ciklikus csoportot alkotnak. (B) Tükrözés az  $x$  tengelyre és ezt követő elforgatás  $2\pi k/n$  szöggel. A megfelelő mátrixok:

$$\begin{pmatrix} \cos \frac{2\pi k}{n} & -\sin \frac{2\pi k}{n} \\ -\sin \frac{2\pi k}{n} & -\cos \frac{2\pi k}{n} \end{pmatrix} = \mathbf{U}_k. \quad (7.E.7)$$

E  $2n$  mátrix csoportot képez, melynek rendje  $2n$ . Ez a csoport a *diédercsoport* néven ismert. A (7.E.6) mátrixok alcsoportját képezik  $e$  csoportnak; a (7.E.7) mátrixok pedig egy mellékosztályt alkotnak, mely ehhez az alcsoporthoz tartozik. Az  $n=2$ -nek megfelelő négyescsoport a leg-egyszerűbb példa diédercsoportra; az  $n$ -szög ebben az esetben elfajul két csúcsponttá, egy egyenesdarabbá. A négyescsoport *Abel*-féle csoport, a többi diédercsoport azonban *már nem Abel-csoport*. A (7.E.1) csoport a szabályos háromszög diédercsoportja; ez az első *nem Abel-féle* csoport, az  $E, F, D$  elemek alkotják az alcsoportot;  $A, B$  és  $C$  a mellékosztályba tartoznak.

Azok a transzformációk, amelyek a szabályos testeket önmagukba viszik át, fontos és érdekes csoportok, és a szimmetriacsoport elnevezés alatt ismertek. Ezeket rendszerint ama szabályos testek segítségével jellemzik, amelyeket azok önmagukba visznek át. Eszerint van tetraédercsoport, oktaédercsoport, ikozaédercsoport stb. Ezek fontos szerepet játszanak a kristályfizikában.

6. A *permutációs csoportok* ugyancsak igen fontosak. Tekintsük az 1-től  $n$ -ig terjedő számokat:  $1, 2, 3, \dots, n$ . Ha ezt az  $n$  számot valamilyen más  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$  sorrendbe írjuk, ezeknek a számoknak egy permutációját kapjuk;  $n$  objektumnak  $n!$  permutációja van, melyek szokásos jelölése

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \dots & n \\ \alpha_1 & \alpha_2 & \alpha_3 & \dots & \alpha_n \end{pmatrix}.$$

A permutálandó objektumokat a felső sorba természetes sorrendben írjuk, a második sorba pedig abban a sorrendben, amelyet a permutáció eredményeképpen kapunk. Két permutáció,  $P_1$  és  $P_2$  szorzása oly módon történik, hogy azokat a

változásokat, amelyeket  $P_2$  a természetes sorrenden eredményezne, a  $P_1$ -nek megfelelő sorrendben hajtjuk végre. Eszerint ha

$$P_1 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} \quad \text{és} \quad P_2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix},$$

akkor

$$P_1 P_2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}.$$

Azaz mivel  $P_2$  az 1-et a 3-ba transzformálja, a 3 a  $P_1 P_2$  permutációban ott áll, ahol az 1 áll  $P_1$ -ben. Hasonlóképpen, minthogy  $P_2$  a 2-t az 1-be transzformálja, az 1 ott lép fel  $P_1 P_2$ -ben, ahol a 2 áll  $P_1$ -ben stb.

Ha  $P_1$  a  $k$ -t  $\alpha_k$ -ba,  $P_2$  pedig az  $\alpha_k$ -t  $\beta_k$ -ba, végül  $P_3$  a  $\beta_k$ -t  $\gamma_k$ -ba transzformálja, akkor  $P_1 P_2$  a  $k$ -t  $\beta_k$ -ba és  $P_2 P_3$  az  $\alpha_k$ -t  $\gamma_k$ -ba viszi át. Eszerint mind  $(P_1 P_2) \cdot P_3$ , mind pedig  $P_1 \cdot (P_2 P_3)$  a  $k$ -t  $\gamma_k$ -ba viszi át; ennél fogva a permutációk szorzása *asszociatív*.

Az  $n$  objektum mind az  $n!$  permutációja által alkotott halmaz csoport, melyben az egységelem az

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \dots & n \\ 1 & 2 & 3 & \dots & n \end{pmatrix}$$

azonosság. Ez a csoport az  $n$ -edfokú *szimmetrikus csoport*.<sup>6</sup> A harmadfokú szimmetrikus csoport rendje 6; az izomorf a (7.E.1) csoporttal, s így az  $n=3$ -nak megfelelő diéderscoppal is. A megfeleltetés ezek között a következő:

$$\begin{matrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \\ E & A & B & C & D & F \end{matrix}$$

A szimmetrikus csoportok a kvantummechanikában is fontos szerepet játszanak.

## KONJUGÁLT ELEMÉK ÉS OSZTÁLYOK

Az  $XAX^{-1}$  elemet *A konjugáltjának* mondjuk. Ha két elem,  $A$  és  $B$ , konjugáltja egy harmadik elemnek,  $C$ -nek, akkor egymásnak is konjugáltjai:  $A = X_1 C X_1^{-1}$  és  $B = Y_1 C Y_1^{-1}$  fennállásából következik, hogy  $X^{-1} A X = C$  és  $B = Y X^{-1} A X Y^{-1} = (Y X^{-1}) A (Y X^{-1})^{-1}$ . A csoportnak azok az elemei, amelyek egymás konjugáltjai, *osztályt* alkotnak. Valamely osztályt egyetlen  $A$  elemének megadása meghatároz; az egész osztályt oly módon kaphatjuk meg, hogy képezzük az

$$E A E^{-1} = A, \quad A_2 A A_2^{-1}, \quad A_3 A A_3^{-1}, \quad \dots, \quad A_h A A_h^{-1}$$

<sup>6</sup> Gyakran nevezik permutációcsoportnak is, de *sohasem* nevezik szimmetriacsoportnak.

sorozatot. E sorozat minden eleme konjugáltja  $A$ -nak és egymásnak; azonfelül minden olyan elem, amely konjugáltja  $A$ -nak (és így minden elem, mely a sorozat bármely elemének konjugáltja), fellép (általában többször) a sorozatban. Valamely csoport elemei ennél fogva osztályokba sorolhatók, és mindegyik elem fellép egy és csakis egy osztályban.

A csoport egységeleme egymagában képez egy osztályt, minthogy nem konjugáltja egyetlen más elemnek sem. Minden  $X$  elemre fennáll:  $XEX^{-1}=E$ . Azt az osztályt kivéve, amely csak az  $E$  egységelemből áll, egyik osztály sem alcsoport, mivel egyik sem tartalmazhatja  $E$ -t. Az *Abel*-féle csoportokban minden osztály pontosan egy elemből áll, mivel  $XAX^{-1}=A$  minden  $X$ -re.

Valamely osztályban minden elemnek ugyanakkora a rendje. Ha  $A^n=E$ , akkor  $(XAX^{-1})^n$  ugyancsak egyenlő  $E$ -vel, amint azt közvetlenül be lehet látni:

$$(XAX^{-1})^n = (XAX^{-1}) \cdot (XAX^{-1}) \cdot \dots \cdot (XAX^{-1}) = XA^nX^{-1} = XEX^{-1} = E.$$

Lineáris csoportok (mátrixcsoportok) esetében az egy osztályba tartozó mátrixok átlósösszege egyenlő. Ennek igazolása céljából tekintsük az  $\alpha$ ,  $\beta$  mátrixokat, melyek tartozzanak ugyanabba az osztályba. Ekkor létezik a csoportnak olyan eleme, mondjuk a  $\gamma$  mátrix, amelyre fennáll

$$\beta = \gamma\alpha\gamma^{-1}.$$

Következésképpen  $\text{Sp } \beta = \text{Sp } \gamma\alpha\gamma^{-1} = \text{Sp } \alpha$ .

Példaképpen képezzük  $C$  osztályát a (7.E.1) csoportban. Ez az

$$ECE^{-1}=C, \quad ACA^{-1}=B, \quad BCB^{-1}=A, \quad CCC^{-1}=C, \quad DCD^{-1}=A, \quad FCF^{-1}=B$$

elemekből áll. A  $C$  elem osztálya eszerint az  $A$ ,  $B$ ,  $C$  elemekből áll; ugyanez az osztálya  $A$ -nak vagy  $B$ -nek is. Mind  $A$ -nak, mind  $B$ -nek, mind  $C$ -nek 2 a rendje, és az átlósösszeg értéke a csoport (7.E.1) mátrixelőállításában 0 mind a három elem esetében. A  $D$  elem osztálya

$$EDE^{-1}=D, \quad ADA^{-1}=F, \quad BDB^{-1}=F, \quad CDC^{-1}=F, \quad DDD^{-1}=D, \quad FDF^{-1}=D;$$

Eszerint  $D$ -nek (vagy  $F$ -nek) az osztálya a  $D$ ,  $F$  elemekből áll.

## 8. INVARIÁNS ALCSOPORTOK

Az olyan alcsoportot, mely az eredeti csoportnak csupa egész osztályaiból áll, *invariáns alcsoportnak* nevezzük. Legyen  $\mathcal{Q} = E, N_2, \dots, N_n$  invariáns alcsoport. Csoport lévén,  $N_i$ -vel és  $N_j$ -vel együtt tartalmaznia kell azok  $N_i N_j$  szorzatát is. Tartalmazza azonfelül  $X N_i X^{-1}$ -et is, ahol  $X$  a teljes csoport tetszőleges eleme, mint-hogy egy invariáns alcsoport tartalmazza a szóban forgó osztály minden  $X N_i X^{-1}$  elemét, hacsak eme osztály egy  $N_i$  elemét tartalmazza. Egy közös alcsoportnak csak akkor kellene az  $X N_i X^{-1}$  elemet szükségszerűen tartalmaznia, ha  $N_i$  mellett az  $X$  elemet is tartalmazza.

Valamely közös alcsoportban, mint minden csoportban, az

$$N_j E = N_j, N_j N_2, \dots, N_j N_n \quad (8.E.1)$$

elemek megegyeznek az alcsoport elemeivel, eltekintve a sorrendtől. Ugyanez igaz az

$$E N_j^{-1} = N_j^{-1}, \quad N_2 N_j^{-1}, \quad \dots, \quad N_n N_j^{-1} \quad (8.E.2)$$

sorozatra, továbbá az

$$N_j E N_j^{-1} = E, \quad N_j N_2 N_j^{-1}, \dots, N_j N_n N_j^{-1} \quad (8.E.3)$$

sorozatra is, amely (8.E.2)-ből oly módon képezhető, hogy az egyes tagokban az első tényező helyére a (8.E.1) sorozat elemeit helyettesítjük; ez csak a tagok sorrendjét változtatja meg. Itt valamennyi  $N_i$  eleme az alcsoportnak.

Másrésztől, ha az  $E, N_2, \dots, N_n$  elemek invariáns alcsoportot alkotnak, az

$$X E X^{-1} = E, X N_2 X^{-1}, \dots, X N_n X^{-1} \quad (8.E.4)$$

sorozat, ahol  $X$  az egész csoport tetszőleges eleme, megegyezik az invariáns alcsoport elemeivel, eltekintve a sorrendtől. A (8.E.4) elemek mindegyike fellép az invariáns alcsoportban, mivel azok konjugáltjai az alcsoport elemeinek; amint most megmutatjuk, (8.E.4) alatt az invariáns alcsoport minden eleme fellép. Ahhoz, hogy az adott  $N_k$  elemet megtaláljuk (8.E.4) alatt, csupán az  $X^{-1} N_k X$  elemet kell megszerkesztenünk. Ennek az elemnek ott kell lennie az  $E, N_2, \dots, N_n$  elemek között. Legyen ez  $N_j$ . Ekkor  $N_k = X N_j X^{-1}$ , és  $N_k$  (8.E.4) alatt az  $i$ -edik helyen lép fel.

Az *Abel*-csoportok minden alcsoportja invariáns alcsoport. Minden elem önmagában osztályt képez; ennél fogva minden alcsoportnak csupa egész osztályból kell állnia. A szimmetrikus csoportoknak egy és általában csak egy invariáns alcsoportjuk van, mely az összes páros permutációból áll. A páros permutációk alcsoportot alkotnak, minthogy két páros permutáció szorzata páros permutáció. Azonfelül a páros permutációkhoz konjugált elemek szükségszerűen páros permutációk, ennél fogva ugyancsak fellépnek az alcsoportban (lásd még a 13. fejezetet).

A (7.E.1) példában  $E, D, F$  képezik az invariáns alcsoportot. Javasoljuk, hogy az olvasó az alább következő tételek helyességéről győződjék meg e csoport speciális esetében.

Az invariáns alcsoportok meghatározása igen fontos a csoportok szerkezetének tanulmányozása szempontjából. Az olyan csoportokat, amelyeknek nincs invariáns alcsoportjuk, *egyszerű* csoportoknak mondjuk.

## A FAKTORCSOPORT

Tekintsük most az  $\mathcal{Q}$  invariáns alcsoport mellékosztályait. Az  $EU=U, N_2U, \dots, N_nU$  elemek  $\mathcal{Q}$  jobb oldali mellékosztályát alkotják. Ugyanezek az elemek egyszersmind bal oldali mellékosztályt is képeznek, mivel  $U=UU^{-1}EU, N_2U=UU^{-1}N_2U, \dots, N_nU=UU^{-1}N_nU$ , eltekintve a sorrendtől, megegyeznek az  $U=UE, UN_2, \dots, UN_n$  elemekkel. Vagyis az  $\mathcal{Q}U$  komplexus azonos az  $U\mathcal{Q}$  komplexussal. Ennél fogva invariáns alcsoportok esetében beszélhetünk egyszerűen mellékosztályokról, anélkül, hogy meghatároznánk, hogy bal vagy jobb oldali mellékosztályokról van-e szó.<sup>1</sup>

Szorozzuk meg az  $\mathcal{Q}U$  mellékosztály valamennyi elemét egy másik  $\mathcal{Q}V$  mellékosztály mindegyik elemével! Ekkor  $N_jUN_jV=N_jUN_jU^{-1}UV=N_kUV$ , mivel mind  $N_j$ , mind  $UN_jU^{-1}$ , s ennél fogva szorzatuk,  $N_k$  is benne van  $\mathcal{Q}$ -ben. A szorzás tehát egyetlen mellékosztály,  $\mathcal{Q}UV$  elemeit adja eredményül.

Ha valamely invariáns alcsoport mellékosztályait újfajta objektumoknak tekintjük, és értelmezzük a mellékosztályok szorzását úgy, hogy két mellékosztály szorzatának azt a mellékosztályt tekintjük, amelynek elemeit a két mellékosztály elemeinek összeszorzásával kapjuk, akkor maguk a *mellékosztályok csoportot alkotnak*. Ezt a csoportot az invariáns alcsoport *faktorcsoportjának* nevezzük. A faktorcsoport egységeleme maga az invariáns alcsoport. Az  $\mathcal{Q}U$  mellékosztály minden egyes  $N_jU$  eleme, ha azt (jobbról vagy balról)  $\mathcal{Q}$  valamely  $N_l$  elemével szorozzuk

<sup>1</sup> Ez másképpen is belátható. Annak feltétele, hogy  $U$  és  $V$  ugyanazon jobb oldali mellékosztályba tartozzék (lásd 69. o.), az, hogy  $UV^{-1}$  eleme legyen  $\mathcal{Q}$ -nek. Annak feltétele, hogy  $U, V$  ugyanazon bal oldali mellékosztályba tartozzék, az, hogy  $V^{-1}U$  legyen eleme  $\mathcal{Q}$ -nek. Ha azonban  $\mathcal{Q}$  invariáns alcsoport és tartalmazza  $UV^{-1}$ -et, akkor tartalmaznia kell  $V^{-1} \cdot UV^{-1} \cdot V = V^{-1}U$ -t is. Ennél fogva a két elem ugyanabban a bal oldali mellékosztályban van, hacsak ugyanazon jobb oldali mellékosztálynak az elemei, és megfordítva.

meg, újból  $\mathcal{R}U$  valamely  $N_k U$  elemét adja. Részletesen kiírva,  $N_i \cdot N_j U = N_i N_j \cdot U = N_k U$ , és  $N_j \cdot U N_i = N_j \cdot U N_i U^{-1} U = N_k U$ . Továbbá minden  $\mathcal{R}U$  mellékosztálynak van reciproka, az  $\mathcal{R}U^{-1}$  mellékosztály. Vagyis

$$N_j U \cdot N_i U^{-1} = N_j \cdot U N_i U^{-1} = N_k,$$

ami magának az invariáns alcsoporthoz eleme. Az  $\mathcal{R}U$ ,  $\mathcal{R}U^{-1}$  mellékosztályok szorzata ennél fogva  $\mathcal{R}$ -et adja, a faktorcsoporthoz egységelemét.

Az  $\mathcal{R}$  invariáns alcsoporthoz faktorcsoporthozának rendje egyenlő  $\mathcal{R}$  mellékosztályainak számával, azaz  $\mathcal{R}$  indexével. A faktorcsoporthozot nem szabad összetéveszteni az alcsoporthoztal; az alcsoporthoz elemei csoportelemek, ugyanakkor *a faktorcsoporthoz elemei mellékosztályok*.

A fent levezetett tételek egyszerűbben megkaphatók ama szimbolikus módszer segítségével, amely az elemek bizonyos összességének, komplexusának jelölésére egyetlen betűt használ. A  $\mathcal{E}$  komplexusnak az  $A$  elemmel képezett szorzata maga is egy komplexus,  $\mathcal{E}A$ , amelynek elemeit oly módon kapjuk, hogy  $\mathcal{E}$  valamennyi elemét jobbról megszorozzuk  $A$ -val. (Balról szorozva  $A\mathcal{E}$ -t kapjuk.) A  $\mathcal{E}$ ,  $\mathcal{D}$  komplexusok szorzata a  $\mathcal{E}\mathcal{D}$  komplexus, melynek elemeit úgy kapjuk, hogy  $\mathcal{E}$  összes elemét jobb oldalról megszorozzuk  $\mathcal{D}$  elemeivel. Könnyen látható, hogy az *asszociatív törvény* teljesül a szorzás ezen fajtájára.

Ha  $\mathcal{E}$  és  $\mathcal{D}$  elemeinek száma  $n$ , ill.  $n'$ , akkor  $\mathcal{E}\mathcal{D}$  legfeljebb  $nn'$  elemet tartalmaz. A különböző elemek száma azonban rendszerint kevesebb ennél, mivel az elemek némelyike többször felléphet az  $nn'$  szorzat között.

Annak feltétele, hogy  $\mathcal{E}$  alcsoporthoz legyen,  $\mathcal{E} \cdot \mathcal{E} = \mathcal{E}^2 = \mathcal{E}$ . Eme alcsoporthoz *invariáns* alcsoporthoz, ha mindegyik  $U$  csoportelemre teljesül az  $U^{-1}\mathcal{E}U = \mathcal{E}$  egyenlőség. A  $\mathcal{E}$  alcsoporthoz jobb oldali mellékosztályai a különböző  $\mathcal{E}U$  komplexusok. Ha  $\mathcal{E}$  invariáns alcsoporthoz, akkor  $U^{-1}\mathcal{E}U = \mathcal{E}$ , így  $\mathcal{E}U = U\mathcal{E}$ ; a jobb oldali mellékosztályok egyszersmind bal oldali mellékosztályok. A faktorcsoporthoz elemei a különböző  $\mathcal{E}U$  komplexusok. A  $\mathcal{E}U$  és  $\mathcal{E}V$  komplexusok szorzata (a faktorcsoporthoz elemeire értelmezett szorzás értelmében) ugyanaz, mint a komplexus-szorzásnak megfelelő értelemben képezett szorzat:

$$\mathcal{E}U \cdot \mathcal{E}V = \mathcal{E} \cdot U\mathcal{E} \cdot V = \mathcal{E} \cdot \mathcal{E}U \cdot V = \mathcal{E}^2 UV = \mathcal{E}UV.$$

## IZOMORFIZMUS ÉS HOMOMORFIZMUS

Az előző fejezetben megismertedtünk két csoport *izomorfizmusának* fogalmával. Két csoport izomorf, ha elemeik között *kölcsönösen egyértelmű* megfelelés áll fenn, oly módon, hogy szorzatoknak szorzatok felelnek meg. Az egyik csoport  $A$ ,  $B$  elemeinek megfeleltetjük az izomorf csoport  $\bar{A}$ , ill.  $\bar{B}$  elemét; az  $AB$  szorzatnak az  $\bar{A} \cdot \bar{B} = \bar{A}\bar{B}$  szorzat felel meg. Izomorf csoportok rendje nyilvánvalóan megegyezik.

Kevésbé éles megfelelés két csoport között az egyszerű *homomorfizmus*, mely hasonló az izomorfizmushoz, csak most nem követeljük meg, hogy a megfeleltetés kölcsönösen egyértelmű legyen. A  $\mathcal{G}$  csoport homomorf valamely másik  $\mathcal{H}$  csoporttal, ha  $\mathcal{H}$  minden egyes elemének a  $\mathcal{G}$  csoportnak egy és csak egy eleme felel meg, továbbá ha  $\mathcal{H}$  mindegyik elemének megfelel  $\mathcal{G}$ -nek legalább egy eleme, és ha a megfeleltetés olyan, hogy a  $\mathcal{G}$ -beli  $A$  és  $B$  szorzata megfelel a  $\mathcal{H}$  csoport megfelelő  $\bar{A}$ ,  $\bar{B}$  elemei  $\bar{A} \cdot \bar{B} = \overline{AB}$  szorzatának.<sup>2</sup> Homomorfizmus esetében a  $\mathcal{H}$  csoport valamely  $\bar{A}$  eleme  $\mathcal{G}$  több különböző elemének, mondjuk  $A$ -nak és  $A'$ -nek felelhet meg. Ennek megfelelően a homomorfizmus nem kölcsönös tulajdonság. Ha  $\mathcal{G}$  homomorf  $\mathcal{H}$ -val, akkor  $\mathcal{H}$  nem szükségszerűen homomorf  $\mathcal{G}$ -vel. A  $\mathcal{G}$  csoport elemeinek száma feltétlenül *nagyobb vagy egyenlő*  $\mathcal{H}$  elemeinek számával; ha a csoportelemek száma egyenlő, a homomorfizmus izomorfizmussá válik, amely már kölcsönös.

A  $\mathcal{G}$  csoport  $E$  egységeleme megfelel  $\mathcal{H}$  egységelemének,  $\bar{E}$ -nak, minthogy  $E \cdot E = E$  maga után vonja  $\bar{E} \cdot \bar{E} = \bar{E}$  fennállását, és ez csak a csoport egységelemére igaz. Hasonlóképpen,  $\mathcal{G}$  inverz elemei a  $\mathcal{H}$  csoport inverz elemeinek felelnek meg.

Tekintsük a  $\mathcal{G}$  csoport mindazon  $E, E_2, \dots, E_n$  elemeit, amelyek a  $\mathcal{H}$  csoport  $\bar{E}$  egységelemének felelnek meg, és jelöljük ezt a komplexust  $\mathcal{C}$ -vel. Minthogy  $E_k \cdot E_l$  az  $\bar{E} \cdot \bar{E} = \bar{E}$  elemnek felel meg, a  $\mathcal{C}$  komplexus tartalmazza  $E_k \cdot E_l$ -et is, úgyhogy  $\mathcal{C}$  csoport. Azonfelül az  $E_k$  elemhez konjugált minden  $U^{-1}E_kU$  elem  $\bar{E}$ -nek felel meg, mivel  $U^{-1} \cdot \bar{E} \cdot U = \overline{U^{-1}EU} = \bar{E}$ ; a  $\mathcal{C}$  csoport ennél fogva *invariáns alcsoportja*  $\mathcal{G}$ -nek. Hasonlóképpen ama  $\mathcal{A}$  komplexus elemei, amelyeknek a  $\mathcal{H}$  csoport egy és ugyanazon  $\bar{A}$  eleme felel meg,  $\mathcal{C}$ -nek egy mellékosztályát képezik. Legyenek  $A_j, A_l$  az  $\mathcal{A}$  komplexus elemei; ekkor  $\bar{A}_j = \bar{A}_l = \bar{A}$ . Az  $A_j A_l^{-1}$  elemek mindegyikének az  $\bar{A}_j \bar{A}_l^{-1} = \bar{A}_j \bar{A}_l^{-1} = \bar{A} \bar{A}^{-1} = \bar{E}$  elem felel meg; azaz  $A_j A_l^{-1}$  benne van  $\mathcal{C}$ -ben, ami annak a feltétele, hogy  $A_j$  és  $A_l$  a  $\mathcal{C}$  invariáns alcsoport egyazon mellékosztályának eleme legyen. A  $\mathcal{C}$  invariáns alcsoport mellékosztályai egy-egyértelmű megfeleltetésben állnak  $\mathcal{H}$  elemeivel; ennél fogva két mellékosztály,  $\mathcal{C}U$  és  $\mathcal{C}V$  szorzata az  $\bar{U}, \bar{V}$  elemek  $\bar{U}\bar{V} = \overline{UV}$  szorzatának felel meg. Minthogy a mellékosztályok a  $\mathcal{C}$  faktorcsoportjának elemei, ez a *faktorcsoport izomorf  $\mathcal{H}$ -val*.

Ha  $\mathcal{G}$  homomorf  $\mathcal{H}$ -val, akkor  $\mathcal{G}$ -nek egy faktorcsoportja izomorf  $\mathcal{H}$ -val. A  $\mathcal{G}$  csoport rendje egész számú többszöröse  $\mathcal{H}$  rendjének. Ha a homomorfizmus valójában izomorfizmus, akkor a szóban forgó  $\mathcal{C}$  invariáns alcsoport magává az  $E$  egységelemmé fajul el.

<sup>2</sup> A megfelelésre, melyet itt úgy jellemezünk, hogy  $\mathcal{G}$  homomorf  $\mathcal{H}$ -val, sok német szerző azt a kifejezőmódot alkalmazza, hogy  $\mathcal{H}$  homomorf  $\mathcal{G}$ -vel. Egyes szerzők a homomorfizmus és izomorfizmus kifejezéseket szinonimaként használják.



A csoportelemeket alkalmas módon újra indexelve,  $\mathcal{G}$  és  $\mathcal{H}$  elemei között a következő megfeleltetés létesíthető:

$$\underbrace{E, G_2, \dots, G_n}_{\bar{E}} \quad \underbrace{G_{n+1}, G_{n+2}, \dots, G_{2n}}_{H_2} \quad \dots \quad \underbrace{G_{(h-1)n+1}, \dots, G_{hn}}_{H_h}$$

Látjuk, hogy  $\mathcal{G}$  minden egyes elemének a  $\mathcal{H}$  csoport egyetlen eleme felel meg. Megfordítva,  $\mathcal{H}$  egyes elemeinek  $\mathcal{G}$  több eleme felel meg; ez a megfelelés azonban nem egy-egyértelmű, hanem  $n$ -egyértelmű, minthogy  $\mathcal{H}$  minden elemének  $\mathcal{G}$ -nek pontosan  $n$  eleme felel meg. Az  $E, G_2, \dots, G_n$  elemek képezik a  $\mathcal{G}$  invariáns alcsoportot (korábban ezekre az elemekre az  $E, E_2, E_3, \dots, E_n$  jelölést használtuk); a többi komplexus, amelyeket egy-egy kapcsos zárójel kapcsol össze, eme alcsoportnak a mellékosztályai, melyek mindegyike  $\mathcal{H}$  egy-egy elemének felel meg.

Ha a  $\mathcal{G}$  csoport egy  $H_i$ -nek megfelelő elemét összeszorozzuk egy  $H_j$ -nek megfelelő elemmel, olyan csoportelemet kapunk, mely  $H_i \cdot H_j$ -nek felel meg. Ha mind az  $n$  elemet, mely  $H_i$ -nek felel meg, összeszorozzuk mindama  $n$  elemmel, amely  $H_j$ -nek felel meg, azt az  $n$  elemet kapjuk meg, amely  $H_i \cdot H_j$ -nek felel meg, mindegyiket  $n$ -szer. A  $\mathcal{H}$  csoport lényegében azonos az  $E, G_2, \dots, G_n$  invariáns alcsoport faktorcsoportjával;  $\mathcal{H}$  izomorf ezzel a faktorcsoporttal.

Nyilvánvaló, hogy minden csoport izomorf önmagával. Azonkívül minden csoport homomorf azzal a csoporttal, amely csupán az  $\bar{E}$  egységelemből áll. Az  $A$  elemnek az  $\bar{E}$  egységelem felel meg, a  $B$  elemnek ugyancsak az  $\bar{E}$  egységelem felel meg. Ennélfogva az  $AB$  szorzatnak is az  $\bar{E}\bar{E} = \bar{E}$  egységelem felel meg. Ebben az esetben az invariáns alcsoport felöleli az egész csoportot.

Minden lineáris csoport homomorf bizonyos *Abel*-csoporttal. A homomorfizmus oly módon létesíthető, hogy a lineáris transzformációnak (mátrixnak) determinánsa értékét feleltetjük meg. (Mit ad ez a megfeleltetés az előző fejezet (7.E.1) példája esetében?)

Ezzel zárjuk a véges csoportok absztrakt elméletét; a következőkben ábrázolásaik elméletére térünk rá. Később tárgyalni fogjuk a folytonos csoportokat. Tárgyalásunk az absztrakt csoportok elméletének elemeire korlátozódott, melynek okfejtése csodálatosan egyszerű. Részletes tárgyalás található *A. SPEISER* könyvében (*Die Theorie der Gruppen von endlicher Ordnung*) vagy *WEBER* *Algebrá-jában*. Itt nem tárgyaljuk tovább ezt a témát; csak azokkal a részekkel foglalkoztunk, amelyek a következők szempontjából lényegesek, és amelyek ahhoz szükségesek, hogy a csoportelmélet alkalmazásában biztonságérzetre tegyünk szert.<sup>3</sup>

<sup>3</sup> Egy újabb angol nyelvű monográfia: H. ZASSENHAUS: *Theory of Groups*, Chelsea Publ., New York, 1958.

## 9. AZ ÁBRÁZOLÁSOK ÁLTALÁNOS ELMÉLETE

Valamely csoport ábrázolása<sup>1</sup> egy mátrixcsoport,<sup>2</sup> mellyel az ábrázolandó csoport homomorf. Minden egyes  $A$  csoportelemhez hozzárendelünk egy  $\mathbf{D}(A)$  vagy egyszerűbben  $A$  mátrixot oly módon, hogy

$$\mathbf{D}(A)\mathbf{D}(B) = \mathbf{D}(AB) \quad (9.1)$$

minden  $\mathbf{D}$  mátrixra teljesüljön. Ha a különböző csoportelemekhez rendelt mátrixok mind különbözők, a mátrixcsoport izomorf a csoporttal, amelyet ábrázol, és az ábrázolást hűnek mondjuk. Másrésztől ha ugyanazon mátrixnak több csoportelem felel meg, akkor azok a csoportelemek, amelyek ugyanannak a mátrixnak felelnek meg, mint az egységelem, invariáns alcsoporthot képeznek (amint azt az előző fejezetben megmutattuk). Az ábrázolás ekkor eme invariáns alcsoporth faktorcsoporthjának hű ábrázolása, mint az egész csoport ábrázolása azonban nem hű.

Megfordítva, egy faktorcsoporth minden ábrázolásából megszerkeszthetjük az egész csoport egy nem hű ábrázolását. A faktorcsoporth elemei egy invariáns alcsoporth mellékosztályai. Ha a csoport adott mellékosztályába tartozó minden elemhez ugyanazt a mátrixot rendeljük hozzá, mely ezt a mellékosztályt mint a faktorcsoporth elemét ábrázolta, az egész csoport egy nem hű ábrázolását kapjuk.

Nyilvánvaló, hogy minden mátrixcsoport hű ábrázolása önmagának. Az is nyilvánvaló, hogy hozzárendelhetjük minden csoportelemhez az  $(1)$  mátrixot; így módon tetszőleges csoport triviális homomorf leképezését kapjuk ama csoportra, amely egyedül az egységelemet tartalmazza. A (7.E.1) példa három objektum szimmetrikus csoportjának hű ábrázolását adja. Ugyanezen csoport másik — nem hű — ábrázolását kapjuk, ha az egyes csoportelemeknek az alájuk írt mátrixot feleltetjük meg:

$$\begin{array}{cccccc} E & A & B & C & D & F \\ (1) & (-1) & (-1) & (-1) & (1) & (1) \end{array} \quad (9.E.1)$$

<sup>1</sup> Precízebben mondva: „ábrázolása lineáris szubsztitúciók által”.

<sup>2</sup> „Mátrixcsoport”-on itt olyan csoportot értünk, mely négyzetes mátrixokból áll, azaz olyan mátrixokból, melyek sorainak és oszlopainak ugyanolyan az indexelése; az indexelés azonfelül közös az adott ábrázolás valamennyi mátrixára. Ezeket a szabályokat minden ábrázolási mátrix esetében tekintetbe fogjuk venni.

Ez az  $E, D, F$  invariáns alcsoport faktorcsoportjának hű ábrázolása. E faktorcsoporthoz két eleme van: az  $E, D, F$  invariáns alcsoport és annak  $A, B, C$  mellékosztálya. A faktorcsoporthoz első elemének az (1) mátrix felel meg, második elemének pedig a  $(-1)$  mátrix.

Az ábrázolási mátrixok sorainak és oszlopainak számát az ábrázolás *dimenziójának* nevezzük. Valamely adott ábrázolásból új ábrázolásokat képezhetünk, ha a csoport összes mátrixára ugyanazt a hasonlósági transzformációt alkalmazzuk. Minthogy a hasonlósági transzformáció nem érinti a mátrix szorzási tulajdonságait, az ábrázolás természete egészében változatlan marad eközben. Két ábrázolást, melyek így módon állnak elő egymásból, vagy másképpen szólva, amelyek egymásba transzformálhatók, *ekvivalensnek* mondunk. Az ekvivalens ábrázolásokat lényegében megegyezőnek tekintjük.

Két ábrázolásból többféleképpen képezhetünk egyetlen új ábrázolást. Talán a legegyszerűbb mód az, amikor a két ábrázolást egyszerűen egymás mellé helyezve egyesítjük. Valamely  $\mathbf{D}(A_1), \mathbf{D}(A_2), \dots, \mathbf{D}(A_h)$  ábrázolásból, valamint egy másik,  $\mathbf{D}'(A_1), \mathbf{D}'(A_2), \dots, \mathbf{D}'(A_h)$  ábrázolásból így módon a

$$\begin{pmatrix} \mathbf{D}(A_1) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D}'(A_1) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \mathbf{D}(A_2) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D}'(A_2) \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} \mathbf{D}(A_h) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D}'(A_h) \end{pmatrix} \quad (9.E.2)$$

szupermátrixokból álló új ábrázolást kapjuk. Ha erre az ábrázolásra hasonlósági transzformációt alkalmazunk, ez elfedheti azt a tényt, hogy ezt az ábrázolást eredetileg két ábrázolásból képeztük. Az olyan ábrázolást, amely egy (9.E.2) alakú ábrázolásból ilyen hasonlósági transzformációval áll elő, *reducibilisnek* mondjuk. Nyilvánvaló, hogy a reducibilis ábrázolások hasonlósági transzformációval mindig a (9.E.2) alakra hozhatók; azaz: a reducibilis ábrázolások (9.E.2) alakú ábrázolásokkal ekvivalensek. Az olyan ábrázolásokat, amelyek nem hozhatók ilyen alakra, *irreducibilisnek* mondjuk.

Ha egy ábrázolás a (9.E.2) alakra hozható pusztán azáltal, hogy összes mátrixának sorait és oszlopait egyidejűleg újraszámozzuk, akkor természetesen reducibilis. Valóban, az ilyen újraszámozás elvégezhető alkalmas hasonlósági transzformáció segítségével. Abból a célból, hogy a  $j$ -edik sort és oszlopot a  $j$ -edik sorba, ill. oszlopba vigyük át, a hasonlósági transzformáció  $S$  mátrixának elemei legyenek  $S_{ki} = \delta_{k\bar{i}}$ ; ekkor  $(S^{-1})_{jm} = \delta_{\bar{j}m}$ , és

$$\sum_i S_{ki} (S^{-1})_{ij} = \sum_i \delta_{k\bar{i}} \delta_{ij} = \delta_{kj},$$

az  $S$  segítségével elvégzett hasonlósági transzformáció ténylegesen a kívánt újraszámozást eredményezi:

$$\bar{A} = S^{-1}AS, \quad \bar{A}_{ji} = \sum_{mk} \delta_{\bar{j}m} A_{mk} \delta_{k\bar{i}} = A_{j\bar{i}}.$$

Osszuk be valamely adott mátrixrendszer sorait és oszlopait két csoportba, mondjuk a „vesszősek”-ébe és a „vesszőtlenek”-ébe. Minden olyan mátrixrendszer, amelyre nézve ez a felosztás elvégezhető oly módon, hogy a „vesszős” sorok és a „vesszőtlen” oszlopok metszéspontjaiban álló elemek valamennyien zérusok, vagy reducibilis, vagy pedig már kiredukált alakban áll előttünk. Ennek igazolására elegendő megjegyezni, hogy pl. a „vesszős” sorok és oszlopok átvihetők a mátrixok felső és bal oldali részébe; így módon az ábrázolás számára a (9.E.2) alakot kapjuk.

A következőkben olyan ábrázolási mátrixokkal lesz dolgunk, amelyeknek determinánsa zérustól különböző. Ekkor a  $\mathbf{D}(A)$  mátrixok mindegyikének van inverze. Mivel tetszőleges  $A$  csoportelemnek az  $E$  egységelemmel képezett szorzata az  $A$ -t adja, tetszőleges  $\mathbf{D}(A)$  ábrázolási mátrixnak a  $\mathbf{D}(E)$  egységelemhez rendelt mátrixszal való szorzása eredményül  $\mathbf{D}(A)$ -t ad. Ebből következik, hogy

$$\mathbf{D}(A) \mathbf{D}(E) = \mathbf{D}(A), \quad \mathbf{D}(E) = (\mathbf{1}). \quad (9.2)$$

$A$  csoport egységelemének az egységmátrix felel meg. Az inverz csoportelemeknek megfelelő  $\mathbf{D}(A)$ ,  $\mathbf{D}(A^{-1})$  mátrixok szorzata  $\mathbf{D}(E) = 1$ . Ennélfogva

$$\mathbf{D}(A) \mathbf{D}(A^{-1}) = \mathbf{D}(E) = 1, \quad \mathbf{D}(A^{-1}) = [\mathbf{D}(A)]^{-1}; \quad (9.3)$$

unitér mátrixokkal létesített ábrázolás esetében innen

$$\mathbf{D}(A^{-1}) = \mathbf{D}(A)^\dagger \quad (9.3a)$$

következik.

*1. tétel. Bármely ábrázolás, melyet olyan mátrixok létesítenek, amelyeknek a determinánsa nem tűnik el, hasonlósági transzformációval unitér mátrixok által létesített ábrázolásba transzformálható.*

Legyen a csoport rendje  $h$ ; az ábrázolás mátrixai legyenek  $A_1, A_2, \dots, A_h$ . (Ha az ábrázolás nem hű, az  $A_1, A_2, \dots, A_h$  mátrixok nem mind különbözőek.) Képezzük most a  $H$  hermitikus mátrixot, valamennyi csoportelemre összegezve:

$$H = \sum_{\alpha} A_{\alpha} A_{\alpha}^\dagger. \quad (9.4)$$

A bizonyítást oly módon végezzük el, hogy  $H$ -t átlós alakra hozzuk és meghatározzuk a reciproknégyzetgyökét. Megmutatjuk, hogy ha az  $A_{\alpha}$  mátrixokat egymást követően hasonlósági transzformációnak vetjük alá a  $H$ -t diagonalizáló  $U$  mátrix, valamint az átlós alakra hozott  $H$  négyzetgyökeként kapott  $d^{1/2}$  mátrix segítségével, olyan  $\bar{A}_{\alpha}$  ábrázolást kapunk, amely már unitér.

A  $H$  hermitikus mátrix valamely  $U$  unitér mátrix segítségével a  $d$  átlós alakra hozható:

$$\begin{aligned} d &= U^{-1} H U = \sum_{\alpha} U^{-1} A_{\alpha} A_{\alpha}^\dagger U = \\ &= \sum_{\alpha} U^{-1} A_{\alpha} U (U^{-1} A_{\alpha} U)^\dagger = \sum_{\alpha} \bar{A}_{\alpha} \bar{A}_{\alpha}^\dagger. \end{aligned} \quad (9.5)$$

A  $\mathbf{d}$  mátrix átlós elemei valamennyien valósak és pozitívak, minthogy pl.

$$d_{kk} = \sum_{\kappa} \sum_j (\bar{\mathbf{A}}_{\kappa})_{kj} (\bar{\mathbf{A}}_{\kappa})_{kj}^* = \sum_{\kappa} \sum_j |(\bar{\mathbf{A}}_{\kappa})_{kj}|^2$$

csak akkor lehet zérus, ha  $k$  eme értéke mellett az  $(\bar{\mathbf{A}}_{\kappa})_{kj}$  ábrázolási mátrixelemek minden  $j$ -re (és  $\kappa$ -ra) zérusok volnának. Ekkor azonban az  $\bar{\mathbf{A}}_{\kappa}$  mátrixnak egy sora teljes egészében zérus lenne. Ebből következne, hogy  $\bar{\mathbf{A}}_{\kappa}$  determinánsa, és így  $\mathbf{A}_{\kappa}$ -é is, eltűnik, ellentmondásban a feltevessel. Ennélfogva  $\mathbf{d}^{1/2}$  és  $\mathbf{d}^{-1/2}$  egyértelműen képezhető  $\mathbf{d}$ -ből, az átlós elemek (pozitív) négyzetgyökeit, ill  $-1/2$ -ik hatványait véve;  $\mathbf{d}^{1/2}$  és  $\mathbf{d}^{-1/2}$  valós átlós mátrixok:  $\mathbf{d}^{1/2\dagger} = \mathbf{d}^{1/2}$ ,  $\mathbf{d}^{-1/2\dagger} = \mathbf{d}^{-1/2}$ .

Most megmutatjuk, hogy az

$$\bar{\mathbf{A}}_{\lambda} = \mathbf{d}^{-1/2} \bar{\mathbf{A}}_{\lambda} \mathbf{d}^{1/2} = \mathbf{d}^{-1/2} \mathbf{U}^{-1} \mathbf{A}_{\lambda} \mathbf{U} \mathbf{d}^{1/2}$$

ábrázolás unitér. A (9.5) egyenletből kapjuk:

$$\mathbf{1} = \mathbf{d}^{-1/2} \sum_{\kappa} \bar{\mathbf{A}}_{\kappa} \bar{\mathbf{A}}_{\kappa}^{\dagger} \mathbf{d}^{-1/2}.$$

Az egységmátrix e kifejezését felhasználva írható:

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{A}}_{\lambda} \bar{\mathbf{A}}_{\lambda}^{\dagger} &= \mathbf{d}^{-1/2} \bar{\mathbf{A}}_{\lambda} \mathbf{d}^{1/2} \cdot (\mathbf{d}^{-1/2} \sum_{\kappa} \bar{\mathbf{A}}_{\kappa} \bar{\mathbf{A}}_{\kappa}^{\dagger} \mathbf{d}^{-1/2}) \mathbf{d}^{1/2} \bar{\mathbf{A}}_{\lambda}^{\dagger} \mathbf{d}^{-1/2} = \\ &= \mathbf{d}^{-1/2} \sum_{\kappa} \bar{\mathbf{A}}_{\lambda} \bar{\mathbf{A}}_{\kappa} \bar{\mathbf{A}}_{\kappa}^{\dagger} \bar{\mathbf{A}}_{\lambda}^{\dagger} \mathbf{d}^{-1/2}. \end{aligned} \quad (9.6)$$

Az  $\bar{\mathbf{A}}_{\kappa}$  mátrixok csoporttulajdonsága folytán az  $\bar{\mathbf{A}}_{\lambda} \bar{\mathbf{A}}_{\kappa}$  mátrixok ( $\kappa = 1, 2, \dots, h$ ) a sorrendtől eltekintve megegyeznek az  $\bar{\mathbf{A}}_{\kappa}$ -kkal,<sup>3</sup> így

$$\sum_{\kappa} \bar{\mathbf{A}}_{\lambda} \bar{\mathbf{A}}_{\kappa} (\bar{\mathbf{A}}_{\lambda} \bar{\mathbf{A}}_{\kappa})^{\dagger} = \sum_{\kappa} \bar{\mathbf{A}}_{\kappa}^{\dagger} \bar{\mathbf{A}}_{\kappa}.$$

Ebből következik, hogy

$$\bar{\mathbf{A}}_{\lambda} \bar{\mathbf{A}}_{\lambda}^{\dagger} = \mathbf{d}^{-1/2} \sum_{\kappa} \bar{\mathbf{A}}_{\kappa} \bar{\mathbf{A}}_{\kappa}^{\dagger} \mathbf{d}^{-1/2} = \mathbf{1}. \quad (9.7)$$

Ez mutatja, hogy az  $\bar{\mathbf{A}}_{\kappa}$  ábrázolás unitér, ami teljessé teszi az 1. tétel bizonyítását.

**2. tétel.** *Valamely irreducibilis ábrázolás minden mátrixával felcserélhető mátrix az egységmátrixnak többszöröse (konstans mátrix).*

Feltehetjük, hogy az ábrázolás unitér alakban áll előttünk, mivel a hasonlósági transzformáció az egységmátrixot természetesen változatlanul hagyja. Kommutáljon az  $\mathbf{M}$  mátrix az  $\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2, \dots, \mathbf{A}_h$  mátrixok mindegyikével, azaz

$$\mathbf{A}_{\kappa} \mathbf{M} = \mathbf{M} \mathbf{A}_{\kappa} \quad (\kappa = 1, 2, \dots, h). \quad (9.8)$$

<sup>3</sup> Lásd az 1. tételt a 82. oldalon.

Megmutatjuk, hogy elegendő, ha csak a hermitikus  $\mathbf{M}$  mátrixokat vesszük tekintetbe. A (9.8) egyenlet adjungáltját képezve kapjuk:

$$\mathbf{M}^\dagger \mathbf{A}_\kappa^\dagger = \mathbf{A}_\kappa^\dagger \mathbf{M}^\dagger.$$

Szorozzuk meg ezt az egyenletet előlről és hátulról  $\mathbf{A}_\kappa$ -val, és vegyük tekintetbe  $\mathbf{A}_\kappa \mathbf{A}_\kappa^\dagger = \mathbf{A}_\kappa^\dagger \mathbf{A}_\kappa = \mathbf{1}$  fennállását:

$$\mathbf{A}_\kappa \mathbf{M}^\dagger = \mathbf{M}^\dagger \mathbf{A}_\kappa \quad (\kappa = 1, 2, \dots, h). \quad (9.9)$$

Eszerint nemcsak  $\mathbf{M}$ , hanem  $\mathbf{M}^\dagger$  is felcserélhető az  $\mathbf{A}$  mátrixok mindegyikével. Így tehát az  $\mathbf{M} + \mathbf{M}^\dagger = \mathbf{H}_1$ ,  $i(\mathbf{M} - \mathbf{M}^\dagger) = \mathbf{H}_2$  hermitikus mátrixok is kommutálnak mindegyik  $\mathbf{A}$ -val. Ennélfogva elegendő azt megmutatni, hogy minden hermitikus mátrix, mely minden  $\mathbf{A}$ -val kommutál, konstans mátrix. Ha ugyanis  $\mathbf{H}_1$ ,  $\mathbf{H}_2$  mindkettő többszöröse az egységmátrixnak, akkor  $2\mathbf{M} = \mathbf{H}_1 - i\mathbf{H}_2$  ugyancsak többszöröse annak.

Ha az  $\mathbf{M}$  mátrix (9.8) alatt hermitikus, akkor alkalmas  $\mathbf{V}$  mátrix segítségével  $\mathbf{d}$  átlós alakra hozható:  $\mathbf{d} = \mathbf{V}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{V}$ . Legyen  $\bar{\mathbf{A}}_\kappa = \mathbf{V}^{-1} \mathbf{A}_\kappa \mathbf{V}$ . (Az  $\bar{\mathbf{A}}_\kappa$  mátrixok, éppúgy mint az  $\mathbf{A}_\kappa$ -k, unitérek). Ekkor (9.8) következményeképpen fennáll

$$\bar{\mathbf{A}}_\kappa \mathbf{d} = \mathbf{d} \bar{\mathbf{A}}_\kappa \quad (\kappa = 1, 2, \dots, h). \quad (9.10)$$

Ha a  $\mathbf{d}$  mátrix átlós elemei nem mind egyenlők, akkor azoknak a soroknak és oszlopoknak a metszéspontjaiban, amelyeknek  $\mathbf{d}$ -ben különböző átlós elemek felelnek meg, az  $\bar{\mathbf{A}}_\kappa$  mátrixok mindegyikében zérusoknak kell állniuk. Azaz

$$(\bar{\mathbf{A}}_\kappa)_{kj} d_{jj} = d_{kk} (\bar{\mathbf{A}}_\kappa)_{kj}$$

maga után vonja, hogy  $d_{jj} \neq d_{kk}$  esetén az ábrázolási mátrixokra fennáll  $(\bar{\mathbf{A}}_\kappa)_{kj} = 0$ ; ekkor a 81. oldalon mondottak értelmében az ábrázolás reducibilis lenne. Mint-hogy az ábrázolás irreducibilis, a  $d_{kk}$  átlós elemek mind egyenlők. Azaz  $\mathbf{d}$  és így  $\mathbf{V} \mathbf{d} \mathbf{V}^{-1} = \mathbf{M}$  is konstans mátrix, mely minden mátrixszal kommutál. Ezzel bebizonyítottuk a 2. tételt, mely a *Schur*-féle lemma néven ismert.

A 2. tételnek ez a bizonyítása nemcsak azt mutatja, hogy az ábrázolásnak reducibilisnek kell lennie, ha van olyan nemkonstans mátrix, mely az ábrázolás minden mátrixával kommutál, hanem azt is, hogy miképpen lehet az ábrázolást kiredukálni, vagyis a (9.E.2) alakra hozni. Ez ugyanannak a hasonlósági transzformációnak a segítségével történhet, amely a „kommutáló mátrixot” átlós alakra hozza.

Megfordítva, ha az ábrázolás reducibilis, bizonyosan léteznek olyan nemkonstans mátrixok, amelyek az ábrázolás minden mátrixával kommutálnak. Ebben az esetben az ábrázolást alkalmasan választott  $\mathbf{S}$  mátrix segítségével elvégzett hasonlósági transzformáció útján a (9.E.2) alakra lehet hozni. A (9.E.2) alakú mátrixokkal azonban minden

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} a\mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & a'\mathbf{1} \end{pmatrix}$$

mátrix kommutál, ahol  $a$  és  $a'$  tetszőleges. Ha  $\mathbf{M}$ -et  $S^{-1}$  segítségével hasonlósági transzformációnak vetjük alá, az így kapott mátrix kommutálni fog ama ábrázolási mátrixokkal, melyeket a (9.E.2) alakban megadott ábrázolásból az  $S^{-1}$  segítségével elvégzett hasonlósági transzformáció segítségével kapunk.

Ha létezik olyan nemkonstans mátrix, mely az ábrázolás minden mátrixával felcserélhető, akkor az ábrázolás reducibilis; ha ilyen mátrix nem létezik, akkor az ábrázolás irreducibilis.

3. tétel. Tekintsük ugyanazon csoport két irreducibilis ábrázolását, a  $\mathbf{D}^{(1)}(A_1)$ ,  $\mathbf{D}^{(1)}(A_2)$ , ...,  $\mathbf{D}^{(1)}(A_h)$ , valamint a  $\mathbf{D}^{(2)}(A_1)$ ,  $\mathbf{D}^{(2)}(A_2)$ , ...,  $\mathbf{D}^{(2)}(A_h)$  ábrázolást, amelyeknek dimenziója  $l_1$ , ill.  $l_2$ . Ha létezik olyan  $l_2$  soros,  $l_1$  oszlopos  $\mathbf{M}$  mátrix, melyre fennáll

$$\mathbf{M} \mathbf{D}^{(1)}(A_\kappa) = \mathbf{D}^{(2)}(A_\kappa) \mathbf{M} \quad (\kappa = 1, 2, \dots, h), \quad (9.11)$$

akkor  $l_1 \neq l_2$  mellett az  $\mathbf{M}$  mátrix a zérusmátrix. Ha pedig  $l_1 = l_2$ , akkor  $\mathbf{M}$  vagy a zérusmátrix, vagy pedig egy zérustól különböző determinánsú mátrix. Az utóbbi esetben  $\mathbf{M}$ -nek van inverze és a két irreducibilis ábrázolás ekvivalens.

Feltehetjük mindjárt kezdettől fogva, hogy az ábrázolások unitér alakban vannak megadva. Ha ez nem így volna, unitérré tehetnénk őket alkalmas  $S$ ,  $R$  mátrixokkal elvégzett hasonlósági transzformáció útján. Ekkor (9.11) alapján írhatjuk:

$$\mathbf{R}^{-1} \mathbf{M} S \cdot S^{-1} \mathbf{D}^{(1)}(A_\kappa) S = \mathbf{R}^{-1} \mathbf{D}^{(2)}(A_\kappa) \mathbf{R} \cdot \mathbf{R}^{-1} \mathbf{M} S, \quad (9.12)$$

$$\mathbf{R}^{-1} \mathbf{M} S \cdot \bar{\mathbf{D}}^{(1)}(A_\kappa) = \bar{\mathbf{D}}^{(2)}(A_\kappa) \cdot \mathbf{R}^{-1} \mathbf{M} S;$$

itt  $\mathbf{R}^{-1} \mathbf{M} S$  egyszerűen az  $\mathbf{M}$  szimbólummal helyettesíthető.

Fel tesszük továbbá, hogy  $l_1 \leq l_2$ . Ha  $l_1 > l_2$ , pusztán a (9.11) egyenlet transzponáltját kell képeznünk, és az alább következők változtatás nélkül érvényesek. Megjegyezzük, hogy a mátrixok unitér jellege folytán  $\mathbf{D}^{(1)}(A_\kappa)^\dagger = \mathbf{D}^{(1)}(A_\kappa)^{-1} = \mathbf{D}^{(1)}(A_\kappa^{-1})$  és  $\mathbf{D}^{(2)}(A_\kappa)^\dagger = \mathbf{D}^{(2)}(A_\kappa^{-1})$ ; (9.11) adjungáltját képezve kapjuk:

$$\mathbf{D}^{(1)}(A_\kappa^{-1}) \mathbf{M}^\dagger = \mathbf{M}^\dagger \mathbf{D}^{(2)}(A_\kappa^{-1}). \quad (9.13)$$

Mivel (9.11) valamennyi csoportelem esetében fennáll, és így fennáll az  $A_\kappa^{-1}$  elemre is, (9.13)-at balról  $\mathbf{M}$ -mel megszorozva kapjuk:

$$\mathbf{M} \mathbf{D}^{(1)}(A_\kappa^{-1}) \mathbf{M}^\dagger = \mathbf{M} \mathbf{M}^\dagger \mathbf{D}^{(2)}(A_\kappa^{-1}), \quad (9.14)$$

$$\mathbf{D}^{(2)}(A_\kappa^{-1}) \mathbf{M} \mathbf{M}^\dagger = \mathbf{M} \mathbf{M}^\dagger \mathbf{D}^{(2)}(A_\kappa^{-1}). \quad (9.15)$$

Eszerint az  $\mathbf{M} \mathbf{M}^\dagger$  hermitikus mátrix kommutál a második irreducibilis ábrázolás  $\mathbf{D}^{(2)}(A_1)$ ,  $\mathbf{D}^{(2)}(A_2)$ , ...,  $\mathbf{D}^{(2)}(A_h)$  mátrixainak mindegyikével. A 2. tétel szerint tehát az  $\mathbf{M} \mathbf{M}^\dagger$  mátrix szükségképpen az egységmátrix többszöröse

$$\mathbf{M} \mathbf{M}^\dagger = c \mathbf{1}. \quad (9.16)$$

Ha a két ábrázolás,  $\mathbf{D}^{(1)}$  és  $\mathbf{D}^{(2)}$  dimenziója megegyezik, két lehetőség van. Vagy  $c \neq 0$ , mely esetben a  $|c\mathbf{1}| = c^l$  determináns nem zérus, és ez maga után vonja, hogy  $\mathbf{M}$ -nek a determinánsa nem zérus és hogy  $\mathbf{M}$ -nek van reciproka; vagy  $c=0$ , amikor is  $\mathbf{M}\mathbf{M}^\dagger = 0$  és  $\mathbf{M}$  a zérusmátrix. Ennek igazolására írjuk ki részletesen:

$$(\mathbf{M}\mathbf{M}^\dagger)_{ij} = \sum_k M_{ik} M_{jk}^* = 0; \quad (9.17)$$

ha  $i=j$ , kapjuk:

$$\sum_k |M_{ik}|^2 = 0. \quad (9.18)$$

Ebből következik, hogy  $M_{ik} = 0$ , minthogy az  $|M_{ik}|^2$  tagok mind nemnegatívak, és (9.18) folytán pozitívak nem lehetnek. Ezzel a tételt az  $l_1 = l_2$  esetre igazoltuk.

Másrésztől, ha a két ábrázolás dimenziója nem egyenlő, akkor  $\mathbf{M}$  nem négyzetes, hanem derékszögű mátrix. Zérusokat hozzátéve azonban négyzetes mátrixszá egészíthetjük ki:

$$\mathbf{N} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & \dots & M_{1a} & 0 & \dots & 0 \\ M_{21} & M_{22} & \dots & M_{2a} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ M_{b1} & M_{b2} & \dots & M_{ba} & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}. \quad (9.19)$$

Az  $\mathbf{N}$  mátrixot oly módon szerkesztettük meg, hogy  $\mathbf{M}\mathbf{M}^\dagger = \mathbf{N}\mathbf{N}^\dagger$  teljesül. Az  $\mathbf{N}$  mátrix determinánsa, valamint  $\mathbf{N}\mathbf{N}^\dagger = \mathbf{M}\mathbf{M}^\dagger$ -é is, nyilvánvalóan zérus. Eszerint (9.16) alatt  $c$  eltűnik, úgyhogy (9.17) és (9.18) ismét teljesül. Ezzel a 3. tételt teljesen igazoltuk.

*1a. tétel.* Ha ugyanazon csoport két ábrázolása,  $\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2, \dots, \mathbf{A}_h$  és  $\mathbf{B}_1, \mathbf{B}_2, \dots, \mathbf{B}_h$  unitér és ekvivalens, más szavakkal, ha létezik olyan *tetszőleges fajtájú*  $\mathbf{M}$  mátrix, amelyre teljesül az

$$\mathbf{M}\mathbf{A}_\alpha \mathbf{M}^{-1} = \mathbf{B}_\alpha \quad (\alpha = 1, 2, \dots, h) \quad (9.20)$$

összefüggés, akkor ezek az ábrázolások *unitér* transzformációval is egymásba transzformálhatók. Azaz létezik olyan *unitér*  $\mathbf{U}$  mátrix, amelyre fennáll

$$\mathbf{U}\mathbf{A}_\alpha \mathbf{U}^{-1} = \mathbf{B}_\alpha \quad (\alpha = 1, 2, \dots, h). \quad (9.21)$$

E tétel igazolása céljából olyan  $\mathbf{K}$  mátrixot keresünk, mely a  $\mathbf{B}_\alpha$  mátrixok mindegyikével kommutál és amely mellett az  $\mathbf{U} = \mathbf{K}\mathbf{M}$  szorzat unitér. Ha sikerül ilyen mátrixot találnunk, (9.20) alapján felírhatjuk a

$$\mathbf{B}_\alpha = \mathbf{K}\mathbf{B}_\alpha \mathbf{K}^{-1} = \mathbf{K}\mathbf{M}\mathbf{A}_\alpha \mathbf{M}^{-1} \mathbf{K}^{-1} = (\mathbf{K}\mathbf{M})\mathbf{A}_\alpha (\mathbf{K}\mathbf{M})^{-1} = \mathbf{U}\mathbf{A}_\alpha \mathbf{U}^{-1} \quad (9.21a)$$

összefüggést, amivel azután a tételt igazoltuk.

A (9.20) egyenletből következik

$$\mathbf{M}\mathbf{A}_\alpha = \mathbf{B}_\alpha \mathbf{M} \quad (\alpha = 1, 2, \dots, h) \quad (9.22)$$



s innen, mint korábban is, arra következtethetünk, hogy  $\mathbf{MM}^\dagger$ ; kommutál a második ábrázolás mindegyik mátrixával:

$$\mathbf{B}_\kappa \mathbf{MM}^\dagger = \mathbf{MM}^\dagger \mathbf{B}_\kappa \quad (\kappa = 1, 2, \dots, h). \quad (9.22a)$$

Eszerint az  $\mathbf{MM}^\dagger$  mátrixszal elvégzett hasonlósági transzformáció nem változtatja meg a második ábrázolást. Ez azt sugallja, hogy  $\mathbf{MM}^\dagger$  vagy valamilyen hasonló mátrix teljesítheti a  $\mathbf{K}$ -val szemben támasztott követelményeinket. A követelmény, hogy  $\mathbf{KM}$  unitér legyen, az

$$\mathbf{M}^\dagger \mathbf{K}^\dagger \mathbf{KM} = \mathbf{1} \quad \text{vagy a} \quad \mathbf{K}^\dagger \mathbf{K} = (\mathbf{M}^\dagger)^{-1} (\mathbf{M})^{-1} = (\mathbf{MM}^\dagger)^{-1} \quad (9.23)$$

alakban írható fel. Ennélfogva nem  $\mathbf{MM}^\dagger$  maga, hanem ennek  $-1/2$ -ik hatványa az, aminek egyenlőnek kell lennie  $\mathbf{K}$ -val.

Az  $(\mathbf{MM}^\dagger)^{-1/2}$  mátrix megszerkesztésére az 1. tétel bizonyításában használt eljárást alkalmazzuk. Először  $\mathbf{MM}^\dagger$ -et átlós alakúvá transzformáljuk a  $\mathbf{V}$  unitér mátrix segítségével:

$$\mathbf{V}^{-1} \mathbf{MM}^\dagger \mathbf{V} = \mathbf{d}, \quad \mathbf{MM}^\dagger = \mathbf{V} \mathbf{d} \mathbf{V}^{-1}. \quad (9.24)$$

Ez mindig megtehető, mivel  $\mathbf{MM}^\dagger$  hermitikus;  $\mathbf{d}$  átlós elemei azonfelül valamennyien valósak és pozitívak.<sup>4</sup> Meg lehet tehát szerkeszteni a  $\mathbf{d}^{-1/2}$  mátrixot, mely ugyancsak diagonális, és átlós elemei pozitívak és valósak. Végezetül a  $\mathbf{V}^{-1}$  mátrix felhasználásával  $\mathbf{d}^{-1/2}$ -re hasonlósági transzformációt alkalmazunk; ily módon kapjuk meg  $\mathbf{K}$ -t:

$$\mathbf{K} = \mathbf{V} \mathbf{d}^{-1/2} \mathbf{V}^{-1}. \quad (9.25)$$

Most megmutatjuk, hogy  $\mathbf{K}$  kommutál a  $\mathbf{B}_\kappa$  mátrixok mindegyikével, és hogy  $\mathbf{KM}$  unitér. A (9.22a), (9.24) egyenletek folyományaképpen fennáll

$$\mathbf{B}_\kappa \mathbf{V} \mathbf{d} \mathbf{V}^{-1} = \mathbf{V} \mathbf{d} \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B}_\kappa, \quad \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B}_\kappa \mathbf{V} \mathbf{d} = \mathbf{d} \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B}_\kappa \mathbf{V}, \quad (9.26)$$

azaz a  $\mathbf{d}$  átlós mátrix kommutál mindegyik  $\mathbf{V}^{-1} \mathbf{B}_\kappa \mathbf{V}$ -vel. Ennélfogva a  $\mathbf{V}^{-1} \mathbf{B}_\kappa \mathbf{V}$  mátrixok mindegyikében csak zérusok állhatnak azoknak a soroknak és oszlopoknak a metszéspontjaiban, amelyeknek a  $\mathbf{d}$  mátrix különböző átlós elemei felelnek meg. Ezek a mátrixok kommutálnak  $\mathbf{d}^{-1/2}$ -nel is, mivel ennek csak azok az átlós elemei különböznek egymástól, amelyek már  $\mathbf{d}$ -ben különbözőek voltak. Így tehát

$$\mathbf{V}^{-1} \mathbf{B}_\kappa \mathbf{V} \mathbf{d}^{-1/2} = \mathbf{d}^{-1/2} \mathbf{V}^{-1} \mathbf{B}_\kappa \mathbf{V}, \quad \mathbf{B}_\kappa \mathbf{K} = \mathbf{K} \mathbf{B}_\kappa, \quad (9.27)$$

és  $\mathbf{K}$  ténylegesen kommutál a  $\mathbf{B}_1, \mathbf{B}_2, \dots, \mathbf{B}_h$  ábrázolási mátrixok mindegyikével.

Vegyük szemügyre ezek után az

$$\mathbf{UU}^\dagger = \mathbf{K} \mathbf{M} \mathbf{M}^\dagger \mathbf{K}^\dagger = \mathbf{V} \mathbf{d}^{-1/2} \mathbf{V}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{M}^\dagger \mathbf{V}^{-1} \mathbf{d}^{-1/2} \mathbf{V}^\dagger \quad (9.28)$$

kifejezést. A (9.24) egyenlet folytán, és tekintetve véve, hogy  $\mathbf{V}$  unitér,  $\mathbf{d}^{-1/2}$  pedig hermitikus (valós diagonális) mátrix, kapjuk:

$$\mathbf{UU}^\dagger = \mathbf{V} \mathbf{d}^{-1/2} \mathbf{d} \mathbf{d}^{-1/2} \mathbf{V}^\dagger = \mathbf{V} \mathbf{V}^\dagger = \mathbf{1}, \quad (9.29)$$

úgyhogy  $\mathbf{U}$  unitér. Ezzel igazoltuk az 1a. tételt.

Ennek a tételnek a fontossága abban rejlik, hogy mindaddig, amíg az ábrázolások unitérek, lehetővé teszik, hogy unitér hasonlósági transzformációkra korlátozódjunk. Megjegyezzük, hogy ha (9.20) alatt az ábrázolások unitérek és irreducibilisek, az  $\mathbf{M}$  mátrix egy numerikus faktortól eltekintve szükségképpen unitér. Ez következik a 2. tételből, ha azt a (9.22a) egyenletre alkalmazzuk.

<sup>4</sup> Lásd az 1. tétel bizonyítását a 82. oldalon.

4. tétel. A negyedik tétel, a gyakorlatban valamennyi között a legfontosabb, az irreducibilis ábrázolások mátrixelemeire vonatkozó ortogonalitási összefüggés.  
Ha

$$\mathbf{D}^{(1)}(E), \mathbf{D}^{(1)}(A_2), \dots, \mathbf{D}^{(1)}(A_h)$$

és

$$\mathbf{D}^{(2)}(E), \mathbf{D}^{(2)}(A_2), \dots, \mathbf{D}^{(2)}(A_h)$$

ugyanannak a csoportnak két inekvivalens, irreducibilis, unitér ábrázolása, akkor

$$\sum_R \mathbf{D}^{(1)}(R)_{\mu\nu}^* \mathbf{D}^{(2)}(R)_{\alpha\beta} = 0 \quad (9.30)$$

fennáll a  $\mu\nu$  és  $\alpha\beta$  elemek mindegyikére; itt, amint feltüntettük, összegezni az összes  $E, A_2, \dots, A_h$  csoportelemre kell.<sup>5</sup> Egyazon unitér, irreducibilis ábrázolás elemeire fennáll:

$$\sum_R \mathbf{D}^{(1)}(R)_{\mu\nu}^* \mathbf{D}^{(1)}(R)_{\mu'\nu'} = \frac{h}{l_1} \delta_{\mu\mu'} \delta_{\nu\nu'}, \quad (9.31)$$

ahol  $h$  a csoport rendje és  $l_1$  az ábrázolás dimenziója.

A 4. tétel abból adódik, hogy az ábrázolás csoporttulajdonságai sok olyan  $\mathbf{M}$  mátrix megszerkesztését lehetővé teszi, amelyek eleget tesznek a (9.11) vagy a (9.8) egyenletnek. A (9.30) és (9.31) egyenletek azt a tényt fejezik ki, hogy a (9.11) egyenletet kielégítő mátrix szükségszerűen a zérusmátrix, a (9.8)-at kielégítő mátrix pedig az egységmátrixnak a többszöröse.

A csoporttulajdonság folytán minden

$$\mathbf{M} = \sum_R \mathbf{D}^{(2)}(R) \mathbf{X} \mathbf{D}^{(1)}(R^{-1})$$

alakú mátrix, ahol a tetszőleges  $\mathbf{X}$ -nek  $l_2$  sora,  $l_1$  oszlopa van, eleget tesz (9.11)-nek. A csoporttulajdonságból következik, hogy

$$\sum_R \mathbf{D}^{(2)}(SR) \mathbf{X} \mathbf{D}^{(1)}(SR)^{-1} = \sum_R \mathbf{D}^{(2)}(R) \mathbf{X} \mathbf{D}^{(1)}(R)^{-1} = \mathbf{M},$$

mivel a bal oldalon és a jobb oldalon ugyanazok a mátrixok lépnek fel, csak más sorrendben. Eszerint

$$\begin{aligned} \mathbf{D}^{(2)}(S)\mathbf{M} &= \sum_R \mathbf{D}^{(2)}(S) \mathbf{D}^{(2)}(R) \mathbf{X} \mathbf{D}^{(1)}(R)^{-1} \\ &= \sum_R \mathbf{D}^{(2)}(SR) \mathbf{X} \mathbf{D}^{(1)}(SR)^{-1} \mathbf{D}^{(1)}(S), \end{aligned}$$

vagy tömörebben:

$$\mathbf{D}^{(2)}(S) \mathbf{M} = \mathbf{M} \mathbf{D}^{(1)}(S). \quad (9.11a)$$

<sup>5</sup> A következőkben  $R$  és  $S$  mindenkor  $E, A_2, \dots, A_h$  csoportelemeket jelölnek.

Ekkor a 3. tétel értelmében  $\mathbf{M}$ -nek a *zérusmátrixnak* kell lennie, azaz tetszőleges  $X_{\kappa\lambda}$  mellett teljesülnie kell az

$$M_{\alpha\mu} = \sum_{\kappa\lambda} \sum_R D^{(2)}(R)_{\alpha\kappa} X_{\kappa\lambda} D^{(1)}(R^{-1})_{\lambda\mu} = 0$$

egyenletnek. Ha valamennyi mátrixelemnek az  $X_{\kappa\lambda} = 0$  értéket adjuk, az egy  $X_{\beta\nu} = 1$  kivételével, a (9.30) egyenlet általánosított alakját kapjuk:

$$\sum D^{(2)}(R)_{\alpha\beta} D^{(1)}(R^{-1})_{\nu\mu} = 0. \quad (9.30a)$$

Itt a  $\mathbf{D}^{(2)}(R)$ ,  $\mathbf{D}^{(1)}(R)$  ábrázolásoknak irreducibiliseknek kell lenniök, nem szükséges azonban, hogy unitérek legyenek. Ha a  $\mathbf{D}^{(2)}(R)$ ,  $\mathbf{D}^{(1)}(R)$  mátrixok unitérek:

$$\mathbf{D}^{(1)}(R^{-1}) = [\mathbf{D}^{(1)}(R)]^{-1} = \mathbf{D}^{(1)}(R)^\dagger,$$

a (9.30a) egyenlet átmegy (9.30)-ba.

A (9.31) összefüggés bizonyítása céljából legyen

$$\mathbf{M} = \sum_R \mathbf{D}^{(1)}(R) \mathbf{X} \mathbf{D}^{(1)}(R^{-1}),$$

ahol  $\mathbf{X}$  tetszőleges mátrix. Ez az  $\mathbf{M}$  a  $\mathbf{D}^{(1)}(S)$  mátrixok mindegyikével kommutál:

$$\begin{aligned} \mathbf{D}^{(1)}(S) \mathbf{M} &= \sum_R \mathbf{D}^{(1)}(S) \mathbf{D}^{(1)}(R) \mathbf{X} \mathbf{D}^{(1)}(R^{-1}) = \\ &= \sum_R \mathbf{D}^{(1)}(SR) \mathbf{X} \mathbf{D}^{(1)}[(SR)^{-1}] \mathbf{D}^{(1)}(S) = \mathbf{M} \mathbf{D}^{(1)}(S). \end{aligned}$$

Eszerint a 3. tétel megköveteli, hogy  $\mathbf{M}$  az *egységmátrix* többszöröse legyen; azaz

$$\sum_{\kappa\lambda} \sum_R D^{(1)}(R)_{\mu\kappa} X_{\kappa\lambda} D^{(1)}(R^{-1})_{\lambda\mu'} = c \delta_{\mu\mu'},$$

ahol  $c$  független  $\mu$ -tól és  $\mu'$ -től, az  $X_{\kappa\lambda}$  elemektől azonban függhet. Ha egy elemet ismét egynek választunk:  $X_{\nu\nu} = 1$ , és feltesszük, hogy a többi  $X_{\kappa\lambda}$  mind eltűnik, kapjuk:

$$\sum_R D^{(1)}(R)_{\mu\nu} D^{(1)}(R^{-1})_{\nu\mu'} = c_{\nu\nu} \delta_{\mu\mu'},$$

ahol  $c_{\nu\nu}$  az  $X_{\kappa\lambda}$  elemek eme speciális rendszerének megfelelő állandót jelöli.

A  $c_{\nu\nu}$  konstans meghatározása céljából legyen  $\mu = \mu'$ , és  $\mu$ -re összegezzünk 1-től  $l_1$ -ig. Ekkor ez a kifejezés éppen a  $\mathbf{D}^{(1)}(R) \mathbf{D}^{(1)}(R^{-1}) = \mathbf{D}^{(1)}(E) = (\delta_{\nu\nu})$  szorzatok összegét adja:

$$\sum_{\mu} \sum_R D^{(1)}(R^{-1})_{\nu\mu} D^{(1)}(R)_{\mu\nu} = \sum_R D^{(1)}(E)_{\nu\nu} = h \delta_{\nu\nu} = \sum_{\mu} c_{\nu\nu} \delta_{\mu\mu} = c_{\nu\nu} l_1.$$

Eszerint  $c_{\nu\nu} = \delta_{\nu\nu} (h/l_1)$ . Így tehát a (9.31) összefüggés némileg általánosított alakját kapjuk:

$$\sum_R D^{(1)}(R)_{\mu\nu} D^{(1)}(R^{-1})_{\nu\mu'} = \frac{h}{l_1} \delta_{\mu\mu'} \delta_{\nu\nu}. \quad (9.31a)$$

Ez unitér ábrázolások esetén átmegy (9.31)-be.

A

$$D^{(1)}(A_1)_{\mu\nu} = v_{A_1}^{(\mu\nu)}, \quad D^{(1)}(A_2)_{\mu\nu} = v_{A_2}^{(\mu\nu)}, \quad \dots, \quad D^{(1)}(A_h)_{\mu\nu} = v_{A_h}^{(\mu\nu)}$$

számok egy  $h$ -dimenziós  $\mathbf{v}^{(\mu\nu)}$  vektor komponenseiként értelmezhetők; e vektor komponenseit a csoportelemek indexelik. Eszerint (9.31) azt fejezi ki, hogy e vektor hermitikus hossza  $\sqrt{h/l_1}$ , és hogy eme  $l_1^2$  számú vektor közül kiválasztott bármely vektorpár ortogonális. Azonkívül (9.30) szerint a  $\mathbf{v}$  vektorok ortogonálisak mindazon  $\mathbf{w}$  vektorokra, amelyeket valamely inekvivalens irreducibilis ábrázolásból kapunk hasonló módon:

$$\mathbf{w}_{A_1}^{(\alpha\beta)} = D^{(2)}(A_1)_{\alpha\beta}, \quad \dots, \quad \mathbf{w}_{A_h}^{(\alpha\beta)} = D^{(2)}(A_h)_{\alpha\beta}.$$

Három objektum szimmetrikus csoportjának

$$\mathbf{D}(E) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D}(A) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D}(B) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\sqrt{3} \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D}(C) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\sqrt{3} \\ -\frac{1}{2}\sqrt{3} & \frac{1}{2} \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{D}(D) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\sqrt{3} \\ -\frac{1}{2}\sqrt{3} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D}(F) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\sqrt{3} \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (7.E.1)$$

ábrázolása, mellyel már többször volt dolgunk, irreducibilis. Ha reducibilis volna, valamennyi mátrixát ugyanazon hasonlósági transzformáció segítségével egyidejűleg átlós alakra lehetne hozni, és így a mátrixoknak, mivel diagonálisak, mind kommutálniuk kellene. Ezek a mátrixok azonban nem felcserélhetők, amint azt pl.

$$\mathbf{D}(A)\mathbf{D}(B) = \mathbf{D}(D), \quad \mathbf{D}(B)\mathbf{D}(A) = \mathbf{D}(F) \neq \mathbf{D}(D)$$

mutatja. A 2. tétel szerint csak az egységmátrix többszörösei kommutálnak a (7.E.1) mátrixok mindegyikével. Emه egyszerű példa esetében azonnal láthatjuk, hogy  $\mathbf{D}(A)$ -val csak az átlós mátrixok kommutálnak. Valamely átlós mátrix pedig  $\mathbf{D}(B)$ -vel csak akkor kommutálhat, ha két átlós eleme egyenlő. Eszerint már a  $\mathbf{D}(A)$ ,  $\mathbf{D}(B)$  mátrixokkal való felcserélhetőség kiadja a korlátozást: kommutáló mátrix csak az egységmátrix többszöröse lehet. A (9.31) egyenlet szerint a négy vektornak,  $\mathbf{v}^{(11)}$ -nek,  $\mathbf{v}^{(12)}$ -nek,  $\mathbf{v}^{(21)}$ -nek és  $\mathbf{v}^{(22)}$ -nek, amelyekre

$$v_E^{(11)} = 1, \quad v_A^{(11)} = 1, \quad v_B^{(11)} = -\frac{1}{2}, \quad v_C^{(11)} = -\frac{1}{2},$$

$$v_D^{(11)} = -\frac{1}{2}, \quad v_F^{(11)} = -\frac{1}{2};$$

$$v_E^{(12)} = 0, \quad v_A^{(12)} = 0, \quad v_B^{(12)} = \frac{1}{2}\sqrt{3}, \quad v_C^{(12)} = -\frac{1}{2}\sqrt{3},$$

$$v_D^{(12)} = \frac{1}{2}\sqrt{3}, \quad v_F^{(12)} = -\frac{1}{2}\sqrt{3};$$

$$v_E^{(21)}=0, \quad v_A^{(21)}=0, \quad v_B^{(21)}=\frac{1}{2}\sqrt{3}, \quad v_C^{(21)}=-\frac{1}{2}\sqrt{3},$$

$$v_D^{(21)}=-\frac{1}{2}\sqrt{3}, \quad v_F^{(21)}=\frac{1}{2}\sqrt{3};$$

$$v_E^{(22)}=1, \quad v_A^{(22)}=-1, \quad v_B^{(22)}=\frac{1}{2}, \quad v_C^{(22)}=\frac{1}{2},$$

$$v_D^{(22)}=-\frac{1}{2}, \quad v_F^{(22)}=-\frac{1}{2},$$

ortogonálisnak kell lennie. Így például

$$(v^{(11)}, v^{(12)})=1 \cdot 0 + 0 \cdot 1 + \left(-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\sqrt{3} + \left(-\frac{1}{2}\right)\left(-\frac{1}{2}\sqrt{3}\right) + \left(-\frac{1}{2}\right)\frac{1}{2}\sqrt{3} + \left(-\frac{1}{2}\right)\left(-\frac{1}{2}\sqrt{3}\right)\right)=0.$$

E vektorok hosszának  $\sqrt{h/l}=\sqrt{6/2}=\sqrt{3}$  értéket kell adnia. Egy példa:

$$(v^{(21)}, v^{(21)})=0^2+0^2+\frac{3}{4}+\frac{3}{4}+\frac{3}{4}+\frac{3}{4}=3.$$

Abból a célból, hogy a (9.30) összefüggés alkalmazására is adhassunk példát, tekintsük ugyanennek a csoportnak a 80. oldalon megadott ábrázolását, mely nyilvánvalóan irreducibilis:

$$\bar{D}(E)=(1), \quad \bar{D}(A)=(-1), \quad \bar{D}(B)=(-1), \tag{9.E.1}$$

$$\bar{D}(C)=(-1), \quad \bar{D}(D)=(1), \quad \bar{D}(F)=(1),$$

továbbá az azonossággal való triviális ábrázolást:

$$\bar{\bar{D}}(E)=(1), \quad \bar{\bar{D}}(A)=(1), \quad \bar{\bar{D}}(B)=(1), \tag{9.E.3}$$

$$\bar{\bar{D}}(C)=(1), \quad \bar{\bar{D}}(D)=(1), \quad \bar{\bar{D}}(F)=(1).$$

Mind a négy  $v$  vektornak ortogonálisnak kell lennie a  $w_R=\bar{D}(R)_{11}$ , továbbá a  $z_R=\bar{\bar{D}}(R)_{11}=1$  vektorra. Például

$$(v^{(22)}, w)=1 \cdot 1 + (-1) \cdot (-1) + \frac{1}{2} \cdot (-1) + \frac{1}{2} \cdot (-1) - \frac{1}{2} \cdot (-1) - \frac{1}{2} \cdot 1 = 0.$$

Tekintsük most valamely csoport valamennyi inekvivalens irreducibilis ábrázolását. A  $D^{(1)}(R)$  mátrix dimenziója:  $l_1$ ,  $D^{(2)}(R)$  dimenziója  $l_2$ , ...,  $D^{(c)}(R)$  dimenziója  $l_c$ ; feltesszük, hogy mindegyik ábrázolás unitér. Ekkor a (9.30), (9.31) képletek a következő alakban foglalhatók össze:

$$\sum_R D^{(j)}(R)_{\mu\nu} \sqrt{\frac{l_j}{h}} D^{(j')}(R)_{\mu'\nu'}^* \sqrt{\frac{l_{j'}}{h}} = \delta_{jj'} \delta_{\mu\mu'} \delta_{\nu\nu'} \tag{9.32}$$

$$(\mu, \nu=1, 2, \dots, l_j; \quad \mu', \nu'=1, 2, \dots, l_{j'}; \quad j, j'=1, 2, \dots, c).$$

Az  $l_1^2 + l_2^2 + \dots + l_c^2$  számú,  $h$ -dimenziós

$$v_R^{(j, \mu, \nu)} = D^{(j)}(R)_{\mu\nu}$$

vektor egymásra ortogonális a csoportelemek terében.

Mínt hogy a  $h$ -dimenziós térben legfeljebb  $h$  számú ortogonális vektor létezhet, következik, hogy valamennyi inekvivalens, irreducibilis ábrázolás dimenziójának  $l_1^2 + l_2^2 + \dots + l_c^2$  négyzetösszege legfeljebb akkora lehet, mint az ábrázolt csoport rendje. Ténylegesen megmutatható, hogy ez a négyzetösszeg pontosan egyenlő a csoport rendjével:  $l_1^2 + l_2^2 + \dots + l_c^2 = h$ . Ezt a tételt azonban itt nem bizonyítjuk (vö. 126. o.).

Foglalkozzunk tovább a (9.32) egyenlettel. A  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$  mátrix átlóját (spurját)  $\chi^{(j)}(R)$ -rel jelöljük:

$$\chi^{(j)}(R) = \sum_{\mu=1}^{l_j} D^{(j)}(R)_{\mu\mu}.$$

A  $h$  mennyiséget magában foglaló  $\chi^{(j)}(E)$ ,  $\chi^{(j)}(A_2)$ , ...,  $\chi^{(j)}(A_h)$  sorozat neve a  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$  ábrázolás karaktere. Az ábrázolásnak a karakter segítségével való jellemzése azért előnyös, mert az hasonlósági transzformációkkal szemben változatlan marad. A (9.32) alapján kapjuk:

$$\sum_R D^{(j)}(R)_{\mu\mu} D^{(j')}(R)_{\mu'\mu'}^* = \frac{h}{l_j} \delta_{jj'} \delta_{\mu\mu'}.$$

$\mu$ -re 1-től  $l_j$ -ig és  $\mu'$ -re 1-től  $l_{j'}$ -ig összegezve

$$\sum_R \chi^{(j)}(R) \chi^{(j')}(R)^* = \frac{h}{l_j} \delta_{jj'} \sum_{\mu=1}^{l_j} \sum_{\mu'=1}^{l_{j'}} \delta_{\mu\mu'} = \frac{h}{l_j} \delta_{jj'} \sum_{\mu=1}^{l_j} 1 = h \delta_{jj'}. \quad (9.33)$$

Az irreducibilis ábrázolások  $\chi^{(j)}(R)$  karakterei ortogonális vektorrendszert képeznek a csoportelemek terében. Ebből következik az is, hogy két inekvivalens irreducibilis ábrázolásnak nem lehet ugyanaz a karaktere, és hogy az egyenlő karakterű irreducibilis ábrázolások ekvivalensek.

A (9.33) egyenletet még némileg más alakra hozhatjuk, ha összehasonlítjuk az ugyanazon osztályba tartozó  $R, S$  elemek  $\chi^{(j)}(R)$  és  $\chi^{(j)}(S)$  karakterét. Ekkor létezik olyan  $T$  csoportelem, mely  $R$ -et  $S$ -be transzformálja. De ha  $T^{-1}RT = S$ , akkor  $\mathbf{D}^{(j)}(T^{-1}) \mathbf{D}^{(j)}(R) \mathbf{D}^{(j)}(T) = \mathbf{D}^{(j)}(S)$ , ezért a  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$  mátrix ugyancsak átvihető transzformációval  $\mathbf{D}^{(j)}(S)$ -be. Ebből következik, hogy a  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$  mátrix  $\chi^{(j)}(R)$  átlója egyenlő a  $\mathbf{D}^{(j)}(S)$  mátrix  $\chi^{(j)}(S)$  átlójával. Adott ábrázolásban ugyanazon osztály elemeinek egyenlő a karakterük.

Amikor tehát a karakterek sorozatát megadjuk, elegendő a karaktert a csoport mindegyik osztályában egyetlen elemre ismerni. Ezt tekinthetjük az osztály karakterének. Ha az egész csoport, melynek ábrázolását vizsgáljuk,  $k$  osztályból áll, amelyeket mondjuk a  $C_1, C_2, \dots, C_k$  szimbólumokkal fogunk jelölni, és ha ezeknek rendre  $g_1, g_2, \dots, g_k$  elemük van ( $g_1 + g_2 + g_3 + \dots + g_k = h$ ), akkor az ábrázolás karakterét a  $k$  számú  $\chi^{(j)}(C_1), \chi^{(j)}(C_2), \dots, \chi^{(j)}(C_k)$  szám teljesen meghatározza. E számokat behelyettesíthetjük a (9.33) egyenletbe a  $\chi^{(j)}(R)$ -ek helyére. Miután ezt megtettük, a csoportelemekre való összegezést elvégezhetjük oly módon, hogy

először az ugyanabba az osztályba tartozó  $g_\rho$  számú elemre összegezzük (a megfelelő  $g_\rho$  számú tag mind egyenlő), azután pedig a  $k$  számú osztály mindegyikére:

$$\sum_{\rho=1}^k \chi^{(j)}(C_\rho) \chi^{(j')}(C_\rho) * g_\rho = h \delta_{jj'},$$

vagy

$$\sum_{\rho=1}^k \chi^{(j)}(C_\rho) \sqrt{\frac{g_\rho}{h}} \cdot \chi^{(j')}(C_\rho) * \sqrt{\frac{g_\rho}{h}} = \delta_{jj'} \quad (9.34)$$

A  $\chi^{(j)}(C_\rho) \sqrt{g_\rho/h}$  normált karakterek ortonormált vektorrendszert képeznek az osztályok  $k$ -dimenziós terében.

A (9.30), (9.31), (9.33), (9.34) egyenletek az ábrázoláselmélet legfontosabb egyenletei, és azokra újból és újból hivatkozni fogunk.

A (7.E.1), (9.E.1) és (9.E.3) ábrázolások karakterei

$$\begin{aligned} \chi^{(E)}=2, \quad \chi^{(A)}=0, \quad \chi^{(B)}=0, \quad \chi^{(C)}=0, \quad \chi^{(D)}=-1, \quad \chi^{(F)}=-1; \\ \bar{\chi}^{(E)}=1, \quad \bar{\chi}^{(A)}=-1, \quad \bar{\chi}^{(B)}=-1, \quad \bar{\chi}^{(C)}=-1, \quad \bar{\chi}^{(D)}=1, \quad \bar{\chi}^{(F)}=1; \\ \bar{\bar{\chi}}^{(E)}=1, \quad \bar{\bar{\chi}}^{(A)}=1, \quad \bar{\bar{\chi}}^{(B)}=1, \quad \bar{\bar{\chi}}^{(C)}=1, \quad \bar{\bar{\chi}}^{(D)}=1, \quad \bar{\bar{\chi}}^{(F)}=1. \end{aligned}$$

Mintogy  $D, F$ , valamint  $A, B, C$  egy-egy osztályt képeznek, a karaktereik megegyeznek. A karaktereket ennél fogva a következőképpen foglalhatjuk össze:

$$\begin{aligned} \chi^{(E)}=2, \quad \chi^{(A, B, C)}=0, \quad \chi^{(D, F)}=-1; \\ \bar{\chi}^{(E)}=1, \quad \bar{\chi}^{(A, B, C)}=-1, \quad \bar{\chi}^{(D, F)}=1; \\ \bar{\bar{\chi}}^{(E)}=1, \quad \bar{\bar{\chi}}^{(A, B, C)}=1, \quad \bar{\bar{\chi}}^{(D, F)}=1. \end{aligned}$$

A  $\sqrt{g_\rho/h} \cdot \chi^{(j)}(C_\rho)$  normált karakterek ortogonálisak egymásra. Példaképpen  $\chi$ -t és  $\bar{\chi}$ -t vesszük:

$$\sqrt{\frac{1}{6}} \cdot 2 \sqrt{\frac{1}{6}} \cdot 1 + \sqrt{\frac{3}{6}} \cdot 0 \cdot \sqrt{\frac{3}{6}} \cdot (-1) + \sqrt{\frac{2}{6}} \cdot (-1) \cdot \sqrt{\frac{2}{6}} \cdot 1 = 0.$$

Mintogy legfeljebb  $k$  számú  $k$ -dimenziós ortonormált vektor létezik, következik, hogy az inekvivalens irreducibilis ábrázolások  $c$  száma legfeljebb akkora, mint az ábrázolt csoportok osztályainak  $k$  száma. Ténylegesen megmutatható, hogy adott csoport inekvivalens irreducibilis ábrázolásainak száma pontosan megegyezik e csoport osztályainak számával, azaz  $c=k$ .

Erre már láttunk egy példát: három objektum szimmetrikus csoportjának a 90., 91. oldalakon megadott három ábrázolását. Ez a csoport három osztályból áll:  $E; A, B, C; D, F$ . A fentiekén kívül más irreducibilis ábrázolása nincsen. Az ábrázolások dimenziói 2, 1, 1;  $2^2+1^2+1^2=6$  valóban a csoport rendjét adja.

*Ábrázolások kiredukálása.* Az előzők folyamán részben reducibilis, részben irreducibilis ábrázolásokkal volt dolgunk. Az 1. és az 1a. tétel tetszőleges ábrázolásra, a 2., a 3. és a 4. tétel [a (9.30), a (9.31), a (9.33) és a (9.34) egyenlet] irreducibilis ábrázolásokra vonatkozott.

Az irreducibilis ábrázolások jelentősége ama tényben rejlik, hogy tetszőleges ábrázolás egyértelműen felbontható irreducibilis ábrázolásokra. Azaz bármely irreducibilis ábrázolás a

$$\begin{pmatrix} \mathbf{D}^{(1)}(R) & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D}^{(2)}(R) & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{D}^{(s)}(R) \end{pmatrix} \quad (9.E.4)$$

alakra hozható alkalmasan választott „kiredukáló” mátrix segítségével elvégzett hasonlósági transzformációval, ahol  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$ -ek immár irreducibilis ábrázolások, az eredeti ábrázolás irreducibilis komponensei. Eszerint valamely adott ábrázolás, ha csak nem irreducibilis már, transzformációval a (9.E.2) alakra hozható:

$$\bar{\mathbf{D}}(A_\kappa) = \begin{pmatrix} \mathbf{D}'(A_\kappa) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D}''(A_\kappa) \end{pmatrix}; \quad (9.E.2)$$

az ábrázolás minden mátrixa ilyen alakúvá transzformálható. Itt vagy mind a  $\mathbf{D}'(A_\kappa)$ , mind pedig a  $\mathbf{D}''(A_\kappa)$  rész már irreducibilis, vagy például  $\mathbf{D}''$  még reducibilis. Az utóbbi esetben  $\bar{\mathbf{D}}(A_\kappa)$ -ra újabb transzformációt alkalmazhatunk az

$$\begin{pmatrix} \mathbf{S} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{T} \end{pmatrix}$$

mátrix segítségével; ily módon kapjuk:

$$\bar{\bar{\mathbf{D}}}(A_\kappa) = \begin{pmatrix} \mathbf{S}^{-1} \mathbf{D}'(A_\kappa) \mathbf{S} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{T}^{-1} \mathbf{D}''(A_\kappa) \mathbf{T} \end{pmatrix}.$$

Ha  $\mathbf{D}''$  reducibilis,  $\mathbf{T}$  oly módon választható, hogy  $\mathbf{T}^{-1} \mathbf{D}''(A_\kappa) \mathbf{T}$  a (9.E.2) alakot öltse. Ekkor  $\bar{\bar{\mathbf{D}}}(A_\kappa)$  a következő alakú:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{D}'(A_\kappa) & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D}'''(A_\kappa) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{D}''''(A_\kappa) \end{pmatrix}$$

Ez tovább redukálható, ha a  $\mathbf{D}'$ ,  $\mathbf{D}'''$ ,  $\mathbf{D}''''$  ábrázolások közül legalább még egy reducibilis.

Mint hogy az ábrázolás dimenziója véges, lehetségesnek kell lennie, hogy azt ily módon végül a (9.E.4) alakra hozzuk, ahol a  $\mathbf{D}^{(1)}$ ,  $\mathbf{D}^{(2)}$ , ...,  $\mathbf{D}^{(s)}$  ábrázolások mindegyike irreducibilis. Mint hogy több egymást követő hasonlósági transzformációt



mindig helyettesíthetünk eggyel, a vizsgált ábrázolás egyetlen hasonlósági transzformációval közvetlenül a (9.E.4) alakra hozható. Ezt az eljárást *kiredukálásnak* nevezzük; (9.E.4)-re mint a *kiredukált alakra* hivatkozunk.

Azt gondolhatná valaki, hogy amikor ezt a kiredukálást elvégezzük, a  $\mathbf{D}^{(1)}(R)$ ,  $\mathbf{D}^{(2)}(R)$ , ...,  $\mathbf{D}^{(s)}(R)$  irreducibilis részek nincsenek egyértelműen meghatározva (hasonlósági transzformáció erejéig), hanem ahelyett  $\mathbf{D}(R)$ -et több különböző módon ki lehet redukálni. Megmutatható, hogy ez nem így van. Ahogy egy egész szám egyértelműen felbontható prímszámok szorzatára, valamely reducibilis ábrázolás irreducibilis komponensei is egyértelműen meg vannak határozva, természetesen a sorrend erejéig.

Ha valamely reducibilis ábrázolás kiredukálásakor a  $\mathbf{D}^{(1)}(R)$  irreducibilis ábrázolást [melynek karaktere  $\chi^{(1)}(R)$ ]  $a_1$ -szer, a  $\mathbf{D}^{(2)}(R)$  irreducibilis ábrázolást [melynek karaktere  $\chi^{(2)}(R)$ ]  $a_2$ -ször kapjuk meg, és így tovább, akkor a reducibilis ábrázolás karaktereit nyilvánvalóan

$$\chi(R) = \sum_{j=1}^c a_j \chi^{(j)}(R) \quad (R = E, A_2, \dots, A_h) \quad (9.35)$$

adja meg. A (9.35) alatt álló  $h$  számú egyenlet azonban teljesen meghatározza az  $a_1, a_2, \dots, a_c$  számokat. Képezve (9.35) skaláris szorzatát  $\chi^{(j')}(R)$ -rel [azaz: (9.35)-öt  $\chi^{(j')}(R)^*$ -gal szorozzuk s az összes csoportelemre összegezzük], (9.33)-at felhasználva kapjuk:

$$\sum_R \chi(R) \chi^{(j')}(R)^* = \sum_R \sum_j a_j \chi^{(j)}(R) \chi^{(j')}(R)^* = h a_{j'}. \quad (9.36)$$

Így az  $a_j$  egész számokat egyértelműen megadja az

$$a_{j'} = \frac{1}{h} \sum_R \chi(R) \chi^{(j')}(R)^* \quad (9.37)$$

képlet. Hogy *adott irreducibilis ábrázolás hányszor lép fel valamely ábrázolás kiredukált alakjában, az ábrázolás karaktere* azt a (9.37) egyenlet szerint *teljesen meghatározza. Így speciálisan az irreducibilis komponensek függetlenek a kiredukálás-kor követett eljárástól.*

Látjuk azonfelül, hogy két ábrázolás ekvivalens, ha ugyanaz a karakterük. Ez azt jelenti, hogy a kiredukálás után mindketten ugyanazt az alakot öltik, így a  $\mathbf{D}^{(j)}$  ábrázolások sorrendjének erejéig egymással azonosak. Eszerint ha két ábrázolás karaktere egyenlő, ekvivalens kiredukált alakra transzformálhatók, és így maguk is ekvivalensek.

Másrésztől a *karakterek egyenlősége szükséges a két ábrázolás ekvivalenciájához. Az tehát szükséges és elegendő feltétele ekvivalenciájuknak* (vagyis annak, hogy hasonlósági transzformációval egymásba átvihetők).

Egy kiszemelt mátrixot csak akkor transzformálhatunk át valamely másikba, ha a két mátrix sajátértékei megegyeznek. Az átlósösszegek egyenlősége, azaz a sajátértékek *összegének* egyenlősége nem elégséges. Két ábrázolás esetében azonban a fenti megfontolásokból következik, hogy ha a sajátértékek összege ugyanaz mind a  $h$  megfelelő mátrixpár esetében, a megfelelő sajátértékek külön-külön is megegyeznek. Még ennél valamivel kevesebb is legendó. Minthogy az egyes ábrázolásokban az ugyanazon osztályba tartozó csoportelemek karakterei egyenlők egymással, a  $k$  számú egyenlőség:  $\chi(C_1) = \chi'(C_1)$ ,  $\chi(C_2) = \chi'(C_2)$ , ...,  $\chi(C_k) = \chi'(C_k)$  elégséges ahhoz, hogy a  $\chi$  és  $\chi'$  karakterű ábrázolások ekvivalensek legyenek.

Levezetünk még egy képletet, mely adott ábrázolásban foglalt irreducibilis komponensek számára vonatkozik. Képezzük (9.35) skalárszorzatát önmagával. Kapjuk:

$$\begin{aligned} \sum_R |\chi(R)|^2 &= \sum_R \sum_j a_j \chi^{(j)}(R) \sum_{j'} a_{j'} \chi^{(j')}(R)^* = \\ &= \sum_j \sum_{j'} h \delta_{jj'} a_j a_{j'} = h \sum_j a_j^2. \end{aligned} \quad (9.38)$$

Adott ábrázolás karakterének abszolútérték-négyzete egyenlő a csoport  $h$  rendjének és az  $a_j$  számok négyzetösszegének szorzatával, ahol  $a_j$  adja meg, hogy az egyes irreducibilis ábrázolásokat az adott ábrázolás hányszor tartalmazza. Irreducibilis ábrázolás esetében a

$$\sum_R |\chi(R)|^2 = h \quad (9.38a)$$

összeg értéke a lehető legkisebb:  $h$ ; megfordítva, ha (9.38a) teljesül, a  $\chi(R)$  karakterű ábrázolás irreducibilis, minthogy (9.38) folytán kiredukálása csak egy komponenszt szolgáltat.

Egyes esetekben a fent megadott általános tételek elégségesek az irreducibilis ábrázolások meghatározásához. Különösen hasznosak e célra a 92. és a 93. oldalon részben bebizonyított tételek, amelyek megadják az inekvivalens ábrázolások számát (az egyenlő az osztályok számával) és dimenzióik négyzetösszegét (ez a csoport rendjével egyenlő). A legtöbb esetben természetesen kiterjedt speciális vizsgálatokra van szükség.

Mint speciális esetet jegyezzük meg, hogy az *Abel*-csoportok minden eleme önmagában osztályt képez. Így egy *Abel*-csoport osztályainak száma megegyezik az elemek számával. Minthogy az összes irreducibilis ábrázolás dimenzióinak négyzetösszege egyenlő a csoport rendjével, az irreducibilis ábrázolások mindegyike egydimenziós.

Meg kell jegyezni azonfelül, hogy a faktorcsoport minden ábrázolása ábrázolása az egész csoportnak is, amint azt e fejezet kezdetén hangsúlyoztuk. Tekintsük példaként ismét három objektum szimmetrikus csoportját. Ennek a csoportnak egy invariáns alcsoportja van:  $E, D, F$ ; a megfelelő faktorcsoport rendje 2. A faktorcsoport ennél fogva *Abel*-csoport és két egydimenziós ábrázolása van. Minthogy a teljes csoportnak csak három osztálya van, ezeken kívül csak egy további irreducibilis ábrázolása lehet, és ennek kétdimenziósnak kell lennie, hogy az  $1^2 + 1^2 + 2^2 = 6 = h$  összefüggés teljesüljön.

A különböző irreducibilis ábrázolások különösen fontos szerepet játszanak a kvantummechanikában, mivel ezek az állapotok olyan rendszereinek jellemzésére használhatók fel, melyekre ugyanolyan kiválasztási szabályok érvényesek, amelyek külső hatásra azonos módon viselkednek stb. A tiszta matematika szemszögéből tekintve a fent kifejtett elmélet, amelyet S. FROBENIUS, H. BURNSIDE és I. SCHUR kezdeményezett, az algebra legszebb részeinek egyike. Az ábrázolások karakterei kapcsolatban állnak a számelmélet néhány érdekes problémájával, amelyeket itt nem tárgyalunk.

## 10. FOLYTONOS CSOPORTOK

1. Mindeddig csak véges csoportokkal foglalkoztunk, azaz olyan csoportokkal, melyek véges számú csoportelemből állnak. Három csoportposztulátumunkat (ezek: az asszociatív törvény, az egységelem és az inverz) alkalmazhatjuk végtelen csoportokra, vagyis az elemek végtelen sokaságára is. Például a háromdimenziós valós ortogonális mátrixok (a térbeli elforgatások) az objektumok olyan rendszerét képezik, amely eleget tesz a csoportposztulátumoknak, ha csak csoportműveletnek a mátrixszorzást vesszük; az objektumok rendszerében két elforgatás összetevése egyetlen elforgatást eredményez, az előbbi kettő szorzatát. Hasonló csoportot képez az összes egységnyi determinánsú háromdimenziós mátrix, vagy azok, amelyeknek a determinánsa  $\pm 1$  stb. Mindezeket a csoportokat *végtelen* csoportoknak nevezzük, szemben az előbbieken vizsgált *véges* csoportokkal.

Ha a csoportoktól az említetteken kívül más tulajdonságot nem követelnénk meg, a végtelen csoport fogalma céljaink szempontjából tekintve túl sokat foglalna magában. Például az összes egységnyi determinánsú kétdimenziós mátrix, melyeknek mind a négy eleme racionális szám, ilyen csoportot képez. Ilyen esetben azonban hiányoznának azok a folytonossági tulajdonságok, amelyeket szeretnénk feltételezni. Ezért tárgyalásunkat a végtelen csoportokról a folytonos csoportokra korlátozzuk. Valamely *folytonos csoport* olyan objektumok (csoportelemek) rendszere, amelyek bizonyos tartományban folytonosan változó paraméterek segítségével jellemezhetők. E tartományon belül a paraméterértékek minden rendszere egy-egy csoportelemet definiál; megfordítva, minden egyes csoportelemnek megfelel az adott tartományon belül a paraméterértékek egy-egy rendszere. E tartomány neve *csoporttér*; a csoportelemek és a csoporttér pontjai között egy-egyértelmű megfeleltetés áll fenn.

Az olyan csoportelemeket, amelyek paraméterei csak kevéssel különböznek egymástól, „szomszédos”-nak mondjuk. Ha a paraméter folytonosan változik, azt mondjuk, hogy a csoportelem folytonosan változik. A három csoportposztulátum érvényben marad, kiegészítve a folytonosság követelményével; eszerint megköveteljük, hogy szomszédos elemekben képezett szorzatok, valamint reciprokaik legyenek szintén szomszédosak.

Feltesszük továbbá, hogy a szorzat  $p_1(RS), p_2(RS), \dots, p_n(RS)$  paraméterei legalább is szakaszonként folytonosan differenciálható függvényei az  $R, S$  tényezők  $p_1(R), p_2(R), \dots, p_n(R)$ , valamint  $p_1(S), \dots, p_n(S)$  paramétereinek. Ugyanezt a követelményt támasztjuk a  $p_1(R^{-1}), \dots, p_n(R^{-1})$  paramétereknek az  $R$  elem paramétereitől való függésével szemben.

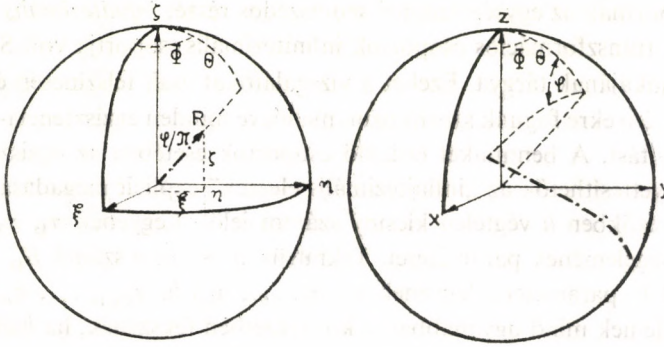
Az olyan csoportot, amelynek elemei  $n$  paraméter segítségével adhatók meg,  $n$ -paraméteres csoportnak nevezzük. A paraméterek változási tartománya lehet egyszeresen vagy többszörösen összefüggő, vagy több össze nem függő részre eshet szét. Az utóbbi esetben *vegyes folytonos csoportról* beszélünk, szemben az *egyszerűen folytonos csoportokkal*, melyek esetében a paraméterek változási tartománya összefüggő.

Tekintsük példaképpen a háromdimenziós tér elforgatásainak csoportját, a háromdimenziós forgáscsoportot. E csoport valamely elemét — egy valós háromdimenziós ortogonális mátrixot — jellemezhetjük természetesen kilenc mátrixelemének megadásával. Ezek azonban nem tekinthetők paramétereknek, minthogy nem függetlenül változnak, hanem bizonyos összefüggéseknek tartoznak eleget tenni. Másrésztől, ha az elforgatás jellemzőinek a forgástengely  $\Phi$  azimutját,  $\vartheta$  polárszögét, valamint az elforgatás  $\varphi$  szögét tekintjük, akkor minden egyes ilyen, adott tartományban ( $0 \leq \Phi \leq 2\pi, 0 \leq \vartheta \leq \pi, 0 \leq \varphi \leq \pi$ ) fekvő számhármassnak megfelel egy-egy elforgatás.<sup>1</sup>

Kivételt képez az az elforgatás, melyhez az elforgatási szög  $\varphi=0$  értéke tartozik, azaz ama elforgatás, amely abból áll, hogy nem végzünk elforgatást, hanem helyett minden változatlan marad (ez a csoport egységeleme). Ez az elforgatás felel meg minden  $\Phi, \vartheta, 0$  paraméterhármassnak, tehát a megfelelés e paraméterek és a szóban forgó csoportelem között nem egy-egyértelmű. E nehézség elkerülése céljából azt lehetne gondolni, hogy a  $\Phi, \vartheta$  paraméterek változási tartománya zérusra zsugorodik össze, ha  $\varphi=0$ . Hasonlóképpen a  $\vartheta=0$  esetben  $\Phi=0$  irándó. Ekkor az elforgatások és a paraméterhármassok között egy-egyértelmű a megfelelés. Tekintsük azonban az elforgatások folytonos seregét, mind kisebb szöggel, tetszőleges tengely körül: a  $\Phi=\Phi_0, \vartheta=\vartheta_0, \varphi=t\varphi_0$  paraméterekkel jellemzett elforgatásokat, ahol  $t$  folytonosan változik. Ha  $t=0$  mellett a  $\Phi, \vartheta$  szögeknek is zérussal kell egyenlőknek lenniök, diszkontinuitás keletkezik. A naív követelmény, hogy  $\varphi=0$  mellett  $\Phi=0, \vartheta=0$  legyen, eszerint nem alkalmazható. A nehézség elkerülésére más módot kell keresnünk.

A legalkalmasabb paraméterek, úgy látszik, a  $\varphi/\pi, \vartheta, \Phi$  polárkoordinátákkal jellemzett pont  $\xi, \eta, \zeta$  Descartes-koordinátái:  $\xi=(\varphi/\pi) \sin \vartheta \cos \Phi, \eta=(\varphi/\pi) \sin \vartheta \sin \Phi$  és  $\zeta=(\varphi/\pi) \cos \vartheta$ . Az azonos transzformáció, a csoport egységeleme, mely korábban a  $\Phi, \vartheta, 0$  paramétereknek felelt meg, most egyetlen pontnak felel meg, a koordináta-rendszer  $\xi=\eta=\zeta=0$  origójának.

<sup>1</sup> A paramétertér valamely  $R$  pontja nem az elforgatás operációjának felel meg, hanem eme operáció eredményének. Eszerint az elforgatást a gömb kezdeti és végső helyzete teljesen meghatározza. Ha az operációt kívánjuk leírni, vagyis azt az utat, amely mentén az elforgatás végbemej, a gömb minden közbülső helyzetét meg kell adnunk. Eszerint az elforgatásnak mint operációnak a leírásához egy görbét kell megadnunk a paramétertérben, azaz: az „elforgatások” egy  $R(t)$  folytonos seregét (azt a módot, ahogy a végső helyzetet elértük);  $R(t)$  a  $t=0$  helyen az  $R(0)$  értéket veszi fel és  $t=1$  mellett  $R(1)=R$ -be megy át.



1. ábra

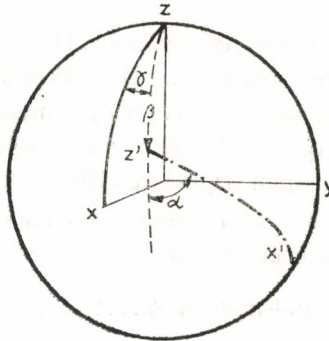
*A bal oldali ábrán a nyíl végpontja annak a forgatásnak felel meg, amely a folytonos ívet jobboldali „pont—vonal” ívbe viszi át*

A paraméterteret pontjai és az elforgatások között fennálló megfelelést az 1. ábra szemlélteti. A  $\xi\eta\zeta$ -térbeli egységgömbben minden pontnak megfelel egy-egy elforgatás.

Ebben a paraméterezésben szintén fellép egy kivétel, ahol is a csoportelemek és a paraméterhármassok között nem egy-egyértelmű a megfelelés. A gömbfelület két szemközt fekvő pontját azonosítanunk kell egymással és a  $\xi\eta\zeta$ -térbeli gömbfelület egy pontjáról a szemben levőre való áttérés nem tekintendő az út diszkontinuitásának.

A paraméterteret így többszörösen összefüggővé tettük; ezáltal a csoportelemek és a paraméterteret pontjai között egy-egyértelművé vált a megfelelés. Ezek a paraméterek tehát különösen előnyösek a forgáscsoportra vonatkozó elvi megfontolásokban.

Ez természetesen semmiképpen nem zárja ki azt, hogy formális számításokban más paramétereket részesítsünk előnyben (pl. az Euler-féle szögeket, 2. ábra), melyek esetében a megfelelés nem egy-egyértelmű, amelyek segítségével azonban az explicit formulák egyszerűbben felírhatók.



2. ábra

*Az 1. ábra ama forgatását, amely a folytonos ívet a „pont—vonal” ívbe viszi át az  $\alpha$ ,  $\beta$  és  $\gamma$  Euler- szögekkel is jellemezhetjük*

2. A csoportnak az egységelemmel szomszédos részét *infinitezimális csoportnak* nevezzük. A transzformációs csoportok infinitezimális csoportja volt SOPHUS LIE<sup>2</sup> alapvető munkájának tárgya. Ezeket a vizsgálatokat csak felszínesen érinthetjük. Az alapvető tényekre fogunk szorítkozni, mellőzve minden egzisztencia- és konvergenciabizonyítást. A bennünket érdeklő csoportok esetében az egzisztenciabizonyítások helyettesíthetők az „infinitezimális elemek” explicit megadásával.

A következőkben  $h$  végtelen kicsiny számot jelöl. Legyenek  $\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_n$  a csoport egységelemének paraméterei. Tekintsük most az  $n$  számú  $F_1, F_2, \dots, F_n$  elemet, ahol  $F_k$  paraméterei legyenek  $\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_k + h, \pi_{k+1}, \dots, \pi_n$ . Az  $E, F_k, F_k^2, F_k^3, \dots$  elemek mind ugyanabban a környezetben fekszenek, ha  $h$  elég kicsiny, s így a csoportelemek majdnem folytonos seregét képezik. Ahhoz, hogy a csoport egységelemétől meglehetősen távolra eljussunk,  $F_k$ -nak igen magas hatványait kell vennünk. A (kommutáló!) csoportelemek egy ilyen egyparaméteres családja valamely véges csoport esetében az egyes csoportelemek periódusának felel meg.

*Valamely egyszerűen folytonos, egyparaméteres csoport mindig Abel-csoport, mivel egyetlen periódusból áll.*

A háromdimenziós forgáscsoportnak az 1. ábrán szemléltetett paraméterezésében az egység-elem paraméterei  $\xi = \eta = \zeta = 0$ ; a három infinitezimális elem:  $\{h, 0, 0\}$ ,  $\{0, h, 0\}$  és  $\{0, 0, h\}$ ; ezek a három koordinátatengely körül végtelen kicsiny szöggel végrehajtott elforgatások.

Tekintsük most az  $F_1^{p_1} F_2^{p_2} \dots F_n^{p_n}$  elemekből álló  $n$ -paraméteres sereget. Szorít-kozzunk  $h$ , valamint  $p_1, p_2, \dots, p_n$  ama értékeire, amelyekre e család elemei az egységelem szomszédságába esnek; ezek az elemek az egész infinitezimális csoportot felölelik, mivel az  $n$ -paraméteres sereget alkot. Célszerű, legalábbis az infinitezimális csoportra vonatkozóan, a  $p_1, p_2, \dots, p_n$  számokat paraméterekként bevezetni. Az egységelem eme  $n$  paramétere zérus; az infinitezimális csoport elemeinek paraméterei igen kicsinyek.

*Az infinitezimális csoport elemei felcserélhetők.* Ha az  $R, S$  tényezők paraméterei egy kicsiny  $\varepsilon$  szám nagyságrendjébe esnek, akkor  $RS$  és  $SR$  paramétereinek különbsége  $\varepsilon^2$  nagyságrendű. Tekintsük az  $R(t)$  és  $S(t')$  elemeket, melyeknek paraméterei  $tr_1, tr_2, \dots, tr_n$ , ill.  $t's_1, t's_2, \dots, t's_n$ , ahol  $t$  és  $t'$  folytonos változók. Fennáll:  $E = R(0) = S(0)$ ;  $t$  és  $t'$  az  $\varepsilon$  szám nagyságrendjébe esik. Az  $R(t)S(t')$  és  $S(t')R(t)$  elemek paramétereit fejtsük  $t$  és  $t'$  szerint *MacLaurin*-sorba. Az  $R(t)S(t')$  és  $S(t')R(t)$  elemek  $n$  paraméterének sora az

$$u_1 + tv_1 + t'w_1 + \dots; \quad u_2 + tv_2 + t'w_2 + \dots; \quad \dots; \quad u_n + tv_n + t'w_n + \dots;$$

<sup>2</sup> S. LIE: Vorlesungen über kontinuierliche Gruppen mit geometrischen und anderen Anwendungen (G. SCHEFFERS, ed.), Teubner, Leipzig, 1893.

ill.

$$\bar{u}_1 + t\bar{v}_1 + t'\bar{w}_1 + \dots; \quad \bar{u}_2 + t\bar{v}_2 + t'\bar{w}_2 + \dots; \quad \dots; \quad \bar{u}_n + t\bar{v}_n + t'\bar{w}_n + \dots$$

alakú.

Abból a célból, hogy  $u$  és  $\bar{u}$  értékét meghatározzuk, legyen  $t=t'=0$ . Ekkor mind az  $R(0)S(0)$ , mind pedig az  $S(0)R(0)$  szorzat egyenlő  $E$ -vel, és az  $u, \bar{u}$  értékek valamennyien egyenlők zérussal:

$$u_1 = u_2 = \dots = u_n = \bar{u}_1 = \bar{u}_2 = \dots = \bar{u}_n = 0.$$

A  $v, \bar{v}$  számok meghatározásához csak  $t'$  értékét választjuk zérusnak; ekkor  $R(t)S(0) = R(t)E = R(t)$  és  $S(0)R(t) = ER(t) = R(t)$ . Ennélfogva  $v_1 = \bar{v}_1 = r_1; v_2 = \bar{v}_2 = r_2; \dots; v_n = \bar{v}_n = r_n$ . Hasonlóképpen  $t=0$  választása mellett kapjuk:  $w_1 = \bar{w}_1 = s_1; w_2 = \bar{w}_2 = s_2; \dots, w_n = \bar{w}_n = s_n$ . Ez azt mutatja, hogy a két szorzat paraméterei az eddig tekintetbe vett tagokig terjedően megegyeznek. A különbség csak a  $t^2$ -et,  $t't$ -t vagy  $t'^2$ -et tartalmazó tagokban jelentkezik, s ezek mind  $\varepsilon^2$  rendűek.

Az infinitezimális elemek felcserélhetősége a másodrendű tagokig azon a tényen alapszik, hogy ha  $R$  tetszőleges és  $S=E$ , valamint  $S$  tetszőleges és  $R=E$ , ezek egzaktul felcserélhetők. Ha  $R$  csak kevéssel különbözik  $E$ -től, a felcserélhetőség még mindig teljesül közelítőleg; ugyanez igaz  $S \sim E$  esetén is. De ha  $R \sim E$ , valamint  $S \sim E$ , a felcserélhetőség különösen jól teljesül.

Ez a tétel igen egyszerű alakot ölt mátrixcsoportok esetében. Az egységelem szomszédságában a csoportelemek  $\mathbf{1} + \varepsilon \mathbf{a}$  alakúak. Ekkor

$$(\mathbf{1} + \varepsilon \mathbf{a})(\mathbf{1} + \varepsilon \mathbf{b}) = \mathbf{1} + \varepsilon(\mathbf{a} + \mathbf{b}) + \varepsilon^2 \mathbf{ab}$$

és

$$(\mathbf{1} + \varepsilon \mathbf{b})(\mathbf{1} + \varepsilon \mathbf{a}) = \mathbf{1} + \varepsilon(\mathbf{b} + \mathbf{a}) + \varepsilon^2 \mathbf{ba}.$$

Ezek csak az  $\varepsilon^2$ -et tartalmazó tagokban különböznek.

A paraméterek fenti választása, mely az  $F_1^{p_1} F_2^{p_2} \dots F_n^{p_n}$  elemet a  $p_1, p_2, \dots, p_n$  paramétereknek felelteti meg, a következő speciális tulajdonsággal rendelkezik: az infinitezimális csoport két elemének szorzatához tartozó paramétereket, a magasabb rendű tagoktól eltekintve, egyszerűen az egyes tényezők paramétereinek *összeadása* útján kapjuk meg.

3. A vegyes folytonos csoportok esetében azok az elemek, amelyek az  $E$  egység-elemből kiindulva folytonosan megkaphatók, alcsoportot képeznek, mely egyszerűen folytonos. A kijelentés, hogy valamely elem folytonosan megkapható az egységelemből kiindulva, azt fejezi ki, hogy létezik az elemeknek egy  $R(t)$  folytonos serege, mely az  $R(0)=E$  elemmel kezdődik és — a  $t=1$  érték mellett — az  $R(1)=R$  elemmel ér véget. Ha  $R$  és  $S$  e sokaság két eleme és  $R(t)$  és  $S(t)$  a megfelelő folytonos utak, akkor az  $R(1)S(1)=RS$  szorzat szintén folytonosan kapható meg az egységelemből. Útnak  $R(t)S(t)$  választható. Ugyanez áll  $R$  reciprokára is; a megfelelő út  $R(t)^{-1}$ . Az egységelemből kiindulva folytonosan elérhető elemek ennél-

fogva alcsoportot alkotnak, mely egyszerűen folytonos, minthogy a paraméterter megfelelő tartománya egyszerűen összefüggő.

Az egységelemből folytonosan elérhető elemek alkotta alcsoport a vegyes folytonos csoportnak *invariáns alcsoportja*. Ha ugyanis  $R$  folytonosan elérhető az azonosságból kiindulva, akkor az  $X^{-1}RX$  elem is elérhető ily módon, mondjuk az  $X^{-1}R(t)X$  út mentén haladva. Eme invariáns alcsoport mellékosztályai: a paraméterter többi, egymással össze nem függő része. A faktorcsoport eszerint lehet véges csoport, melynek rendje egyenlő a paraméterter egymással össze nem függő tartományainak számával.

A következő megfontolások céljára vezessük be az  $r_1, r_2, \dots, r_n$  paraméterekkel jellemzett *csoportelem* jelölésére az  $\{r_1, r_2, \dots, r_n\}$  szimbólumot. E jelölés mellett fennállnak a  $p_k(\{r_1, r_2, \dots, r_n\})=r_k, \{p_1(R), p_2(R), \dots, p_n(R)\}=R$  azonosságok.

4. A folytonos csoportok ábrázolásait pontosan úgy definiáljuk, mint a véges csoportokét. A csoport egyes elemei és a  $\mathbf{D}(R)$  mátrixok között megfelelés áll fenn, mely eleget tesz a  $\mathbf{D}(R)\mathbf{D}(S)=\mathbf{D}(RS)$  feltételnek. Ezt csupán egyetlen követelménnyel egészítjük ki: megkívánjuk, hogy az ábrázolás folytonos legyen. Eszerint ha  $R, S$  szomszédos csoportelemek, akkor a  $D(R)_{\lambda\lambda}$  mátrixnak mind az  $l^2$  mátrix-eleme infinitezimálisan különbözik csupán  $D(S)_{\lambda\lambda}$  megfelelő mátrixelemeitől. Itt is az el nem tűnő determinánsú ábrázolásokra korlátozódunk.

A véges csoportok ábrázolásaira érvényes tételeket most kiterjesztjük a folytonos csoportok ábrázolásaira. Abból a tényből indulunk ki, hogy első négy tételünkhöz, speciálisan a (9.30) és (9.31) ortogonalitási összefüggésekhez csak a csoporttulajdonságokat használtuk fel, nevezetesen azt, hogy képezhető a  $\sum_R J_R$  összeg, melyre fennáll

$$\sum_R J_R = \sum_R J_{RS}; \quad (10.1)$$

itt összegezni valamennyi csoportelemre kell. A fenti képletben  $J_R$  tetszőleges számokat (vagy mátrixokat) jelöl, melyeket az egyes  $R$  csoportelemeknek feleltetünk meg, és a (10.1) egyenlet tetszőleges  $S$  csoportelemre fennáll. A (10.1) alatt felírt két összegben ugyanazok a tagok lépnek fel, csak különböző sorrendben.

A  $\sum_R \mathbf{D}(R)\mathbf{D}(R)^\dagger$  összeg segítségével, mely a mondott szerkezetű, bizonyítottuk be (9. fejezet, 1. tétel), hogy tetszőleges ábrázolás unitérré tehető. Az ortogonalitási összefüggést is (9. fejezet, 4. tétel) ilyen szerkezetű összeg, a  $\sum_R \mathbf{D}^{(j)}(R)\mathbf{X}\mathbf{D}^{(j)}(R^{-1})$  kifejezés segítségével igazoltuk. A 2. és 3. tétel természetüket tekintve inkább mátrixelméleti tételek. Ezek kiterjesztése nem igényel új csoporttulajdonságokat.

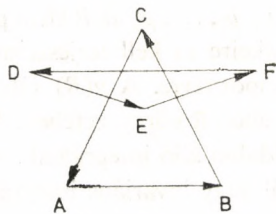
Ha a folytonos csoportok esetében definiálni tudnánk valamit, ami a  $\sum_R J_R$  összeghez hasonló (ennek természetesen az egész paramétertartományra kiterjesztett integrálnak kellene lennie), akkor a véges csoportok ábrázoláselméletének négy tételét átvihetnénk a folytonos csoportokra.



5. Véges csoportok esetében a (10.1) egyenlet azon a tényen alapszik, hogy az  $SE, SA_2, SA_3, \dots, SA_h$  sorozat tetszőleges  $S$  mellett a sorrendtől eltekintve azonos az  $E, A_2, A_3, \dots, A_h$  sorozattal. A következő észrevételt tesszük, mely a véges csoportok esetében nyilvánvaló: ha a csoportot a folytonos esethez hasonlóan paraméterezzük, e két sorozat olyan tulajdonságú, hogy a paramétertér minden egyes térfogatelemének (a „térfogatelemek” ez esetben egyszerűen pontok, melyek a paraméterek által felvett diszkrét értékek halmazát szemléltetik) azonos számú csoportelem felel meg (egy). Ennélfogva annak a lehetősége, hogy a (10.1) egyenletet kiterjesszük a folytonos esetre, attól függ, hogy általánosításunkban meg tudjuk-e őrizni ezt a tulajdonságot.

A 3. ábrán bemutatjuk az  $F$  elemmel balról való szorzás hatását a három objektum permutációi alkotta (7.E.1) csoport összes elemére. Ez a szorzás egy-egy elemet annak a nyílnak a végpontjában álló elembe visz át, mely a szóban forgó elemtől indul ki. Az ábra szemlélteti azt a tényt, hogy az elemek  $FR$  halmaza azonos az elemek  $R$  halmazával, ha ez a halmaz csoport. Ugyanez nem csak  $F$ -re érvényes, hanem a csoport minden  $S$  elemére is. A (10.1) egyenlet közvetlen következménye ennek a ténynek.

Ugyanezt az egyenletet azonnal felírhatnánk folytonos csoportokra, ha bennük kiválaszthatnánk az elemek hasonló tulajdonságú halmazait, és ha eme halmazoknak olyan sorozata lenne választható, hogy a csoportelemek sűrűsége mindenütt egyre növekszik, amint e halmazok sorozatában egyre tovább és tovább előre lépünk. Más szavakkal, a (10.1) összefüggés érvényességét könnyen megállapíthatnánk a folytonos csoportokra vonatkozóan, ha meg lehetne adni olyan véges alcsoportok sorozatát, melyeknek elemei mind sűrűbb és sűrűbb sokaságot képeznek a csoporttérben. Ez sajnos nem lehetséges (az *Abel*-csoportok esetét kivéve); a folytonos csoportokat általában nem tekintjük véges csoportok határesetének. Így például a háromdimenziós forgáscsoport legnagyobb olyan alcsoportja, melynek elemei egyenletesen oszlanak el a csoporttérben, az ikozaéder szimmetriacsoportja, amelynek csupán 60 eleme van. (A háromdimenziós forgáscsoportnak



3. ábra

Három objektum permutációs csoportjának (7.E.1) elemei az  $F$  elemmel szorozva balról az ábrán látható módon mennek át egymásba

vannak olyan alcsoporthalmozatok, amelyeknek nagyobb a rendje, mint 60. Ezek azonban a sík szabályos sokszögeinek szimmetriacsoportjai és a csoportteret korántsem töltik ki egyetlenesen.)

Mivel a legtöbb folytonos csoport nem tekinthető véges csoportok határesetének, a (10.1) alatt álló összegek analogonját más módon kell megkeresnünk. A csoportteret töltsük ki sűrűn pontokkal. Jelölje ezeket  $R_1, R_2, \dots$ . Általában lehetetlen elérni, hogy az  $SR_1, SR_2, \dots$  pontok halmaza azonos legyen az  $R_1, R_2, \dots$  pontok halmazával minden  $S$  elemre, melyek maguk is sűrűn helyezkednek el a csoporttérben. Az  $R_1, R_2, \dots$  pontok azonban elhelyezhetők a csoporttérben oly módon, hogy az  $SR_1, SR_2, \dots$  pontok *sűrűsége* a csoporttér minden részében ugyanolyan legyen, mint az  $R_1, R_2, \dots$  pontok *sűrűsége* a csoporttérnek ugyanabban a részében. Ez lehetővé teszi számunkra, hogy a csoportra való integrálást definiáljunk, amelyre fennáll a (10.1) egyenlet analogonja. Így tehát a 3. ábrán látható képnek most egy másik kép lép a helyébe; most a nyilak végpontjai, melyek az  $SR_1, SR_2, \dots$  pontokat szemléltetik, nem azonosak az  $R_1, R_2, \dots$  pontokkal, amelyekből kiindulnak a nyilak. A nyilak végpontjainak a sűrűsége azonban mindenütt egyenlő lesz az  $R_1, R_2, \dots$  kiindulópontok sűrűségével. Ilyen „invariáns eloszlás” mellett a paramétertérben értelmezett tetszőleges folytonos  $J(R)$  függvényre fennáll a

$$\sum_i J(R_i) = \sum_i J(SR_i) \quad (10.2)$$

egyenlőség (ahol  $R$  végigfut az egész csoporttérben), minthogy (10.2) jobb oldalán a paramétertérnek az  $SR_i = Q_i$  pont környezetébe eső térfogatelemében ugyanannyi a csoportelemek száma, mint amennyi az  $R_i$  csoportelemek száma a megfelelő térfogatelemben.

Analitikailag célszerű (10.2) bal oldalán az összeget az

$$\int J(R) dR = \int J(R) g(R) dp_1 dp_2 \dots dp_n \quad (10.2a)$$

integrállal helyettesíteni, ahol  $p_1, p_2, \dots, p_n$  az  $R$  elem paraméterei, és az integrálást a paraméterek mindazon értékeire ki kell terjeszteni, amelyek csoportelemeket definiálnak, azaz az egész csoporttérre. A  $g(R)$  súlyfüggvény egyszerűen az  $R_i$  pontok sűrűsége a (10.2) összegben  $R$  környezetében. A (10.2a) egyenlet bal oldala rövidített írásmódja a jobb oldalon álló integrálnak. Az integrál neve: a csoporttérre képezett *Hurwitz-integrál* vagy *invariáns integrál*. A  $g(R)$  sűrűség invariáns voltából következik, hogy

$$\int J(SR) dR = \int J(R) dR \quad (10.2b)$$

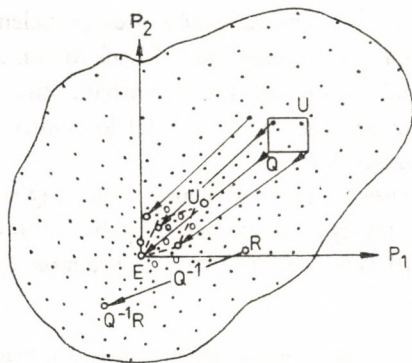
fennáll minden, a csoporttérén értelmezett folytonos  $J$  függvényre (a csoportparaméterek minden folytonos függvényére) és minden  $S$  csoportelemre.

Még hátravan, hogy megmutassuk: valóban van ilyen invariáns sűrűség a csoporttérben, és hogy meghatározzuk ezt a sűrűséget. A fordított utat fogjuk végigjárni: először meghatározzuk a sűrűséget feltételezve, hogy az invariáns, azután kimutatjuk a kapott eloszlás invariáns voltát. Mielőtt hozzálátnánk az invariáns eloszlás meghatározásához, hasznos megjegyezni, hogy az csupán egy tényező erejéig határozható meg; nyilvánvaló, hogy ha a  $g(R)$  sűrűség invariáns, annak minden többszöröse is invariáns. A sűrűség értéke adott pontban tetszés szerint választható; fel fogjuk tenni, hogy az egységelemnek megfelelő pontban a sűrűség  $g(E)$  értéke egyenlő  $g_0$ -val.

Vegyünk most szemügyre egy kicsiny  $U$  térfogatelemet a  $Q$  csoportelem környezetében (lásd a 4. ábrát). Ha  $e$  térfogatelem nagyságát  $V$  jelöli, akkor az összegezési pontok száma abban  $g(Q)V$ . Alkalmazzuk most ama posztulátumunkat, hogy az eloszlás a  $Q^{-1}$ -gyel balról elvégzett szorzással szemben invariáns. Az  $U$  térfogatelemet ez a szorzás az  $U_0$  térfogatelembe viszi át (4. ábra), amely az összes  $Q^{-1}R$  pontot tartalmazza, ahol  $R$  benne van  $U$ -ban. Jelöljük  $U_0$  térfogatát  $V_0$ -val; ekkor  $U_0$ -ban az összegezési pontok számának  $g_0V_0$ -val kell egyenlőnek lennie, minthogy  $U_0$  az egységelem szomszédságában van. A  $Q^{-1}R$  összegezési pontok száma ugyan ezen térfogatelemben megegyezik azonban  $g(Q)V$ -vel, így az invariancia követelménye a  $g(Q)V = g_0V_0$  vagy a

$$g(Q) = (V_0/V)g_0$$

egyenlőséget szolgáltatja. A  $g(Q)$  súlyfüggvény arányos azzal a nagyítással, amit a  $Q$  környezetében levő térfogatelem szenved, amikor azt a  $Q^{-1}$  elemmel balról való szorzás az egységelem környezetébe projiciálja.



4. ábra

A pöttyök a (10.2)-ben szereplő  $R_i$  összegezési pontok; karikák jelölik azt, hogy az  $R_i$ -k  $Q^{-1}$ -gyel balról szorozva hová kerülnek. Az egységelemnél a pontok és karikák sűrűsége egyforma

A  $V_0/V$  viszony kiszámítása céljából feltesszük, hogy  $U$  ama csoportelemekből áll, amelyeknek az első paramétere  $q_1$  és  $q_1 + \Delta_1$ , a második paramétere  $q_2$  és  $q_2 + \Delta_2$ , ..., az  $n$ -edik paramétere pedig  $q_n$  és  $q_n + \Delta_n$  közé esik, ahol  $q_1, q_2, \dots, q_n$  a  $Q$  elemnek a paraméterei. Ekkor  $U$  térfogata

$$V = \Delta_1 \Delta_2 \dots \Delta_n.$$

Ha feltesszük, hogy  $E = Q^{-1}\{q_1, q_2, \dots, q_n\}$  paraméterei mind egyenlők zérussal, a  $\Delta$ -kban magasabb rendű tagoktól eltekintve az  $U_0$  tartomány térfogata

$$V_0 = \begin{vmatrix} p_1(Q^{-1}\{q_1 + \Delta_1, q_2, \dots, q_n\}) \dots p_n(Q^{-1}\{q_1 + \Delta_1, q_2, \dots, q_n\}) \\ \vdots \\ p_1(Q^{-1}\{q_1, q_2, \dots, q_n + \Delta_n\}) \dots p_n(Q^{-1}\{q_1, q_2, \dots, q_n + \Delta_n\}) \end{vmatrix} \\ = \Delta_1 \Delta_2 \dots \Delta_n \frac{\partial [p_1(Q^{-1}\{r_1, \dots, r_n\}), p_2(Q^{-1}\{r_1, \dots, r_n\}), \dots, p_n(Q^{-1}\{r_1, \dots, r_n\})]}{\partial [r_1, r_2, \dots, r_n]}.$$

Az utóbbi kifejezés az  $r_1 = p_1(Q) = q_1, r_2 = p_2(Q) = q_2, \dots, r_n = p_n(Q) = q_n$  helyen veendő. Felidézzük, hogy  $\{q_1, \dots, q_n\}$  a  $q_1, \dots, q_n$  paramétereknek megfelelő csoportelem és  $p_i(R)$  az  $R$  csoportelemnek megfelelő  $i$ -edik paraméter. Amikor  $q_i$  szerint differenciálunk, a  $Q$  csoportelemet állandónak kell tekinteni; csupán  $r_i$ -k a változók.<sup>3</sup>

Ez az egyenlőség  $g(Q)$  számára a

$$g(Q) = g_0 \frac{\partial [p_1(Q^{-1}\{q_1, \dots, q_n\}), \dots, p_n(Q^{-1}\{q_1, \dots, q_n\})]}{\partial [q_1, \dots, q_n]} \quad (10.3)$$

explicit alakot adja; a *Jacobi*-determináns a  $q_1 = p_1(Q), \dots, q_n = p_n(Q)$  helyen veendő. Ezt az alakot kell elfogadnunk a  $Q$ -beli sűrűsége vonatkozásán, ha azt kívánjuk, hogy  $R_i$ -nek  $Q^{-1}R_i$ -vel való helyettesítése a csoportelemek számát az egységelem szomszédságában hagyja változatlanul. Megfordítva, a képlet oly módon is felfogható, hogy az megadja a sűrűséget a  $Q$  pontban, miután  $E$ -t  $QE$ -vel helyettesítettük, feltéve, hogy az egységelemnek megfelelő pontban a sűrűség értéke  $g_0$  volt a helyettesítés elvégzése előtt.

Ha az  $R_i$  pontok sűrűségét (10.3) adja meg minden  $Q$  pontban, a  $Q^{-1}R_i$  pontok sűrűsége  $g_0$  lesz az egységelem szomszédságában minden  $Q$ -ra. Ezenkívül a  $QR_i$  pontok sűrűségét (10.3) adja meg  $Q$  szomszédságában, ha az  $R_i$  pontoknak a

<sup>3</sup> Az  $r_k$ -k helyére a  $p_k(Q)$ -kat a differenciálás elvégzése után helyettesítjük be. A (10.3) egyenlet a „ $\frac{\partial}{\partial x} f(x, y)$  az  $x=y$  helyen” típusú kifejezés.

Ha pl.  $f(x, y) = x^2 y^3$ , akkor  $\frac{\partial f(x, y)}{\partial x} = 2y^3$ , ha  $x=y$ .

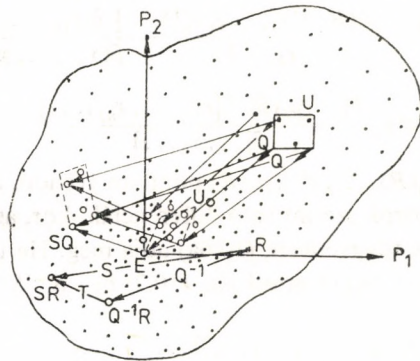
sűrűsége  $g_0$  az  $E$  egységelem környezetében, mivel az  $R_i \rightarrow QR_i$  transzformáció csupán visszaviszi az egyes pontokat oda, ahonnan azok idekerültek. Ugyanez érvényes minden  $Q$ -ra is. Meg kell még mutatni, hogy az  $R_i$  pontok sűrűségét (10.3) adja meg minden  $T = SQ$  pontban, ha az  $R_i$  pontok sűrűsége (10.3)-mal egyenlő minden  $Q$  pontban. Ennek igazolásához az  $S$  transzformációt felbontjuk két tényezőre:  $S = (SQ)Q^{-1}$ . Az első megjegyzésnek megfelelően a  $Q^{-1}R_i$  pontok sűrűsége  $g_0$  lesz az egységelem környezetében. Így a  $Q^{-1}R_i$  eloszlásra a második megjegyzés alkalmazható. Ezt oly módon tesszük meg, hogy  $Q$ -t  $SQ = T$  -vel helyettesítjük; azt találjuk, hogy az  $(SQ)Q^{-1}R_i$  pontok sűrűségét (10.3) adja meg. A szorzás asszociatív törvénye folytán az  $(SQ)Q^{-1}R_i$  pontok megegyeznek az  $SR_i$  pontokkal. Megmutattuk tehát, hogy e pontok sűrűségét (10.3) adja meg a  $T$  tetszőleges pontban, ha az  $R_i$ -k sűrűségét ugyanazon egyenlet adja meg. Az 5. ábra szemlélteti ezt a bizonyítást, mely — amint azt az olvasó észreveheti — a szorzás asszociatív törvényén alapszik.

Megjegyzendő, hogy ha  $J(R)$  sehol sem (egyetlen elemre sem) negatív, akkor (10.2a) csak abban az esetben tűnik el, ha  $J(R)$  mindenütt zérus. Ez a körülmény lényeges az előző fejezet első tételének újból történő levezetéséhez.

Tekintsük most a Hurwitz-féle invariáns integrál explicit alakját, s igazoljuk még egyszer közvetlen számítással, hogy a (10.3) alatt definiált sűrűségfüggvény választása mellett a (10.2b) összefüggés ténylegesen azonossággá válik. A (10.2b) integrál jobb oldalán álló integrál részletesen

$$\int J(R) dR = \int \dots \int J(\{r_1, \dots, r_n\}) g(\{r_1, \dots, r_n\}) dr_1 \dots dr_n, \quad (10.4)$$

ahol az integrálást ki kell terjeszteni a paraméterek egész változási tartományára.



5. ábra

Az ábra azt mutatja, hogy a 4. ábra módszerével hogyan bontható fel  $R$ -nek  $SR$ -rel történő helyettesítése két lépésre: az  $R$ -nek  $Q^{-1}R$ -rel és a  $Q^{-1}R$ -nek  $SQ$ -rel történő helyettesítésére

Megmutatjuk, hogy

$$\begin{aligned} \int J(R) dR &= \int \dots \int J(\{r_1, r_2, \dots, r_n\}) g(\{r_1, r_2, \dots, r_n\}) dr_1 \dots dr_n = \\ &= \int J(SR) dR = \int \dots \int J(S \cdot \{r_1, r_2, \dots, r_n\}) g(\{r_1, r_2, \dots, r_n\}) dr_1 \dots dr_n \end{aligned} \quad (10.5)$$

igaz minden  $S$  elemre, feltéve, hogy  $g(R)$ -et (10.3) adja meg.

Először új változókat vezetünk be a (10.5) jobb oldalán álló integrálba; az új változók az

$$X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\} = SR = S \cdot \{r_1, r_2, \dots, r_n\}$$

szorzat  $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$  paraméterei. Azaz

$$x_k = p_k(S \cdot \{r_1, r_2, \dots, r_n\}), \quad (10.6)$$

$$r_k = p_k(S^{-1} \cdot \{x_1, x_2, \dots, x_n\}). \quad (10.6a)$$

Az integrációs tartomány nem változik, mivel  $SR$  ugyanúgy befutja az egész csoportot, amint azt  $R$  tette. Ily módon kapjuk:

$$\begin{aligned} \int J(SR) dR &= \int \dots \int J(S \cdot \{r_1, r_2, \dots, r_n\}) g(\{r_1, r_2, \dots, r_n\}) dr_1 \dots dr_n = \\ &= \int \dots \int J(\{x_1, x_2, \dots, x_n\}) g(R) \frac{\partial(r_1, r_2, \dots, r_n)}{\partial(x_1, x_2, \dots, x_n)} dx_1 \dots dx_n, \end{aligned}$$

ahol  $R$  és az  $r_i$  paraméterek az  $x_i$  új változók függvényeinek tekintendők, (10.6a)-nak megfelelően. Ha most  $g(R)$  kifejezését a (10.3) egyenletből vesszük, az integrandus két utolsó tényezőjét egybeolvaszthatjuk az implicit függvények *Jacobi*-determinánsára vonatkozó tételnek megfelelően:<sup>4</sup>

$$\begin{aligned} g_0 \frac{\partial[\dots p_k(R^{-1}\{r_1, \dots, r_n\}) \dots]}{\partial[\dots r_k \dots]} \frac{\partial(r_1, \dots, r_n)}{\partial(x_1, \dots, x_n)} &= \\ = g_0 \frac{\partial[\dots p_k(R^{-1}\{r_1, \dots, r_n\}) \dots]}{\partial[\dots x_k \dots]} \end{aligned} \quad (10.7)$$

Ez a kifejezés az  $r_1 = p_1(R), \dots, r_n = p_n(R)$  pontban veendő, ahol  $R^{-1}$ -et konstansnak tekintjük az  $x_i$  változók szerint való differenciáláskor, az  $r_k$  paramétereket pedig, mint az  $x_i$  változók függvényeit, (10.6a) adja meg. Ha tehát  $\{r_1, r_2, \dots, r_n\} = S^{-1} \cdot \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ -et behelyettesítjük (10.7)-be,  $R^{-1}S^{-1} = X^{-1}$  folytán kapjuk:

$$g_0 \frac{\partial[\dots p_k(X^{-1}\{x_1, \dots, x_n\}) \dots]}{\partial[\dots x_k \dots]} = g(\{x_1, \dots, x_n\}).$$

<sup>4</sup> Ha (10.7) fennáll  $r_k$  tetszőleges értékeire,  $r_k = p(R)$  mellett szintén fennáll; (10.3)-hoz éppen erre van szükségünk.

Ez az<sup>5</sup>  $x_1=p_1(X), \dots, x_n=p_n(X)$  pontban veendő. Eszerint a (10.5) egyenlet jobb oldala valóban megegyezik a bal oldallal, eltekintve az integrációs változók jelölésétől.

A (10.3) kifejezés átalakítható, felhasználva a  $Q^{-1} \cdot \{q_1, q_2, \dots, q_n\} = \{e_1, e_2, \dots, e_n\} = E$  egyenletet: a  $q$  változók helyett új  $e$  változókat vezetünk be; pillanatnyilag feltételezzük, hogy ezek szabadon változhatnak (míg  $Q$  konstans csoportelem). Az implicit függvények *Jacobi*-determinánsára vonatkozó tétel alapján kapjuk:

$$\frac{\partial[\dots p_k(\{e_1, e_2, \dots, e_n\}) \dots]}{\partial[\dots e_k \dots]} = \frac{\partial[\dots p_k(Q^{-1}\{q_1, \dots, q_n\}) \dots]}{\partial[\dots q_k \dots]} \frac{\partial[\dots q_k \dots]}{\partial[\dots e_k \dots]},$$

ahol a  $q_k$  paraméterek az  $e_k$  paraméterektől  $q_k=p_k(Q\{e_1, e_2, \dots, e_n\})$  szerint függenek. Minthogy  $p_k(\{e_1, e_2, \dots, e_n\})=e_k$ , a bal oldal egyszerűen egyenlő eggyel, s a  $q_k$ -kat az  $e_k$ -kkal kifejezve kapjuk:

$$\begin{aligned} \frac{\partial[\dots p_k(Q^{-1}\{q_1 \dots q_n\}) \dots]}{\partial[\dots q_k \dots]} &= \left[ \frac{\partial(\dots q_k \dots)}{\partial(\dots e_k \dots)} \right]^{-1} = \\ &= \left[ \frac{\partial[\dots p_k(Q\{e_1 \dots e_n\}) \dots]}{\partial[\dots e_k \dots]} \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (10.8)$$

A bal oldalon álló kifejezésnek a  $q_k=p_k(Q)$  helyen felvett értéke egyenlő a jobb oldal  $e_k=p_k(E)$  mellett felvett értékével. Ekkor (10.3) helyett írható:

$$g(Q) = g_0 \left[ \frac{\partial[p_1(Q \cdot \{e_1, \dots, e_n\}), \dots, p_n(Q \cdot \{e_1, \dots, e_n\})]}{\partial[e_1, \dots, e_n]} \right]^{-1}, \quad (10.9)$$

ahol  $e_1=p_1(E), \dots, e_n=p_n(E)$ . (Példaként lásd 164. o.)

A *Hurwitz*-integrál  $g(R)$  sűrűségfüggvényének tényleges kiszámítása gyakran igen fáradságos, ha azt közvetlenül (10.3) vagy (10.9) szerint elvégezzük. Sok célra így speciálisan a 9. fejezet ortogonalitási összefüggéseinek a folytonos csoportokra való levezetéséhez elég, ha annyit tudunk, hogy az invariáns integrál *létezik*.

6. Vegyes folytonos csoportokra vonatkozóan a *Hurwitz*-integrál kifejezhető a csoport ama részére vonatkozó *Hurwitz*-integrál segítségével, amely összefügg az egységelemmel. Az azonossággal összefüggő tartományt  $\mathcal{Q}_1$ -gyel jelöljük; a többi összefüggő tartomány jele legyen rendre  $\mathcal{Q}_2, \mathcal{Q}_3, \dots, \mathcal{Q}_\nu$ .

A  $\mathcal{Q}_1$  tartományba tartozó elemek alcsoportot alkotnak (ez invariáns alcsoport), melynek a  $\mathcal{Q}_\nu$  tartományok a mellékosztályai, amint azt a 102. oldalon láttuk. Ha a  $\mathcal{Q}_\nu$  tartományok mindegyikéből tetszésünk szerint kiválasztunk egy-egy  $A_\nu$  elemet, akkor az  $A_\nu$ -vel való szorzás útján a  $\mathcal{Q}_1$  tartományt  $\mathcal{Q}_\nu$ -be projiciálhatjuk.

<sup>5</sup> Az  $x_k$ -k helyére a  $p_k(X)$  értékeket itt a differenciálás után helyettesítjük be.

Mint hogy az egymásba projiciálható tartományok súlya egyenlő, az

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{Q}_1} [J(R) + J(A_2R) + \dots + J(A_eR)] dR = \\ & = \int_{\mathcal{Q}_1} (J(SR) + J(SA_2R) + \dots + J(SA_eR)) dR \end{aligned} \quad (10.10)$$

integrál, mely a  $\mathcal{Q}_1$  tartományra terjesztendő ki, invariáns a csoportelemeknek az  $\bar{S}$  tetszőleges csoportelemmel való szorzásával szemben. Eszerint az egész csoportra vonatkozó Hurwitz-integrál invariáns, ha csak  $\int \dots dR$  az egyszerűen folytonos  $\mathcal{Q}_1$  alcsoportra vonatkozó Hurwitz-integrált jelöli.

Mint hogy  $A_\nu R$  befutja a  $\mathcal{Q}_\nu$  mellékosztály elemeit, amíg  $R$  a  $\mathcal{Q}_1$  alcsoporton fut végig, (10.10) bal oldalán  $\mathcal{Q}_1$  minden egyes mellékosztályának megfelel egy-egy tag. A (10.10) egyenlet jobb oldalán szintén minden mellékosztálynak megfelelően fellép egy-egy tag; a  $\mathcal{Q}_\nu = A_\nu \mathcal{Q}_1$  mellékosztálynak az  $SA_\mu R$ -et tartalmazó tag felel meg, feltéve, hogy  $\mathcal{Q}_\mu = A_\mu \mathcal{Q}_1$  az a mellékosztály mely  $S^{-1}A_\nu$ -t tartalmazza. Megmutatjuk, hogy

$$\int_{\mathcal{Q}_1} J(A_\nu R) dR = \int_{\mathcal{Q}_1} J(SA_\mu R) dR, \quad (10.11)$$

ami azt jelenti, hogy (10.10) két oldalán az egyes tagok egyenként egyenlők egymással.

Legyen  $S^{-1}A_\nu$  eleme az  $A_\mu \mathcal{Q}_1$  mellékosztálynak. Legyen továbbá  $A_\mu T = S^{-1}A_\nu$  azaz:  $A_\mu = S^{-1}A_\nu T^{-1}$ , ahol  $T$  benne van a  $\mathcal{Q}_1$  alcsoportban. E kifejezést (10.11)-be behelyettesítve kapjuk:

$$\int_{\mathcal{Q}_1} J(A_\nu R) dR = \int_{\mathcal{Q}_1} J(S \cdot S^{-1}A_\nu T^{-1}R) dR = \int_{\mathcal{Q}_1} J(A_\nu T^{-1}R) dR.$$

Ez az egyenlőség bizonyosan igaz, minthogy jobb oldala csak abban különbözik a bal oldaltól, hogy az  $R$  elem helyén  $T^{-1}R$  áll, s a  $\mathcal{Q}_1$  alcsoporton definiált Hurwitz-integrál a feltevés szerint invariáns e behelyettesítéssel szemben ( $T^{-1}$  eleme a  $\mathcal{Q}_1$  alcsoportnak).

Ezzel megállapítottuk a (10.10) kifejezés ekvivalenciáját az egész vegyes folytonos csoportra vonatkozó Hurwitz-integrállal; egyszersmind visszavezettük azt a csoportnak az egységelemmel egyszerűen összefüggő része felett képezendő integrálra. (Ez a gondolatmenet természetesen nemcsak  $\mathcal{Q}_1$ -re alkalmazható, hanem minden véges indexű alcsoportra.)



7. A (10.5) egyenletből — pontosan úgy, mint a véges csoportok esetében — következik, hogy bármely ábrázolás transzformáció útján uniterré tehető (9. fejezet, 1. tétel), feltéve, hogy az

$$\int D(R)_{\kappa\lambda} D(R)_{\kappa\lambda}^* dR$$

integrál konvergens. Ez mindig így van, ha az  $\int dR$  csoporttér fogat véges, mint pl. a forgáscsoport esetében. Az ábrázolási mátrixelemekre vonatkozó ortogonalitási összefüggés (9. fejezet, 4. tétel) az

$$\int D^{(\nu)}(R)_{\kappa\lambda}^* D^{(\nu')}(R)_{\kappa'\lambda'} dR = \frac{\delta_{\nu\nu'} \delta_{\kappa\kappa'} \delta_{\lambda\lambda'}}{l_\nu} \int dR \quad (10.12)$$

alakot ölti, ahol  $l_\nu$  a  $\mathbf{D}^{(\nu)}(R)$  ábrázolás dimenziója. Ennek megfelelően a karakterekre vonatkozó ortogonalitási összefüggés (9.33) helyett most

$$\int \chi^{(\nu)}(R)^* \chi^{(\nu')}(R) dR = \delta_{\nu\nu'} \int dR. \quad (10.13)$$

## 11. ÁBRÁZOLÁSOK ÉS SAJÁTFÜGGVÉNYEK

1. Tekintsük két *azonos részecskéből* álló rendszer  $\mathbf{H}\psi = E\psi$  Schrödinger-egyenletét. Az egyszerűség kedvéért feltesszük, hogy e részecskék mindegyikének csak egy szabadsági foka van; a megfelelő koordináták legyenek  $x$  és  $y$ . Ekkor

$$\mathbf{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi(x, y) + V(x, y) \psi(x, y) = E \psi(x, y), \quad (11.1)$$

ahol  $m$  az egyes részecskék tömege. Minthogy azonos részecskékkel van dolgunk, a potenciális energiának ugyanolyan értékűnek kell lennie, akár az első részecske van az  $a$  helyen s a második a  $b$  helyen, akár az első van a  $b$  helyen és a második az  $a$  helyen. Azaz  $a$  és  $b$  minden értékére teljesülnie kell a

$$V(a, b) = V(b, a) \quad (11.2)$$

egyenlőségnek.

Feltesszük, hogy (11.1)-nek diszkrét spektruma van, és hogy  $\psi_{\kappa}(x, y)$  az  $E_{\kappa}$  diszkrét sajátértékhez tartozik. Azt is feltesszük, hogy ehhez a sajátértékhez nem tartozik más lineárisan független sajátfüggvény; azaz a  $\psi_{\kappa}$ -ra vonatkozó

$$\mathbf{H}\psi_{\kappa} = E_{\kappa}\psi_{\kappa} \quad (11.3)$$

differenciálegyenletnek ( $x$  vagy  $y$ )  $(+\infty$  vagy  $-\infty)$  mellett eltűnő legáltalánosabb megoldása a  $\psi_{\kappa}$  függvény állandószorosa.

Tekintsük a  $\mathbf{P}\psi_{\kappa} = \bar{\psi}_{\kappa}$  függvényt, melyet oly módon definiálunk, hogy  $a$  és  $b$  minden értékére

$$\mathbf{P}\psi_{\kappa}(a, b) = \bar{\psi}_{\kappa}(a, b) = \psi_{\kappa}(b, a) \quad (11.4)$$

legyen. Meg fogjuk mutatni, hogy  $\bar{\psi}_{\kappa}(a, b)$  is megoldása a (11.3) differenciálegyenletnek. A következőkben jelöljük az  $f(x, y)$  függvény első változó szerint képezett deriváltját  $f^{(1)}(x, y)$ -nal, a második változó szerint képezett deriváltat pedig  $f^{(2)}(x, y)$ -nal. Azaz

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} &= f^{(1)}(x, y), & \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} &= f^{(2)}(x, y), \\ \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x^2} &= \frac{\partial f^{(1)}(x, y)}{\partial x} = f^{(1)(1)}(x, y) \end{aligned} \quad (11.5)$$

stb. Fennáll továbbá

$$\frac{\partial f(y, x)}{\partial x} = f^{(2)}(y, x), \quad \frac{\partial f(y, x)}{\partial y} = f^{(1)}(y, x).$$

Így tehát a (11.4) egyenlet differenciálása  $a$  és  $b$  szerint a következőket adja:

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_x^{(1)}(a, b) &= \psi_x^{(2)}(b, a), & \bar{\psi}_x^{(1)(1)}(a, b) &= \psi_x^{(2)(2)}(b, a), \\ \bar{\psi}_x^{(2)}(a, b) &= \psi_x^{(1)}(b, a), & \bar{\psi}_x^{(2)(2)}(a, b) &= \psi_x^{(1)(1)}(b, a). \end{aligned} \quad (11.6)$$

Számítsuk ki most  $\mathbf{H}$  hatását a  $\bar{\psi}_x(x, y)$  függvényre:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}\bar{\psi}_x(x, y) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \bar{\psi}_x(x, y) + V(x, y) \bar{\psi}_x(x, y) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \bar{\psi}_x^{(1)(1)}(x, y) + \bar{\psi}_x^{(2)(2)}(x, y) \right] + V(x, y) \bar{\psi}_x(x, y); \end{aligned} \quad (11.7)$$

(11.6), (11.4), (11.2) és (11.3) felhasználásával kapjuk a

$$\begin{aligned} \mathbf{H}\bar{\psi}_x(x, y) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \psi_x^{(2)(2)}(y, x) + \psi_x^{(1)(1)}(y, x) \right) + V(y, x) \psi_x(y, x) = \\ &= E_x \psi_x(y, x) = E_x \bar{\psi}_x(x, y) \end{aligned} \quad (11.8)$$

egyenletet. Eszerint a (11.3) differenciálegyenletnek  $\mathbf{P} \bar{\psi}_x(x, y) = \bar{\psi}_x(x, y)$  is egy megoldása, amely eleget tesz a plusz és mínusz végtelenben előírt határfeltételeknek. Az új megoldásnak tehát a  $\psi_x(x, y)$  függvény állandósorozosának kell lennie:

$$\bar{\psi}_x(x, y) = c \psi_x(x, y). \quad (11.9)$$

A  $c$  állandó meghatározása céljából megjegyezzük, hogy (11.4) folytán

$$c \psi_x(a, b) = \bar{\psi}_x(a, b) = \psi_x(b, a) \quad (11.10)$$

$a$  és  $b$  minden értéke mellett. Ha (11.10)-et először az  $y, x$ , azután az  $x, y$  értékpárra írjuk fel,

$$c \psi_x(y, x) = \psi_x(x, y), \quad c \psi_x(x, y) = \psi_x(y, x), \quad (11.11)$$

kapjuk:

$$c^2 \psi_x(x, y) = \psi_x(x, y).$$

Mínt hogy  $\psi_x(y, x)$  nem azonosan zérus,  $c^2 = 1$ ;  $c = \pm 1$ . Eszerint  $x$ -ben és  $y$ -ban azonosan teljesül a

$$\bar{\psi}_x(x, y) = \psi_x(y, x) = \pm \psi(x, y) \quad (11.12)$$

egyenlet.

A  $\psi_x(x, y)$  sajátfüggvény az  $x, y$  pontban vagy ugyanazt az értéket veszi fel, mint az  $y, x$  pontban, vagy annak  $-1$ -szeresét. Azt, hogy az első vagy a második

eset következnek-e be, általános megfontolások segítségével nem lehet eldönteni. De a feltételeknek megfelelő, tetszőlegesen adott  $\psi_{\pm}(x, y)$  függvény (azaz bármely adott sajátérték) esetében a két lehetőség közül csak az egyik lehet igaz. Azokat a sajátértékeket vagy sajátfüggvényeket, amelyekre vonatkozóan (11.12) alatt a + előjel érvényes, *szimmetrikus sajátértékeknek* vagy *sajátfüggvényeknek* mondjuk; a - előjelhez tartozókat *antiszimmetrikus sajátértékeknek* vagy *sajátfüggvényeknek* nevezzük. Ily módon a *Schrödinger*-egyenlet sajátértékeinek és sajátfüggvényeinek két osztályba való kvalitatív osztályozását kapjuk, attól függően, hogy azokra a (11.12) egyenlet a + vagy a - előjel mellett érvényes.

Teljesen analóg, de valamivel egyszerűbb okoskodás végezhető a

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x) \psi(x) = E \psi(x) \quad (11.13)$$

sajátértékegyenlet esetében, ahol

$$V(x) = V(-x). \quad (11.14)$$

Legyen

$$\mathbf{P} \psi(x) = \psi(-x). \quad (11.15)$$

Most (11.12) helyett a

$$\psi(x) = \pm \psi(-x) \quad (11.16)$$

egyenletet kapjuk. Ez egyszerűen annak a jól ismert ténynek a megállapítása, hogy a sajátfüggvények vagy páros, vagy páratlan függvényei az  $x$ -nek.

2. Ezeket a megfontolásokat kiterjesztjük az általánosabb esetre, amikor egy diszkrét sajátértékhez több (azonban csak véges számú) lineárisan független sajátfüggvény tartozik.<sup>1</sup> Eközben a számításokat, ahol csak lehetséges, fogalmi megfontolásokkal helyettesítjük; nyilvánvaló, hogy a *Hamilton*-operátor speciális alakja (11.1) és (11.13) alatt nem lényeges, és hogy az első esetben csak a két részecske ekvivalenciája játszik szerepet, a második esetben pedig csak a + $X$  és a - $X$  irány ekvivalenciája. A (11.12) és (11.16) egyenletekhez hasonló összefüggéseket fogunk kapni, amelyek — ezekhez hasonlóan — a sajátfüggvények különböző típusait különböztetik meg: minden egyes sajátérték sajátfüggvényei eleget tesznek bizonyos egyenletrendszernek közül egynek. Azok a sajátértékek, amelyeknek sajátfüggvényei ugyanazon egyenletrendszernek tesznek eleget, hasonló tulajdonságúak. A sajátértékek eme osztályozása a szerint, hogy sajátfüggvényeik mely egyenletrendszernek tesznek eleget, képezi az alapot a „szintek zoológiája” számára.

<sup>1</sup> A hangsúly itt a „véges számú”-n van és nem a „diszkrét”-en. Az egész elmélet csaknem változtatás nélkül alkalmazható a „diszkrét komplex sajátértékek” esetére, amilyenekkel a magok bomlásának *GAMOW*-féle elmélete dolgozik, jóllehet ezek nem diszkrét az itt használt értelemben, minthogy a megfelelő sajátfüggvények négyzetes integrálja divergál.

A (11.12) egyenlethez vezető gondolatmenet alapját az a tény képezi, hogy (11.1) invariáns az

$$x' = y, \quad y' = x \quad (11.17)$$

transzformációval szemben. Ez maga után vonja, hogy a  $\mathbf{P}\psi_x$  függvény,<sup>2</sup> amit az  $a$ -ban és  $b$ -ben azonosan fennálló

$$\mathbf{P}\psi_x(a, b) = \psi_x(b, a)$$

egyenlet definiál, megoldása a  $\mathbf{H}\psi = E\psi$  egyenletnek, hacsak  $\psi_x$  maga is megoldás.

Eme eljárás általánosításképpen tekintjük az  $\mathbf{R}$  valós ortogonális transzformációt:

$$\begin{aligned} x'_1 &= R_{11}x_1 + R_{12}x_2 + \dots + R_{1n}x_n, \\ x'_2 &= R_{21}x_1 + R_{22}x_2 + \dots + R_{2n}x_n, \\ &\vdots \\ x'_n &= R_{n1}x_1 + R_{n2}x_2 + \dots + R_{nn}x_n, \end{aligned} \quad (11.18a)$$

és definiáljuk a  $\mathbf{P}_R f$  függvényt, melyre

$$\mathbf{P}_R f(x'_1, x'_2, \dots, x'_n) = f(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (11.19)$$

azonosan teljesül az  $x_1, x_2, \dots, x_n$ , ill. az  $x'_1, x'_2, \dots, x'_n$  változókbán. (Az első esetben az  $x_1, x_2, \dots, x_n$  változók helyére ezek (11.18a) kifejezése helyettesítendő, a második esetben az  $x_i$ -ket

$$x_i = \sum_{j=1}^n R_{ji}x'_j \quad (11.18b)$$

kifejezésekkel kell helyettesítenünk.) Eszerint  $\mathbf{P}_R$  operátor, mely az  $x'_i$  változókat az  $x_i$  változókkal helyettesíti. Minthogy ez a beszédmód nem tesz egész világosan különbséget a  $\mathbf{P}_R$  operáció és annak reciproka között, a tényleges számításokban a (11.19) és (11.18a) vagy (11.18b) egyenletekkel kifejezett formális definíciókat fogjuk használni.

Ha mármost a konfigurációs tér két  $x_1, x_2, \dots, x_n$  és  $x'_1, x'_2, \dots, x'_n$  pontja, melyeket az adott  $\mathbf{R}$  transzformáció egymásba transzformál, fizikailag ekvivalens (pl. ha csak abban különböznek, hogy két azonos részecskét felcseréltünk), akkor a két  $\psi$  és  $\mathbf{P}_R\psi$  függvény ugyancsak ekvivalens (a  $\mathbf{P}_R\psi$  állapotban a második részecske pusztán azt a szerepet játssza, amit az első részecske játszott a  $\psi$  állapotban, és megfordítva). Ha  $\psi$  stacionárius állapot, akkor  $\mathbf{P}_R\psi$  is az, és mindkettőnek ugyanakkora az energiája. A  $\mathbf{H}\psi = E\psi$  egyenlet maga után vonja  $\mathbf{H}\mathbf{P}_R\psi = E\mathbf{P}_R\psi$  fennállását, és  $\mathbf{H}$  invariáns a  $\mathbf{P}_R$  operációval szemben.

<sup>2</sup>  $\mathbf{P}\psi$  egy függvény szimbóluma, amilyen függvényt szimbólumok a szokásos  $f$  vagy  $g$ ;  $\mathbf{P}\psi(x, y)$  e függvény értéke az  $x, y$  pontban. Így (11.19) pl. azt jelenti, hogy  $\mathbf{P}_R f$  az  $x'_1, x'_2, \dots, x'_n$  pontban ugyanazt az értéket veszi fel, mint az  $f$  függvény az  $x_1, x_2, \dots, x_n$  pontban.

Azok az  $\mathbf{R}$  transzformációk, amelyek az ekvivalens pontokat egymásba transzformálják, csoportot képeznek: „a *Schrödinger*-egyenlet csoportját”, minthogy az ilyen transzformációk reciproka és a szorzataik szintén egymásba transzformálják az ekvivalens elhelyezkedéseket (azaz hozzá tartoznak ehhez a csoporthoz). A csoport egységeleme az azonos transzformáció, mely minden elhelyezkedést önmagába transzformál. A csoportnak magának a neve a *konfigurációs tér szimmetriacsoportja*.

Hasonló megfontolásokat végezhetünk a  $\mathbf{P}_R$  operátorra vonatkozóan is. Könnyen látható, hogy  $\mathbf{P}_S \cdot \mathbf{P}_R = \mathbf{P}_{SR}$ . Az  $\mathbf{R}$  transzformáció  $x$ -et  $x'$ -be transzformálja, tehát  $\mathbf{P}_R f(x'_i) = f(x_i)$ ,  $\mathbf{S}$  pedig  $x'$ -t  $x''$ -be transzformálja, tehát  $\mathbf{P}_S g(x''_i) = g(x'_i)$ ; ennél fogva a  $g(x) = \mathbf{P}_R f(x)$  függvényre  $\mathbf{P}_S$  a

$$\mathbf{P}_S \mathbf{P}_R f(x''_i) = \mathbf{P}_R f(x'_i) = f(x_i)$$

képlet szerint hat. Az  $\mathbf{SR}$  transzformáció azonban  $x$ -et közvetlenül  $x''$ -be transzformálja,

$$\mathbf{P}_{SR} f(x''_i) = f(x_i);$$

ez az egyenlet definiálja  $\mathbf{P}_{SR} f$ -et. Minthogy  $f$  tetszőleges függvény, ebből következik, hogy

$$\mathbf{P}_{SR} \equiv \mathbf{P}_S \cdot \mathbf{P}_R. \quad (11.20)$$

A  $\mathbf{P}_R$ -ek csoportja izomorf az  $\mathbf{R}$ -ek csoportjával.

A  $\mathbf{P}_R f$  függvény (11.19) definíciója a

$$\mathbf{P}_R f(x_1, \dots, x_n) = f(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_n) \quad (11.19a)$$

alakban is felírható, ahol

$$\bar{x}_i = \sum_j (\mathbf{R}^{-1})_{ij} x_j.$$

Így tehát  $\mathbf{P}_S \mathbf{P}_R f$  kiszámításakor kísértést érezhetünk, hogy a következőképpen járjunk el:

$$\mathbf{P}_S \mathbf{P}_R f(x_1, \dots, x_n) = \mathbf{P}_S f(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_n), \quad (\dagger)$$

$$\mathbf{P}_S f(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_n) = f(\bar{\bar{x}}_1, \dots, \bar{\bar{x}}_n),$$

ahol

$$\bar{\bar{x}}_i = \sum_j (\mathbf{S}^{-1})_{ij} \bar{x}_j$$

és így

$$\bar{\bar{x}}_i = \sum_{ij} (\mathbf{S}^{-1})_{li} (\mathbf{R}^{-1})_{ij} x_j = \sum_j (\mathbf{S}^{-1} \mathbf{R}^{-1})_{lj} x_j = \sum_j ((\mathbf{RS})^{-1})_{lj} x_j. \quad (*)$$

Arra következtethetnénk tehát, hogy

$$\mathbf{P}_S \mathbf{P}_R f(x_1, \dots, x_n) = f(\bar{\bar{x}}_1, \dots, \bar{\bar{x}}_n).$$

Minthogy (11.19a) szerint ez  $\mathbf{P}_{SR} f$  definíciója, arra következtethetnénk, hogy  $\mathbf{P}_S \mathbf{P}_R f = \mathbf{P}_{RS} f$ .

Felmerül a kérdés, hogy melyik számítás a helyes: az, amely a (11.20) eredményre vezetett, vagy ez az utóbbi? A válasz — amint azt az olvasó nyilván gyanítja — az, hogy (11.20) a helyes. A hibát az utóbbi számításban (†) alatt követtük el. Ez úgy látszik, (11.19a)-ból (vagy (11.19)-ből) következik oly módon, hogy  $\mathbf{P}_S$ -et mind a két oldalra alkalmazzuk. Operátorokat azonban csak függvényekre alkalmazhatunk, (11.19a) két oldala azonban függvényértékeket (számokat) ad meg, a független változók meghatározott értékeire. A  $\mathbf{P}_R f$  függvény számára bevezethetjük az  $f$  jelölést; ekkor írható:  $\mathbf{P}_S(\mathbf{P}_R f) = \mathbf{P}_S f$ . A most kapott egyenletbe azután a változók bármily értékeit behelyettesíthetjük, és az eredményül adódó összefüggés helyes lesz. Ez a gondolatmenet a (11.20) eredményre vezet. Számokra azonban  $\mathbf{P}_S$  nem alkalmazható.

Tegyük fel például, hogy  $f(x) = g(x')$  fennáll  $x$  minden értékére, ha  $x' = x + 1$ , és hogy a  $\mathbf{P}_S$  operáció a változót annak reciprokával helyettesíti. Valaki arra következtethetne, hogy

$$\mathbf{P}_S f(x) = \mathbf{P}_S g(x')$$

vagy

$$f(1/x) = g(1/x'),$$

ahol  $x' = x + 1$ . Nyilvánvaló, hogy ez a következtetés helytelen.

Nem fogunk kísértést érezni, hogy a (†) egyenlettől a (\*) egyenlethez vezető úton okoskodjunk, ha visszagondolunk arra, hogy  $\mathbf{P}_S \mathbf{P}_R f = \mathbf{P}_S(\mathbf{P}_R f)$  egy függvény. Ha az nem volna kényelmetlen, megfelelőbb lenne e függvénynek az  $x_1, \dots, x_n$  pontban felvett értékét a  $(\mathbf{P}_S \mathbf{P}_R f)(x_1, \dots, x_n)$  módon jelölni, ily módon kifejezve azt, hogy  $\mathbf{P}_S \mathbf{P}_R f$  függvénytípus, hasonlóan a gyakran használt  $F, g$  stb. jelekhez.

Megjegyzendő még, hogy a (11.19), (11.18a) képletekbe foglalt definíció a természetes. A vesszős koordináta-rendszerben az  $x'$  koordinátákkal jellemzett konfiguráció s a vesszőtlen rendszerben az  $x_i$  koordinátákkal jellemzett konfiguráció egymással fizikailag ekvivalens. Ez a (11.18a) összefüggések értelme. A (11.19) egyenlet jelentése pedig az, hogy a vesszős rendszerbeli  $\mathbf{P}_R f$  hullámfüggvény és a vesszőtlen rendszerbeli  $f$  hullámfüggvény azonos konfiguráció mellett ugyanazt az értéket veszi fel.

3. *A  $\mathbf{P}$  operátorok lineárisak.* Az  $x'$  változónak  $x$ -szel történt helyettesítése valamely összegben ekvivalens eme operációnak minden egyes összeadandón való elvégzésével; hasonlóképpen, ha egy függvényt, amelyen ilyen helyettesítést hajtottunk végre, megszorozunk egy állandóval, ugyanazt az eredményt kapjuk, mintha először szorozunk és azután végezzük el a helyettesítést. Formálisan kifejezve,

$$\mathbf{P}(af + bg) = a\mathbf{P}f + b\mathbf{P}g. \quad (11.21)$$

Minthogy a  $\mathbf{P}$  operátor egyszerűen új ortogonális koordináta-rendszerre való átterést ír le a konfigurációs térben,  $\mathbf{P}$ -nek unitérnek kell lennie, azaz: ha  $f$  és  $g$  két tetszőleges függvény, a skaláris szorzat invariáns:

$$(f, g) = (\mathbf{P}f, \mathbf{P}g).$$

Összefoglalva azt mondhatjuk, hogy a tett igen általános feltevések mellett  $\mathbf{P}$  unitér lineáris operátor.

Speciálisan az adott esetben  $\mathbf{P}$  a

$$\mathbf{P}fg = \mathbf{P}f \cdot \mathbf{P}g \quad (11.22)$$

tulajdonsággal is rendelkezik, ami közvetlenül következik a definícióból. A  $\mathbf{P}$  operátor e tulajdonsága nem annyira általános természetű, mint annak unitér-lineáris jellege.

4. A *Schrödinger*-egyenlet csoportja a legtöbb esetben *általános fizikai megfontolások alapján* meghatározható.

Tekintsük  $n$  elektron rendszerét, melyben a  $k$ -edik elektron koordinátáit  $x_k, y_k, z_k$  jelöli.<sup>3</sup> Ekkor a *Schrödinger*-egyenlet invariáns a transzformációk alábbi két fajtájával szemben. Az első az elektronok permutációját írja le:

$$\begin{aligned} x'_1 &= x_{\alpha_1}, & y'_1 &= y_{\alpha_1}, & z'_1 &= z_{\alpha_1}, \\ x'_2 &= x_{\alpha_2}, & y'_2 &= y_{\alpha_2}, & z'_2 &= z_{\alpha_2}, \\ & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ x'_n &= x_{\alpha_n}, & y'_n &= y_{\alpha_n}, & z'_n &= z_{\alpha_n}. \end{aligned} \quad (11.E.1)$$

Itt  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$  az  $1, 2, 3, \dots, n$  számok tetszőleges permutációja. Az e transzformációkkal szemben mutatott invariancia valamennyi elektron fizikai ekvivalenciájának a következménye. A transzformációk második fajtája a koordináta-rendszer elforgatását írja le:

$$\begin{aligned} x'_1 &= \beta_{11}x_1 + \beta_{12}y_1 + \beta_{13}z_1, & y'_1 &= \beta_{21}x_1 + \beta_{22}y_1 + \beta_{23}z_1, \\ x'_2 &= \beta_{11}x_2 + \beta_{12}y_2 + \beta_{13}z_2, & y'_2 &= \beta_{21}x_2 + \beta_{22}y_2 + \beta_{23}z_2, \\ & \vdots & & \vdots \\ x'_n &= \beta_{11}x_n + \beta_{12}y_n + \beta_{13}z_n, & y'_n &= \beta_{21}x_n + \beta_{22}y_n + \beta_{23}z_n, \end{aligned} \quad (11.E.2)$$

$$\begin{aligned} z'_1 &= \beta_{31}x_1 + \beta_{32}y_1 + \beta_{33}z_1, \\ z'_2 &= \beta_{31}x_2 + \beta_{32}y_2 + \beta_{33}z_2, \\ & \vdots \\ z'_n &= \beta_{31}x_n + \beta_{32}y_n + \beta_{33}z_n. \end{aligned}$$

Most ( $\beta_{ik}$ ) valós ortogonális mátrix; (11.E.2) összefüggések csupán más irányítású koordináta-rendszerre való áttérést írnak le. Ekkor az összes irány fizikai ekvivalenciája a térben (legalább is amíg külső erők nem hatnak) maga után vonja az ilyen transzformációkkal szemben mutatott invarianciát.

Nyilvánvaló, hogy a *Schrödinger*-egyenlet ugyancsak invariáns a (11.E.1) és (11.E.2) kombinálásával kapott transzformációkkal szemben. A (11.E.1) transzformációk  $n$  objektum permutációinak csoportjával izomorf csoportot, a (11.E.2) transzformációk pedig a háromdimenziós forgáscsoporttal izomorf csoportot képeznek.

<sup>3</sup> Mostantól fogva tehát  $3n$  változónk van:  $x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_n, y_n, z_n$ , az eddigi  $n$  számú  $x_1, x_2, \dots, x_n$  változó helyett.



A *Schrödinger*-egyenlet csoportjának elemeit az  $R, S, \dots$  betűkkel fogjuk jelölni. Ezeknek a csoportelemeknek feleljenek meg rendre a  $\mathbf{P}_R, \mathbf{P}_S, \dots$  operátorok;  $\mathbf{P}_R$  analitikai kifejezését (11.19) adja meg, ahol  $\mathbf{R}$  az  $R$  csoportelemnek megfelelő transzformáció. A következőkben azonban  $\mathbf{P}$  indexeként a csoportelemet fogjuk feltüntetni, nem pedig a neki megfelelő mátrixot. Azért teszünk így, mert először is e módon jelölésünk kevésbé lesz nehézkes, másodsor, mivel a szimmetriaelemnek alapvetőbb a jelentősége, mint a mátrixé, mely neki megfelel. A  $\mathbf{P}_R$  operátor fizikai jelentése: adott állapot  $\varphi$  hullámfüggvényéből kiindulva ama állapot  $\mathbf{P}_R\varphi$  hullámfüggvényét állítja elő, amelyben a részecskék szerepet cserélnek, vagy új  $x', y', z'$  irányok veszik át az eredeti  $x, y, z$  irányok szerepét.

Vannak olyan fizikai mennyiségek (ilyen esetünkben az energia), amelyek szempontjából a  $\varphi, \mathbf{P}_R\varphi$  állapotok ekvivalensek. Ez azt jelenti, hogy e mennyiségek mérése  $\varphi$  és  $\mathbf{P}_R\varphi$  esetében ugyanazokat az értékeket szolgáltatja, ugyanakkora valószínűséggel. Azokról az operátorokról, amelyek ilyen fajta fizikai mennyiségeknek felelnek meg, azt mondjuk, hogy *szimmetrikusak* a  $\mathbf{P}_R$  transzformációkkal szemben, a csoportot pedig a fizikai mennyiség *szimmetriacsoportjának* nevezzük. Az azonos részecskék permutációinak és a koordináta-rendszer elforgatásainak csoportja az energiának szimmetriacsoportja.

5. Megállapítottuk (11.12), ill. (11.16) alatt, hogy a  $\mathbf{P}\psi$  függvények  $\psi$  állandósorozatának kell lennie, minthogy az a  $\psi$  függvény sajátértékéhez tartozik. Az általánosabb esetben, ha olyan sajátértéket veszünk szemügyre, amelyhez  $l$  számú  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_l$  lineárisan független sajátfüggvény tartozik, ez a következtetés már nem vonható le. Csak annyit mondhatunk, hogy  $\mathbf{P}_R\psi_1, \mathbf{P}_R\psi_2, \dots, \mathbf{P}_R\psi_l$  mind felírhatók a  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_l$  sajátfüggvények lineáris kombinációja alakjában (minthogy minden, az adott sajátértékhez tartozó sajátfüggvény ilyen tulajdonságú). Az együtthatókat  $D(R)_{\kappa\nu}$ -vel jelölve<sup>4</sup>

$$\mathbf{P}_R\psi_\nu(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n) = \sum_{\kappa=1}^l D(R)_{\kappa\nu} \psi_\kappa(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n). \quad (11.23)$$

Ha  $S$  is hozzátartozik a *Schrödinger*-egyenlet csoportjához, fennáll:

$$\mathbf{P}_S\psi_\kappa = \sum_{\lambda=1}^l D(S)_{\lambda\kappa} \psi_\lambda.$$

Ha a (11.23) egyenletben a változókat alávetjük az  $S$  transzformációnak, azaz ha  $\mathbf{P}_S$ -et alkalmazzuk mind a két oldalra, kapjuk ( $\mathbf{P}_S$  lineáris és a  $D(R)_{\kappa\nu}$ -k állandók!):

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_S \cdot \mathbf{P}_R\psi_\nu &= \mathbf{P}_S \cdot \sum_{\kappa=1}^l D(R)_{\kappa\nu} \psi_\kappa = \sum_{\kappa=1}^l D(R)_{\kappa\nu} \mathbf{P}_S\psi_\kappa = \\ &= \sum_{\kappa=1}^l D(R)_{\kappa\nu} \sum_{\lambda=1}^l D(S)_{\lambda\kappa} \psi_\lambda = \sum_{\lambda=1}^l \sum_{\kappa=1}^l D(S)_{\lambda\kappa} D(R)_{\kappa\nu} \psi_\lambda. \end{aligned} \quad (11.24)$$

<sup>4</sup> A  $\kappa\nu$  indexeket ilyen sorrendben írtuk azért, hogy (11.25)-nek megfelelően maga  $D(R)$  (és ne a  $D'(R)$  transzponált) képezzen ábrázolást.

Másrésztől  $\mathbf{P}_S \cdot \mathbf{P}_R \psi_v = \mathbf{P}_{SR} \psi_v$ , tehát

$$\mathbf{P}_S \cdot \mathbf{P}_R \psi_v = \mathbf{P}_{SR} \psi_v = \sum_{\lambda=1}^l D(SR)_{\lambda v} \psi_\lambda.$$

Ha itt az együtthatókat egyenlővé tesszük (11.24) együtthatóival,

$$D(SR)_{\lambda v} = \sum_{\kappa=1}^l D(S)_{\lambda \kappa} D(R)_{\kappa v} \quad (11.25)$$

fennállítására következtethetünk. A (11.23) egyenlet együtthatóiból képezett  $l$ -dimenziós  $\mathbf{D}(R)$  mátrixok az adott sajátértékhez tartozó  $\psi_v$  sajátfüggvényt a  $\mathbf{P}_R \psi_v$  transzformált sajátfüggvénybe viszik át. Minthogy e mátrixok kielégítik a  $\mathbf{D}(SR) = \mathbf{D}(S)\mathbf{D}(R)$  egyenletet, ábrázolását képezik ama csoportnak, amellyel szemben invariáns a  $\mathbf{H}\psi = E\psi$  Schrödinger-egyenlet. Az ábrázolás dimenziója egyenlő a szóban forgó sajátértékhez tartozó lineárisan független  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_l$  sajátfüggvények  $l$  számával.

Általános megfontolások segítségével éppúgy nem dönthető el, mely ábrázolás együtthatói lépnek fel (11.23) alatt, mint ahogy azt sem lehetett eldönteni, melyik előjel érvényes a (11.12) egyenletben. Akárcsak (11.12), (11.23) is több különböző lehetőséget megenged. Most is azt kell várnunk, hogy a különböző sajátértékek esetében különböző ábrázolások léphetnek fel.

Kombináljuk ezután (11.23)-at a  $\mathbf{P}_R$  operátor

$$\mathbf{P}_R \psi_v(x'_1, y'_1, z'_1, \dots, x'_n, y'_n, z'_n) = \psi_v(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n) \quad (11.18c)$$

definíciós egyenletével. Ha  $R$ -et  $R^{-1}$ -gyel helyettesítjük, a vesszős és vesszőtlen változók szerepet cserélnek. Ily módon a  $\psi_v$  sajátfüggvények számára a

$$\begin{aligned} \psi_v(x'_1, y'_1, z'_1, \dots, x'_n, y'_n, z'_n) &= \mathbf{P}_{R^{-1}} \psi_v(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n) = \\ &= \sum_{\kappa=1}^l D(R^{-1})_{\kappa v} \psi_\kappa(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n) \end{aligned} \quad (11.26)$$

transzformációs képleteket kapjuk. Ezek a sajátfüggvényeknek a konfigurációs tér fizikailag ekvivalens pontjaiban felvett értékei között adnak meg kapcsolatot.

A csoport, amellyel szemben a (11.1) egyenlet invariáns, az azonosságból s az  $x$  és  $y$  változó felcserélését leíró  $\mathbf{R}$  transzformációból áll. Minthogy a sajátérték (feltevéünk szerint) egyszerű, a tükrözéscsoport valamelyik egyszimmetrikus ábrázolását kell kapnunk. Minthogy  $\mathbf{P}_R$  az azonosság operátora,

$$\mathbf{P}_E \psi = \psi = 1 \cdot \psi.$$

Azaz a csoport egységelemének az (1) mátrix felel meg. Továbbá (11.12) szerint

$$\mathbf{P}_R \psi = \bar{\psi} = \pm \psi = \pm 1 \cdot \psi. \quad (11.12a)$$

Egyes sajátértékek esetében a felső előjel érvényes; e sajátértékek esetében az (1) mátrix felel meg a két részecskét felcserélő  $\mathbf{R}$  csoportelemnek. Más sajátértékek esetében az alsó előjel érvényes; ilyenkor az  $\mathbf{R}$  csoportelemnek a  $(-1)$  mátrix felel meg. Ily módon a két elemből álló szimmetrikus csoport két egydimenziós ábrázolását kapjuk. Az egyiket a  $\mathbf{D}(E)=(1)$ ,  $\mathbf{D}(R)=(1)$ , a másikat a  $\mathbf{D}(E)=(1)$ ,  $\mathbf{D}(R)=(-1)$  megfeleltetés képezi.

6. Ha az eredetileg adott  $\psi_1, \dots, \psi_l$  sajátfüggvények helyett új lineárisan független  $\psi'_1, \dots, \psi'_l$  sajátfüggvényeket választunk, ahol

$$\psi'_\mu = \sum_{\nu=1}^l \alpha_{\nu\mu} \psi_\nu, \quad (11.27)$$

akkor (11.23) alatt a  $\mathbf{P}$  operátorok csoportjának egy másik ábrázolását kapjuk. Felmerül a kérdés, hogy ez a két ábrázolás milyen kapcsolatban áll egymással.

Legyen

$$\psi_\kappa = \sum \beta_{\lambda\kappa} \psi'_\lambda, \quad (11.28)$$

ahol  $\beta$  az  $\alpha$  mátrix inverze. Ekkor a  $\mathbf{P}_R$  operátorok linearitása folytán

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_R \psi'_\mu &= \sum_{\nu} \alpha_{\nu\mu} \mathbf{P}_R \psi_\nu = \sum_{\nu} \sum_{\kappa} \alpha_{\nu\mu} D(R)_{\kappa\nu} \psi_\kappa = \\ &= \sum_{\nu} \sum_{\kappa} \sum_{\lambda} \alpha_{\nu\mu} \bar{D}(R)_{\kappa\nu} \beta_{\lambda\kappa} \psi'_\lambda = \sum_{\lambda} \left( \sum_{\kappa\nu} \beta_{\lambda\kappa} D(R)_{\kappa\nu} \alpha_{\nu\mu} \right) \psi'_\lambda. \end{aligned} \quad (11.29)$$

A  $\bar{D}(R)$  mátrix, mely a  $\psi'$ -ket a  $\mathbf{P}_R \psi'$  függvényekbe transzformálja,  $\mathbf{D}(R)$ -ből  $\alpha$  segítségével elvégzett hasonlósági transzformációval kapható:

$$\bar{D}(R) = \alpha^{-1} \mathbf{D}(R) \alpha. \quad (11.30)$$

Adott sajátértékhez tartozó lineárisan független sajátfüggvények más választása a megfelelő ábrázolásnak csupán egy hasonlósági transzformációját eredményezi: *a Schrödinger-egyenlet csoportjának adott sajátértékhez tartozó ábrázolása hasonlósági transzformáció erejéig egyértelműen meg van határozva.*

Ha olyan sajátfüggvényeket kívánunk bevezetni, amelyek nem  $\mathbf{D}(R)$  szerint transzformálódnak, hanem egy ezzel ekvivalens ábrázolás szerint, akkor a sajátfüggvényekből új lineáris kombinációkat kell képeznünk ama  $\alpha$  mátrix segítségével, mely a  $\mathbf{D}(R)$  ábrázolást a kívánt  $\bar{D}(R)$  alakúvá transzformálja.

Az ábrázolás (mely hasonlósági transzformáció erejéig egyértelműen meg van határozva) felhasználható mint kvalitatív jellemző a sajátértékek különféle fajtáinak a megkülönböztetésére. Az az ábrázolás, mely egy szingulett  $S$  szinthez tartozik, különbözik attól, amely egy tripllett  $P$  szintnek vagy mondjuk egy szingulett  $D$  szintnek felel meg; ugyanakkor mindazok az ábrázolások, amelyek tripllett  $P$  szintekhez tartoznak, ekvivalensek. Ezek az ábrázolások gyakorlatilag mindig irreducibilisek lesznek, ami az egyik oka az irreducibilis ábrázolások fontosságának.

7. Ha az  $l$  számú  $\psi_1, \dots, \psi_l$  sajátfüggvény ortogonális egymásra (mindig fel fogjuk tenni, hogy ez a helyzet), akkor a megfelelő ábrázolás unitér. A  $\mathbf{P}_R$  operátor unitér voltából következik, hogy az  $l$  számú  $\mathbf{P}_R\psi_1, \dots, \mathbf{P}_R\psi_l$  függvény ugyancsak ortogonális:

$$(\mathbf{P}_R\psi_\kappa, \mathbf{P}_R\psi_\nu) = (\psi_\kappa, \psi_\nu) = \delta_{\kappa\nu}, \quad (11.31)$$

vagy (11.23)-at felhasználva

$$\begin{aligned} \delta_{\kappa\nu} &= (\mathbf{P}_R\psi_\kappa, \mathbf{P}_R\psi_\nu) = \left( \sum_\lambda D(R)_{\lambda\kappa} \psi_\lambda, \sum_\mu D(R)_{\mu\nu} \psi_\mu \right) = \\ &= \sum_\lambda \sum_\mu D(R)_{\lambda\kappa}^* D(R)_{\mu\nu} (\psi_\lambda, \psi_\mu) = \sum_\lambda D(R)_{\lambda\kappa}^* D(R)_{\lambda\nu}, \end{aligned} \quad (11.32)$$

vagyis

$$\mathbf{1} = \mathbf{D}(R)^\dagger \mathbf{D}(R).$$

Azaz:  $\mathbf{D}(R)$  unitér mátrix.<sup>5</sup> Következésképpen azonnal megállapíthatjuk, hogy a 9. fejezet ortogonalitási összefüggései fennállnak a  $\mathbf{D}(R)$  mátrixokra vonatkozóan, feltéve, hogy azok irreducibilis ábrázolást képeznek.

A (11.26) egyenlet a

$$\begin{aligned} \psi_\nu(x'_1, y'_1, z'_1, \dots, x'_n, y'_n, z'_n) &= \\ &= \sum_\kappa D(R^{-1})_{\kappa\nu} \psi_\kappa(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n) = \\ &= \sum_\kappa D(R)_{\nu\kappa}^* \psi_\kappa(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n). \end{aligned} \quad (11.26a)$$

alakban is felírható. Látjuk azt is, hogy csak el nem tűnő determinánsú ábrázolásokkal lesz dolgunk.

<sup>5</sup> Mínt hogy a sajátfüggvények mindig ortogonálisaknak választhatók, ez különösen egyszerű bizonyítása annak a ténynek, hogy az ábrázolások mindenkor unitérré tehetők.

## 12. AZ ÁBRÁZOLÁSELMÉLET ALGEBRÁJA

A következőkben bizonyos algebrai megfontolásokat ismertetünk, melyek az előző fejezetek eredményeihez kapcsolódnak. Először néhány tisztán matematikai jellegű tételt kell bevezetnünk.

1. Legyen  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$  a  $\mathbf{P}_R$  unitér operátorok csoportjának  $l_j$  dimenziós irreducibilis unitér ábrázolása, az  $l_j$  számú  $f_1^{(j)}, f_2^{(j)}, \dots, f_{l_j}^{(j)}$  sajátfüggvényre pedig minden  $\mathbf{P}_R$  mellett teljesüljenek a

$$\mathbf{P}_R f_\mu^{(j)} = \sum_{\lambda=1}^{l_j} D^{(j)}(R)_{\lambda\mu} f_\lambda^{(j)} \quad (\mu=1, 2, \dots, l_j) \quad (12.1)$$

egyenletek. Azt mondjuk, hogy az  $f_\kappa^{(j)}$  függvény a  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$  irreducibilis ábrázolás  $\kappa$ -adik sorához tartozik, ha léteznek olyan  $f_1^{(j)}, f_2^{(j)}, \dots, f_{\kappa-1}^{(j)}, f_{\kappa+1}^{(j)}, \dots, f_{l_j}^{(j)}$  „partner”-függvények, hogy valamennyi  $f_\lambda^{(j)}$  eleget tesz a (12.1) egyenleteknek. Ennek a kijelentésnek az értelme csak akkor jól meghatározott, ha a  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$ -ek teljesen meg vannak adva, nem csupán hasonlósági transzformáció erejéig.

Ha (12.1)-et megszorozzuk  $D^{(j)}(R)_{\lambda'\kappa}^*$ -gal és az egész csoportra összegezzük (ill. folytonos csoport esetében integrálunk), az ábrázolási mátrixelemek ortogonalitásából következik, hogy

$$\begin{aligned} \sum_R D^{(j)}(R)_{\lambda'\kappa}^* \mathbf{P}_R f_\kappa^{(j)} &= \sum_R \sum_\lambda D^{(j)}(R)_{\lambda'\kappa}^* D^{(j)}(R)_{\lambda\kappa} f_\lambda^{(j)} = \\ &= \sum_\lambda \frac{h}{l_j} \delta_{jj'} \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{\kappa\kappa} f_\lambda^{(j)} = \frac{h}{l_j} \delta_{jj'} \delta_{\kappa\kappa} f_\kappa^{(j)}. \end{aligned} \quad (12.2)$$

Speciálisan

$$\sum_R D^{(j)}(R)_{\kappa\kappa}^* \mathbf{P}_R f_\kappa^{(j)} = \frac{h}{l_j} f_\kappa^{(j)} \quad (12.3)$$

fennáll minden  $f_\kappa^{(j)}$  függvényre, mely a  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$  irreducibilis ábrázolás  $\kappa$ -adik sorához tartozik. Megfordítva, minden  $f_\kappa^{(j)}$  függvényhez, mely (12.3)-nak eleget tesz, található az  $f_1^{(j)}, f_2^{(j)}, \dots, f_{\kappa-1}^{(j)}, f_{\kappa+1}^{(j)}, \dots, f_{l_j}^{(j)}$  partnerfüggvényeknek olyan sorozata, hogy (12.1) a teljes sorozatra teljesül. A (12.3) egyenlet annak szükséges és elégséges feltétele, hogy  $f_\kappa^{(j)}$  a  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$  irreducibilis ábrázolás  $\kappa$ -adik sorához tartozzék.

A (12.2) egyenletből következik, hogy ha az  $f^{(j)}$  függvénynek egyáltalán vannak partnerfüggvényei, ezeket az

$$f_{\lambda}^{(j)} = \frac{l_j}{h} \sum_S D^{(j)}(S)_{\lambda\kappa}^* \mathbf{P}_S f_{\kappa}^{(j)} \quad (12.3a)$$

egyenleteknek kell megadnia. Ezt tekintjük az  $f_1^{(j)}, \dots, f_{\kappa-1}^{(j)}, f_{\kappa+1}^{(j)}, \dots, f_{l_j}^{(j)}$  függvények definíciójának. A feltevés szerint (12.3a) még a  $\lambda = \kappa$  speciális esetre is igaz, tehát (12.3a) minden  $f_{\lambda}^{(j)}$ -ra fennáll. A (12.3a) egyenlet jobb oldalát közvetlenül (12.1) egyenletbe,  $f_{\mu}^{(j)}$  és  $f_{\lambda}^{(j)}$  helyére helyettesítve látjuk, hogy (12.1) valóban fenn áll, hacsak

$$\mathbf{P}_R \frac{l_j}{h} \sum_S D^{(j)}(S)_{\mu\kappa}^* \mathbf{P}_S f_{\kappa}^{(j)} = \sum_{\lambda} D^{(j)}(R)_{\lambda\mu} \frac{l_j}{h} \sum_S D^{(j)}(S)_{\lambda\kappa}^* \mathbf{P}_S f_{\kappa}^{(j)}.$$

Ez az egyelőség azonban azonosan teljesül. Ezt azonnal láthatjuk, ha  $\mathbf{P}_{R^{-1}}$  operációt mindkét oldalra alkalmazzuk, majd elvégezzük a  $D^{(j)}(R)_{\lambda\mu} = D^{(j)}(R^{-1})_{\lambda\mu}^*$  helyettesítést. Minthogy a  $D^{(j)}$  mátrixok ábrázolást alkotnak, kapjuk:

$$\begin{aligned} \sum_S D^{(j)}(S)_{\mu\kappa}^* \mathbf{P}_S f_{\kappa}^{(j)} &= \sum_S \sum_{\lambda} \mathbf{P}_{R^{-1}} \mathbf{P}_S D^{(j)}(R^{-1})_{\kappa\lambda}^* D^{(j)}(S)_{\lambda\kappa}^* f_{\kappa} = \\ &= \sum_S \mathbf{P}_{R^{-1}S} D^{(j)}(R^{-1}S)_{\mu\kappa}^* f_{\kappa}^{(j)}. \end{aligned}$$

A jobb oldalon  $R^{-1}S$  helyett  $S$ -re is összegezhetünk. Eszerint bármely  $f_{\kappa}^{(j)}$ -hez, mely eleget tesz (12.3)-nak, a (12.3a) egyenlet partnereket definiál oly módon, hogy (12.1) a teljes sorozatra teljesül.

2. Az  $af_{\kappa}^{(j)} + bg_{\kappa}^{(j)}$  lineáris kombináció, ahol az  $f_{\kappa}^{(j)}, g_{\kappa}^{(j)}$  függvények mindegyike a  $\mathbf{D}^{(j)}$  ábrázolás  $\kappa$ -adik sorához tartozik, szintén ugyanennek az ábrázolásnak a  $\kappa$ -adik sorához tartozik. Ez közvetlenül adódik (12.3) linearitásából vagy (12.1) definícióból.

3. Ha  $\mathbf{D}^{(1)}(R), \mathbf{D}^{(2)}(R), \dots, \mathbf{D}^{(c)}(R)$  operátorok csoportjának összes irreducibilis ábrázolása, akkor bármely  $F$  függvény, melyre a  $\mathbf{P}_R$ -ek alkalmazhatók, felírható összegként:

$$F = \sum_{j=1}^c \sum_{\kappa=1}^{l_j} f_{\kappa}^{(j)}, \quad (12.4)$$

ahol  $f_{\kappa}^{(j)}$  a  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$  ábrázolás  $\kappa$ -adik sorához tartozik.

Ennek bizonyítása céljából tekintsük a  $h$  számú  $F = \mathbf{P}_E F, \mathbf{P}_{A_2} F, \mathbf{P}_{A_3} F, \dots, \mathbf{P}_{A_n} F$  függvényt, melyeket a  $h$  számú  $\mathbf{P}_R$  operációnak az  $F$  függvényre való alkalmazásával kapunk. Ha ezek a függvények nem lineárisan függetlenek, elhagyhatunk közülük annyit, hogy a fennmaradó  $F, F_2, \dots, F_{h'}$  függvények között ne álljon fenn lineáris kapcsolat. E  $h'$  számú függvény a  $\mathbf{P}_R$ -ek csoportjának egy ábrázolását

feszíti ki. Ha a  $\mathbf{P}_R$  operátorok valamelyikét alkalmazzuk ezekre a függvényekre, akkor az eredményül kapott függvény kifejezhető az  $F, F_2, \dots, F_h$  függvények lineáris kombinációja alakjában. Legyen például  $F_k = \mathbf{P}_T F$ ; ekkor  $\mathbf{P}_R \mathbf{P}_T F = \mathbf{P}_{RT} F$ . Ez vagy maga megegyezik az  $F_i$ -k valamelyikével, vagy kifejezhető mint azok lineáris kombinációja. Így tehát

$$\mathbf{P}_R F_k = \sum_{i=1}^{h'} \Delta(R)_{ik} F_i, \quad (12.5)$$

s a  $\Delta(R)$  mátrixok a  $\mathbf{P}_R$ -ek csoportjának ábrázolását képezik. Ez megfelel a saját-függvények ama tulajdonságának, amelyet az előző fejezet végén tárgyaltunk: segítségükkel ábrázolások generálhatók. Részletesen:

$$\begin{aligned} \sum_n \Delta(SR)_{nk} F_n &= \mathbf{P}_{SR} F_k = \mathbf{P}_S \mathbf{P}_R F_k = \mathbf{P}_S \sum_i \Delta(R)_{ik} F_i = \\ &= \sum_i \sum_n \Delta(R)_{ik} \Delta(S)_{ni} F_n, \end{aligned}$$

és mivel az  $F_n$ -ek lineárisan függetlenek:

$$\Delta(S)\Delta(R) = \Delta(SR).$$

Az ábrázolások generálásának e módja fontos szerepet fog játszani, amikor majd expliciten meghatározzuk a szimmetrikus csoport irreducibilis ábrázolásait. A kiindulásként felvett  $F$  függvény speciális választásával sokféle ábrázolást kaphatunk, melyek az irreducibilis ábrázolások meghatározásához hasznosak lesznek.

Ha a (12.5) ábrázolás nem irreducibilis, azt hasonlósági transzformáció segítségével kiredukálhatjuk; ez a hasonlósági transzformáció az összes  $\Delta(R)$  mátrixot egyidejűleg a

$$\begin{pmatrix} \mathbf{D}^{(1)}(R) & \mathbf{0} & \dots \\ \mathbf{0} & \mathbf{D}^{(2)}(R) & \dots \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} = \alpha^{-1} \Delta(R) \alpha \quad (12.E.1)$$

alakra hozza, ahol a  $\mathbf{D}$ -k mind uniter irreducibilis ábrázolások. Ekkor a 11. fejezet 6. szakaszának megfelelően  $\alpha$  segítségével az  $F_k$  függvények olyan lineáris kombinációi képezhetők, melyek  $\mathbf{P}_R$  hatása alatt (12.E.1) szerint transzformálódnak, s amelyek ily módon a  $\mathbf{D}^{(1)}, \mathbf{D}^{(2)}, \dots$  ábrázolások különböző soraihoz tartoznak. Megfordítva, minthogy  $\alpha$ -nak van inverze, az  $F_k$  függvény, és így  $F$  is kifejezhető ezek lineáris kombinációjaként. Ezzel igazoltuk, hogy tetszőleges függvény kifejezhető a (12.4) összeg alakjában.

A (12.4) előállításban fellépő  $f_*^{(j)}$  függvények explicit kiszámítása céljából alkal-

mazzuk a  $\mathbf{P}_R$  operátort (12.4)-re, szorozzuk  $D^{(j)}(R)_{\kappa\kappa}^*$ -gal, azután összegezzünk valamennyi  $R$ -re. Kapjuk:

$$\sum_R D^{(j)}(R)_{\kappa\kappa}^* \mathbf{P}_R F = \sum_{j'} \sum_{\kappa'} \sum_R D^{(j)}(R)_{\kappa\kappa}^* \mathbf{P}_R f_{\kappa'}^{(j')} = \frac{h}{l_j} f_{\kappa}^{(j)}. \quad (12.6)$$

A (12.6) egyenletben az utolsó lépés (12.3)-ból következik.

A (12.6) egyenlet mutatja, hogy  $\sum_R D^{(j)}(R)_{\kappa\kappa}^* \mathbf{P}_R F$  a  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$  ábrázolás  $\kappa$ -adik sorához tartozik teljesen tetszés szerint választható  $F$  mellett; ezt úgy igazolhatjuk, hogy  $f_{\kappa}^{(j)}$  kifejezését behelyettesítjük (12.3)-ba, mely ekkor az

$$\frac{l_j}{h} \sum_S D^{(j)}(S)_{\kappa\kappa}^* \mathbf{P}_S \left( \sum_R D^{(j)}(R)_{\kappa\kappa}^* \mathbf{P}_R F \right) = \sum_R D^{(j)}(R)_{\kappa\kappa}^* \mathbf{P}_R F$$

alakot ölti. Ha a bal oldalon elvégezzük az  $SR=T$  helyettesítést és  $S$  helyett  $T$ -re összegezzünk, a bal oldal láthatóan azonossá válik a jobb oldallal:

$$\sum_S D^{(j)}(S)_{\kappa\kappa}^* \mathbf{P}_S \cdot \left( \sum_R D^{(j)}(R)_{\kappa\kappa}^* \mathbf{P}_R F \right) = \sum_{T,R} D^{(j)}(TR^{-1})_{\kappa\kappa}^* \mathbf{P}_T D^{(j)}(R)_{\kappa\kappa}^* F,$$

$$\sum_{T,R} \sum_{\lambda} D^{(j)}(T)_{\kappa\lambda}^* D^{(j)}(R^{-1})_{\lambda\kappa}^* D^{(j)}(R)_{\kappa\kappa}^* \mathbf{P}_T F = \frac{h}{l_j} \left( \sum_T D^{(j)}(T)_{\kappa\kappa}^* \mathbf{P}_T F \right)$$

Az itt fellépő,  $R$ -re vonatkozó összegezést (9.31a) alatt végeztük el.

Az

$$F = \sum_j \sum_{\kappa} \sum_R \frac{l_j}{h} D^{(j)}(R)_{\kappa\kappa}^* \mathbf{P}_R F \quad (12.6a)$$

azonosság teljesen tetszőleges  $F$  mellett érvényes, tekintet nélkül arra, hogy mi a  $h$  számú  $\mathbf{P}_R F$  mennyiség értéke. Ez csak abban az esetben lehetséges, ha

$$\sum_{j=1}^c \sum_{\kappa=1}^{l_j} \frac{l_j}{h} D^{(j)}(R)_{\kappa\kappa}^* \begin{cases} = 1; & \text{ha } R=E, \\ = 0; & \text{ha } R \neq E. \end{cases}$$

Az  $R=E$  esetben, mivel  $D^{(j)}(E)_{\kappa\kappa} = 1$ , ez a

$$\sum_{j=1}^c \sum_{\kappa=1}^{l_j} \frac{l_j}{h} = \sum_{i=1}^c \frac{l_i^2}{h} = 1$$

egyenlőséget adja. Vagyis: az összes irreducibilis ábrázolás dimenzióinak négyzetösszege egyenlő az ábrázolt csoport rendjével. Ezt a tételt a 92. oldalon megfogalmaztuk, ott azonban nem bizonyítottuk.

4. Két függvény,  $f_{\kappa}^{(j)}$  és  $g_{\kappa}^{(j)}$ , amelyek különböző irreducibilis ábrázolásokhoz tartoznak, vagy ugyanannak az irreducibilis ábrázolásnak a különböző soraihoz,



ortogonális egymásra. Az adott  $f_{\kappa}^{(j)}, g_{\kappa}^{(j')}$  mellett léteznek olyan  $f_1^{(j)}, f_2^{(j)}, f_3^{(j)}, \dots$  és  $g_1^{(j')}, g_2^{(j')}, g_3^{(j')}, \dots$  partnerfüggvények, hogy a definíció értelmében fennáll

$$\mathbf{P}_R f_{\kappa}^{(j)} = \sum_{\lambda} D^{(j)}(R)_{\lambda\kappa} f_{\lambda}^{(j)}, \quad \mathbf{P}_R g_{\kappa}^{(j')} = \sum_{\lambda} D^{(j')}(R)_{\lambda'\kappa'} g_{\lambda}^{(j')}.$$

Míthogy  $\mathbf{P}_R$  unitér operátor,

$$(f_{\kappa}^{(j)}, g_{\kappa'}^{(j')}) = (\mathbf{P}_R f_{\kappa}^{(j)}, \mathbf{P}_R g_{\kappa'}^{(j')}) = \sum_{\lambda} \sum_{\lambda'} D^{(j)}(R)_{\lambda\kappa}^* D^{(j')}(R)_{\lambda'\kappa'} (f_{\lambda}^{(j)}, g_{\lambda'}^{(j')}).$$

Ezt az egyenletet a csoport valamennyi  $\mathbf{P}_R$  operátorára összegezve kapjuk:

$$h(f_{\kappa}^{(j)}, g_{\kappa'}^{(j')}) = \frac{h}{I_j} \delta_{j,j'} \delta_{\kappa\kappa'} \sum_{\lambda} (f_{\lambda}^{(j)}, g_{\lambda}^{(j')}). \quad (12.8)$$

Ebből következik a fent megfogalmazott alapvető tétel:  $(f_{\kappa}^{(j)}, g_{\kappa'}^{(j')})$  eltűnik, ha  $j \neq j'$  vagy  $\kappa \neq \kappa'$ . Másrészt  $(f_{\kappa}^{(j)}, g_{\kappa}^{(j)})$  értéke valamennyi partner esetében egyenlő, azaz  $\kappa$ -tól nem függ.

5. Az előző fejezetekben beszéltünk olyan operátorokról, amelyek szimmetrikusak a  $\mathbf{P}_R$ -ekkel szemben. Azt találtuk pl., hogy a  $\mathbf{H}$  Hamilton-operátor szimmetrikus a (11.E.1), (11.E.2) operációkkal szemben. Ez azt jelenti, hogy  $\mathbf{P}_R$  a függvényeken csak olyan változásokat eredményez, amelyek  $\mathbf{H}$ -t nem érintik, mint pl. az azonos részecskék felcserélése stb.

Tegyük most ezt a fogalmat valamivel pontosabbá. A szimmetrikus operátorok, amelyeket vizsgálunk, mindenkor hermitikusak és bizonyos fizikai mennyiségeknek felelnek meg, amilyen pl. az energia. A  $\mathbf{P}_R$ -ek, amelyekkel szemben valamely operátor invariáns, unitér operátorok. Ezek viszont nem fizikai mennyiségeknek felelnek meg; ehelyett adott állapot hullámfüggvényét valamely más állapot hullámfüggvényébe transzformálják. Valamely  $\mathbf{S}$  operátort szimmetrikusnak mondunk, ha az valamennyi  $\mathbf{P}_R \varphi$ -re úgy hat, mint a  $\varphi$ -re. Nyomban látni fogjuk, hogy ez a definíció megegyezik az előző fejezetben megadottal.

Az a megállapítás, hogy  $\mathbf{S}$  a  $\mathbf{P}_R$ -ek szempontjából szimmetrikus operátor, s hogy  $\psi$  egyike sajátfüggvényeinek,  $\mathbf{S}\psi = s\psi$ , azt jelenti, hogy a  $\psi$  állapotban annak a mennyiségnek a mérése, melynek  $\mathbf{S}$  megfelel, bizonyosan az  $s$  értéket adja. Ennek azután  $\mathbf{P}_R \psi$ -re is igaznak kell lennie; azaz:  $\mathbf{P}_R \psi$  szükségképpen sajátfüggvénye  $\mathbf{S}$ -nek az  $s$  sajátérték mellett.

Alkalmazva  $\mathbf{P}_R$ -et az  $\mathbf{S}\psi = s\psi$  egyenlet mindkét oldalára, kapjuk:  $\mathbf{P}_R \mathbf{S}\psi = \mathbf{P}_R s\psi = s\mathbf{P}_R \psi$ . Ez, valamint  $\mathbf{S}\mathbf{P}_R \psi = s\mathbf{P}_R \psi$ , maga után vonja  $\mathbf{S}\mathbf{P}_R \psi = \mathbf{P}_R \mathbf{S}\psi$  fennállását. Ennek minden sajátfüggvényre igaznak kell lennie, mivel az utóbbi egyenletben a sajátérték már nem lép fel. Ez az összefüggés lineáris, így a sajátfüggvények tetszőleges lineárkombinációjára, tehát minden függvényre is igaz. Az tehát az  $\mathbf{S}\mathbf{P}_R = \mathbf{P}_R \mathbf{S}$  operátorazonosság fennállását jelenti; egy operátor, amely a  $\mathbf{P}_R$ -ekkel

szemben szimmetrikus, minden  $\mathbf{P}_R$ -rel kommutál. Mindegy, hogy  $\mathbf{S}$ -et és  $\mathbf{P}_R$ -et milyen sorrendben alkalmazzuk valamely függvényre. Szokás azt is mondani, hogy  $\mathbf{S}$  invariáns a  $\mathbf{P}_R$ -ekkel szemben.

Az  $\mathbf{S}$  operátort (12.1)-re alkalmazva látjuk: ha  $f_{\kappa}^{(j)}$  a  $\mathbf{D}^{(j)}$  ábrázolás  $\kappa$ -adik sorához tartozik, akkor ugyanez  $\mathbf{S}f_{\kappa}^{(j)}$ -ra is igaz. Ekkor (12.8)-ból következik, hogy

$$(f_{\kappa}^{(j)}, \mathbf{S}g_{\kappa'}^{(j')}) = \delta_{jj'} \delta_{\kappa\kappa'} (f_{\lambda}^{(j)}, \mathbf{S}g_{\lambda}^{(j')}) \quad (12.8a)$$

eltűnik, ha  $j \neq j'$  vagy  $\kappa \neq \kappa'$ ; azonkívül  $j = j'$ ,  $\kappa = \kappa'$  mellett független  $\kappa$ -tól.

Bár e tételek valójában igen általános természetűek, széles körben csak a legegyszerűbb operátorcsoportokra vonatkozóan ismertek. Jól ismeretesek e tételek ama csoport esetében, mely az azonosság  $\mathbf{P}_E$  operátorából, s a 11. fejezetben, (11.15) alatt megadott

$$\mathbf{P}_R f(x) = f(-x), \quad \mathbf{P}_R^2 = \mathbf{P}_E$$

operátorból állnak. A  $\mathbf{P}_E, \mathbf{P}_R$  csoport a tükrözési csoport. Két irreducibilis ábrázolása van, és mind a kettő egydimenziós:

$$\mathbf{D}^{(1)}(E) = (1), \quad \mathbf{D}^{(1)}(R) = (1) \quad \text{és} \quad \mathbf{D}^{(2)}(E) = (1), \quad \mathbf{D}^{(2)}(R) = (-1).$$

Az első ábrázoláshoz tartozó függvények esetében (ennek az ábrázolásnak csak egy sora van) a (12.1) egyenlet a

$$\mathbf{P}_R f^{(1)}(x) = f^{(1)}(-x) = 1 \cdot f^{(1)}(x)$$

alakot ölti. Ezek  $x$  páros függvényei. A második ábrázoláshoz tartozó függvények esetében a (12.1) egyenlet:

$$\mathbf{P}_R f^{(2)}(x) = f^{(2)}(-x) = -1 \cdot f^{(2)}(x).$$

Ezek a páratlan függvények. A (12.3) egyenlet  $f^{(1)}(x)$ -re vonatkozóan

$$\mathbf{D}^{(1)}(E) \mathbf{P}_E f^{(1)}(x) + \mathbf{D}^{(1)}(R) \mathbf{P}_R f^{(2)}(x) = 1f^{(1)}(x) + 1f^{(1)}(-x) = \frac{2}{1} f^{(1)}(x),$$

$f^{(2)}(x)$ -re vonatkozóan pedig

$$\mathbf{D}^{(2)}(E) \mathbf{P}_E f^{(2)}(x) + \mathbf{D}^{(2)}(R) \mathbf{P}_R f^{(2)}(x) = 1f^{(2)}(x) - 1f^{(2)}(-x) = \frac{2}{1} f^{(2)}(x).$$

Természetesen jól ismert, hogy minden függvényt fel lehet bontani páros és páratlan részre, és hogy bármely páros függvény ortogonális bármely páratlan függvényre.

6. Az eddigiek folyamán fel kellett tennünk, hogy az ábrázolásokat valamilyen önkényes módon határoztuk meg. Ugyanez az önkény ott van az  $f_{\kappa}^{(j)}$ -k definíciójában is: az a függvény, mely egy adott irreducibilis ábrázolás  $\kappa$ -adik sorához tartozik, nem tartozik általában valamely ekvivalens ábrázolás  $\kappa$ -adik sorához. A most következő tételek függetlenek az ábrázolás speciális alakjától.

Minden olyan  $f_{\kappa}^{(j)}$  függvényre, mely a  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$  irreducibilis ábrázolás  $\kappa$ -adik sorához tartozik, (12.2) szerint fennáll

$$\sum_R \mathbf{D}^{(j)}(R)_{\lambda\lambda}^* \mathbf{P}_R f_{\kappa}^{(j)} = \frac{h}{l_j} \delta_{\kappa\lambda} f_{\kappa}^{(j)}. \quad (12.2a)$$

Összegezve a  $\lambda$ -ra 1-től  $l_f$ -ig, kapjuk:

$$\sum_R \chi^{(j)}(R)^* \mathbf{P}_R f_\kappa^{(j)} = \frac{h}{l_j} f_\kappa^{(j)} \quad (\kappa = 1, 2, \dots, l_j). \quad (12.9)$$

Mínt hogy a (12.9) egyenletben  $\kappa$  többé nem lényeges, (12.9) a  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$  ábrázolás bármely sorához tartozó függvényekre teljesül, s az ilyen függvények tetszőleges lineáris kombinációira is. Az olyan függvényről, mely eleget tesz (12.9)-nek, azt mondjuk, hogy a  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$  ábrázoláshoz tartozik. E tény, a karakterhez hasonlóan, független az ábrázolás speciális alakjától. Megfordítva, minden függvény, mely (12.9)-nek eleget tesz, lineáris kombinációja olyan függvényeknek, melyek rendre a  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$  ábrázolás egy-egy sorához tartoznak. A (12.9) egyenlet szerint

$$\frac{h}{l_j} f^{(j)} = \sum_R \chi^{(j)}(R)^* \mathbf{P}_R f^{(j)} = \sum_\lambda \sum_R D^{(j)}(R)_{\lambda\lambda}^* \mathbf{P}_R f^{(j)}. \quad (12.10)$$

Amint azonban a (12.3) képlet mutatja, minden  $\sum_R D^{(j)}(R)_{\lambda\lambda}^* \mathbf{P}_R F$  alakú függvény  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$   $\lambda$ -adik sorához tartozik.

A (12.10) egyenletből az is következik, hogy az olyan függvények, melyek inekvivalens irreducibilis ábrázolásokhoz tartoznak, egymásra ortogonálisak. Azonfelül minden  $F$  függvény előállítható az

$$F = \sum_{j=1}^c f^{(j)} \quad (12.11)$$

összeg alakjában, ahol  $f^{(j)}$  a  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$  ábrázoláshoz tartozik. Ennek igazolása céljából elegendő, ha a (12.4) egyenletet újból felírjuk az

$$F = \sum_{j=1}^c f^{(j)}, \quad (12.4a)$$

$$f^{(j)} = \sum_{\kappa=1}^{l_j} f_\kappa^{(j)}$$

alakban.

Az adott ábrázoláshoz tartozó függvények eszerint teljes mértékben hasonló tulajdonságúak azokhoz a függvényekhez, melyek valamely ábrázolás adott sorához tartoznak. Meghatározott fajtájú függvények lineárkombinációja ugyanolyan fajtájú függvény; tetszőleges függvény felírható mint összeg, melyben mindegyik fajtából egy függvény lép fel; két különböző fajtájú függvény egymásra mindig ortogonális; végül a  $\mathbf{P}_R$ -ekkel szemben invariáns  $\mathbf{S}$  operátor adott fajtájú függvényt ugyanolyan fajtájú másik függvénybe transzformál.

A függvényekre vonatkozóan itt megfogalmazott általános tételek abban a megállapításban foglalhatók össze, hogy a különböző fajtájú (különböző irreducibilis ábrázolásokhoz, vagy ugyanazon irreducibilis ábrázolás különböző soraihoz tartozó) függvények egy hermitikus operátor

különböző sajátértékeihez tartoznak, mely — hasonlóan az összes  $\mathbf{P}$ -hez és függvényeikhez — felcserélhető minden  $\mathbf{S}$  invariáns operátorral.

Az  $\mathbf{O}_{j\kappa}$  operátornak, mely  $F$ -et az

$$\mathbf{O}_{j\kappa}F = \sum D^{(j)}(R)_{\kappa\kappa}^* \mathbf{P}_R F, \quad (12.12)$$

ill. az e szakaszban vizsgált esetben az

$$\mathbf{O}_j F = \sum_R D^{(j)}(R)^* \mathbf{P}_R F$$

függvénybe transzformálja, két sajátértéke van: 0 és  $h/l_j$ . Mindazon függvények, melyek a  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$  ábrázolás  $\kappa$ -adik sorához, vagy egyszerűen a  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$  ábrázoláshoz tartoznak, a  $h/l_j$  sajátértéknek felelnek meg. Azok a függvények, amelyek az irreducibilis  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$  ábrázolás más soraihoz (vagy más irreducibilis ábrázolásokhoz) tartoznak, a 0 sajátértéknek felelnek meg.

Amit a fenti tételek megadnak, az nem egyéb, mint a (12.12), (12.12a) operátorok sajátfüggvényeinek *ortogonalitási és teljességi összefüggései*. A különbség ezek és a közösleges hermitikus operátorok között kizárólag abból a körülményből adódik, hogy (12.12) és (12.12a) *végtelen-szeresen elfajult operátorok*, mivel az egyes sajátértékekhez tartozó lineárisan független sajátfüggvények száma végtelen. A matematikai irodalomban az  $l_j \mathbf{O}_j/h$  operátorokat idempotenseknek vagy projekcióoperátoroknak is nevezik, mivel  $(l_j \mathbf{O}_j/h)^2 = l_j \mathbf{O}_j/h$ .

7. Most visszatérünk a  $\mathbf{H}\psi = E\psi$  Schrödinger-egyenlethez. Az előző fejezetben láttuk, hogy a  $\mathbf{P}_R$ -ek csoportjának (hasonlósági transzformáció erejéig) egyértelműen meghatározott ábrázolása tartozik  $\mathbf{H}$  minden sajátértékéhez. Másrésztől azt is tudjuk, hogy ezzel a hasonlósági transzformációval szabadon rendelkezhetünk, mivel az egyszerűen a sajátfüggvények használni kívánt lineáris kombinációit határozza meg.

Sok szempontból előnyös feltenni, hogy az egyes sajátértékekhez tartozó ábrázolások, amennyiben nem irreducibilisek, kiredukált alakúak:

$$\Delta(R) = \begin{pmatrix} \mathbf{D}^{(1)}(R) & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D}^{(2)}(R) & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{D}^{(s)}(R) \end{pmatrix}. \quad (12.13)$$

Itt  $\mathbf{D}^{(1)}(R), \dots, \mathbf{D}^{(s)}(R)$  egyszerűen irreducibilis ábrázolásokat jelölnek (melyek nem mind különbözőek szükségképpen); ezek  $\Delta(R)$  irreducibilis komponensei (számuk  $s$ ). Dimenzióik legyenek rendre  $l_1, l_2, \dots, l_s$ . Jelöljük a sajátfüggvények olyan lineáris kombinációit, melyek az adott sajátértékhez tartozó ábrázolás eme alakjának felelnek meg, a következőképpen:

$$\psi_1^{(1)}, \psi_2^{(1)}, \dots, \psi_{l_1}^{(1)}, \psi_1^{(2)}, \psi_2^{(2)}, \dots, \psi_{l_2}^{(2)}, \dots, \psi_1^{(s)}, \psi_2^{(s)}, \dots, \psi_{l_s}^{(s)}.$$

Írjuk fel most az előző fejezet (11.23) egyenletét e sajátérték esetére:

$$\mathbf{P}_R \psi_{\kappa}^{(j)} = \sum_{\nu} D^{(j)}(R)_{\nu\kappa} \psi_{\nu}^{(j)} \quad (12.14)$$

A (12.13) alatt álló zérusok folytán  $\mathbf{P}_R \psi_{\kappa}^{(j)}$  közvetlenül kifejezhető az ugyanazon felső indexszel jellemzett  $\psi_{\nu}$ -k lineáris kombinációjaként. A (12.14) egyenletből azonban következik, hogy a  $\psi^{(j)}$  függvények kielégítik (12.3)-at. A  $\psi_{\kappa}^{(j)}$  sajátfüggvény a  $\mathbf{D}^{(j)}$  ábrázolás  $\kappa$ -adik sorához tartozik és partnerei  $\psi_1^{(j)}, \psi_2^{(j)}, \dots, \psi_R^{(j)}$ .

A (12.14) transzformációs képlet alakja azt sugallja, hogy (12.13) sajátértékei úgy tekintendők, mint  $s$  számú, véletlenül egybeeső sajátérték. A  $\psi_1^{(1)}, \psi_2^{(1)}, \dots, \psi_{l_1}^{(1)}$  sajátfüggvények az első sajátértékhez tartoznak; a  $\psi_1^{(2)}, \psi_2^{(2)}, \dots, \psi_{l_2}^{(2)}$  függvények a másodikhoz; ...; végül a  $\psi_1^{(s)}, \psi_2^{(s)}, \dots, \psi_{l_s}^{(s)}$  függvények az utolsóhoz. E sajátértékek mindegyikéhez egy irreducibilis ábrázolás tartozik. Következésképpen, ha az egész sajátértékspektrumot ily módon szemléljük, kijelenthetjük, hogy minden egyes sajátértékhez egy irreducibilis ábrázolás, és minden sajátfüggvényhez eme irreducibilis ábrázolás egy sora tartozik. Valamely sajátfüggvény partnerei: az ugyanezen sajátértékhez tartozó többi sajátfüggvény.

Általában bármely adott ábrázoláshoz igen sok sajátérték tartozik. Így az ábrázolásokra vonatkozó képleteket tovább egységesíthetjük, azonos alakúnak választva az ábrázolásokat minden olyan szint esetében, amelyhez ugyanaz az ábrázolás tartozik.

Ha valamely sajátértékhez tartozó sajátfüggvények mind egymás partnerei, „normális elfajulás”-ról beszélünk. Ha azonfelül több sajátérték egybeesik, mint azok, amelyekhez (12.13) tartozik, azt mondjuk, hogy véletlen elfajulás áll fenn. Ez igen szokatlan esetnek tekintendő, s a Schrödinger-egyenlet fontos esetében csak kivételesen fordul elő.

8. Abból a célból, hogy a fent bevezetett fogalmakhoz hozzászokjunk, alkalmazzuk őket a Rayleigh—Schrödinger-féle perturbációszámításra. Induljunk ki a „perturbálatlan” probléma  $E$  sajátértékéből, mely nem mutat véletlen elfajulást. Ekkor a Schrödinger-egyenlet csoportjának megfelelő ábrázolás irreducibilis, a  $\psi_{E1}, \psi_{E2}, \dots, \psi_{E1}$  sajátfüggvények pedig eme irreducibilis ábrázolás különböző soraihoz tartoznak. Adjunk hozzá az eredeti  $\mathbf{H}$  Hamilton-operátorhoz egy  $\lambda \mathbf{V}$  „szimmetrikus perturbációt”, mely olyan tulajdonságú, hogy nem rontja el  $\mathbf{H}$  szimmetriacsoportját, azaz maga is szimmetrikus operátor a fent bevezetett értelemben. Abból a célból, hogy az energia eltolódásának  $\Delta E$  első közelítésére vonatkozó szekuláris egyenletet felállíthassuk, ki kell számítanunk a  $(\psi_{E\kappa}, \mathbf{V} \psi_{E\kappa'})$  mátrixelemeket. A (12.8a) egyenlet szerint ezeknek mind zérus az értéke, ha  $\kappa \neq \kappa'$ ; ha pedig  $\kappa = \kappa'$ ,

akkor mind egyenlők egymással. Ha közös értéküket  $v_E$  jelöli, a szekuláris egyenlet a

$$\begin{vmatrix} \lambda v_E - \Delta E & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda v_E - \Delta E & & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda v_E - \Delta E \end{vmatrix} = 0$$

alakot ölti; ennek  $l$ -szeres gyöke  $\lambda v_E$ . Eszerint első közelítésben a sajátértékek nem hasadnak fel, mivel mondjuk két sajátértékre,  $E_1$ -re és  $E_2$ -re való felhasadásakor  $E_1$ -hez  $l_1$ ,  $E_2$ -höz  $l_2$  sajátfüggvény tartozik ( $l_1 + l_2 = l$ ); az  $E_1$  sajátérték  $l_1$  számú sajátfüggvényének a  $\mathbf{P}$  operátorok hatása alatt egymás között kell transzformálnia. Ezeknek egy  $l_1$ -dimenziós ábrázolás kell megfelelnie. Ez az ábrázolás nem tartalmazhatja a perturbálatlan sajátérték eredeti irreducibilis ábrázolását, minthogy  $l_1 < l$ . Ekkor  $E_1$  eme  $l_1$  sajátfüggvénye ortogonális lenne  $E$ -nek mind az  $l$  sajátfüggvényére, s nem lehetne őket azokból vagy lineáris kombinációikból folytonos módon megkapni. „Szimmetrikus perturbáció” hatása alatt a sajátérték megőrzi a hozzá tartozó irreducibilis ábrázolást és nem hasadhat fel.

9. Tekintsünk most egy sajátértéket, amelynek a  $\Delta(R)$  ábrázolása  $\mathbf{D}^{(1)}(R)$ -et  $a_1$ -szer,  $\mathbf{D}^{(2)}(R)$ -et  $a_2$ -ször, ... tartalmazza. A 7. szakaszban foglaltak szellemében azt is mondhatjuk, hogy  $a_1$  számú sajátérték, melyekhez a  $\mathbf{D}^{(1)}(R)$  ábrázolás,  $a_2$  számú sajátérték, amelyekhez a  $\mathbf{D}^{(2)}(R)$  ábrázolás stb. tartozik, véletlenül egybeesik. Ha most megengedjük, hogy a  $\lambda V$  szimmetrikus perturbáció kifejtsen hatását, a legnagyobb változás, ami bekövetkezhet: a véletlenül elfajult sajátértékek felhasadása. A perturbáció jelenlétében  $a_1$  sajátértékünk lesz, melyekhez a  $\mathbf{D}^{(1)}(R)$  ábrázolás tartozik,  $a_2$  sajátértékünk, amelyekhez a  $\mathbf{D}^{(2)}(R)$  ábrázolás tartozik stb. Általában ez az  $a_1 + a_2 + \dots$  számú sajátérték különböző értékű lesz. Az a tény, hogy a perturbációt követően pontosan  $a_1$  számú sajátértéknek kell fellépnie  $\mathbf{D}^{(1)}(R)$ -rel kapcsolatban, következik abból, hogy a  $\mathbf{D}^{(1)}(R)$  ábrázoláshoz tartozó sajátfüggvények  $a_1 l_1$  száma nem változhat. E szám megváltozása azt jelentené, hogy a sajátfüggvények és az irreducibilis ábrázolások között fennálló megfelelés megváltozott. Fent láttuk, hogy ez folytonosan nem következhet be.

A 8. szakaszban olyan sajátfüggvényt vettünk szemügyre, melynek irreducibilis ábrázolás felel meg. Jóllehet  $l$  számú sajátfüggvény tartozik hozzá, felhasadását szimmetrikus perturbáció nem eredményezheti. Ez indokolja, hogy „természetes elfajulás”-ról beszélünk annak jellemzésére, hogy ez az  $l$  számú lineárisan független sajátfüggvény egy sajátértékhez tartozik.

Az olyan sajátértékre, mely — hasonlóan a fent vizsgálthoz — reducibilis ábrázolásnak felel meg, azt mondjuk, hogy a  $\mathbf{D}^{(1)}(R)$  ábrázoláshoz tartozó sajátértéket  $a_1$ -szer, a  $\mathbf{D}^{(2)}(R)$  ábrázoláshoz tartozó sajátértéket  $a_2$ -ször tartalmazza, és így

tovább. Eme  $a_1, a_2, \dots$  sajátérték egybeesését véletlen elfajulásnak mondjuk, minthogy ennek fellépte a perturbáció eltűnésekor a probléma *Hamilton-függvényének* speciális természetével függ össze. Nem következik az alapul vett probléma szimmetriájából.

10. Az a tény, hogy  $\mathbf{H} + \lambda \mathbf{V}$  sajátfüggvényeiről feltehetjük: azok egy irreducibilis ábrázolás egy sorához tartoznak, nemcsak az egzakt sajátfüggvényekre igaz hanem a perturbációs eljárás minden egyes szukcesszív közelítésében is. Először is nyilvánvaló, hogy az egzakt sajátfüggvényekre — a  $\lambda$  hatványai szerint haladó hatványsorra — igaz. Ha azonban igaz az egész sorra és  $\lambda$  tetszőleges értékeire, akkor igaznak kell lennie külön-külön minden egyes tagra.

Speciálisan az adott  $E$  sajátérték első közelítésben érvényes sajátfüggvényeinek „helyes lineáris kombinációi” úgy választhatók, hogy az  $E$  sajátérték sajátfüggvényei közül csak azoknak legyenek a kombinációi, amelyek ugyanazon irreducibilis ábrázolás ugyanazon sorához tartoznak. Ha az  $E$ -nek megfelelő ábrázolás az adott  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$  irreducibilis ábrázolást csak egyszer tartalmazza, akkor  $E$ -nek csak egy olyan  $\psi_{\kappa}^{(j)}$  sajátfüggvénye van, mely  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$ -nek — mondjuk — a  $\kappa$ -adik sorához tartozik;  $\psi_{\kappa}^{(j)}$  ekkor máris a „helyes lineáris kombináció”. A megfelelő sajátérték

$$(\psi_{\kappa}^{(j)}, (\mathbf{H} + \lambda \mathbf{V})\psi_{\kappa}^{(j)}).$$

Ha az  $E$ -nek megfelelő ábrázolás a  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$  irreducibilis ábrázolást többször mondjuk  $a_j$ -szer tartalmazza, akkor  $E$ -nek  $a_j$  számú olyan sajátfüggvénye van  $\psi_{\kappa 1}^{(j)}, \psi_{\kappa 2}^{(j)}, \psi_{\kappa 3}^{(j)}, \dots, \psi_{\kappa a_j}^{(j)}$ , amelyek  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$ -nek ugyanazon sorához (a  $\kappa$ -adikhoz) tartoznak. A helyes lineáris kombinációk ezen  $a_j$  sajátfüggvény lineáris kombinációi; azokat számítás nélkül nem lehet teljesen meghatározni.

Mindamellet minden esetben érdemes kezdettől fogva  $E$  sajátfüggvényeinek ama  $\psi_{\kappa \rho}^{(j)}$  lineáris kombinációit használni, melyek valamely irreducibilis ábrázolás egy sorához tartoznak. Ekkor (12.8a) folyományaképpen a

$$(\psi_{\kappa \rho}^{(j)}, \mathbf{V}\psi_{\kappa' \rho'}^{(j)}) = V_{j\kappa \rho; j' \kappa' \rho'} = \delta_{jj'} \delta_{\kappa \kappa'} v_{\rho \rho'}^j$$

kifejezéseknek  $j \neq j'$  vagy  $\kappa \neq \kappa'$  mellett el kell tűnniök. Az  $E$ -re érvényes

$$|V_{j\kappa \rho; j' \kappa' \rho'} - \Delta E \cdot \mathbf{1}| = 0$$

szekuláris egyenlet ily módon lényegesen egyszerűbb lesz. Amint a közelebbi vizsgálat mutatja, az egyes kicsiny „irreducibilis szekuláris egyenletekre” bomlik fel; ezek dimenziói az  $a_j$  számok, melyek megadják, hogy hányszor tartalmazza az adott irreducibilis ábrázolást az  $E$  sajátértéknek megfelelő ábrázolás.

A  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$  ábrázolás sajátértékeinek és sajátfüggvényeinek megváltozása még magasabb közelítésben is kiszámítható, egyedül eme ábrázolás sajátértékeinek és sajátfüggvényeinek felhasználásával. Elegendő, ha csak azokat a sajátfüggvényeket

vesszük tekintetbe, amelyek eme ábrázolás adott sorához tartoznak. Az (5.22) egyenletnek megfelelően a második közelítés pl.

$$F_{k\nu} = E_k + \lambda(\psi_{k\nu}, \mathbf{V}\psi_{k\nu}) + \lambda^2 \sum_{E_l \neq E_k} \frac{|(\psi_l, \mathbf{V}\psi_k)|^2}{E_k - E_l}.$$

Ha most  $\psi_l$  a  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$ -től különböző ábrázoláshoz tartozik, vagy pedig a  $\mathbf{D}^{(j)}$ -nek más sorához tartozik, mint amelyekhez a  $\psi_{k\nu}$  sajátfüggvények tartoznak, akkor a  $(\psi_l, \mathbf{V}\psi_{k\nu})$  kifejezés eltűnik, és egyszerűen kívül hagyható.

11. Ha a  $\mathbf{H}$ -t perturbáló  $\lambda\mathbf{V}$  operátor nem invariáns a  $\mathbf{P}$ -k teljes csoportjával szemben, hanem csak egy alcsoporttal szemben, akkor olyan sajátfüggvényeket kell bevezetnünk, amelyek eme alcsoport irreducibilis ábrázolásaihoz tartoznak. Feltesszük, hogy  $\mathbf{H}$  sajátfüggvényei és sajátértékei a  $\mathbf{P}$ -k alkotta teljes csoport irreducibilis ábrázolásainak felelnek meg. *Azok a mátrixok, amelyek az alcsoport elemeinek felelnek meg, eme alcsoport ábrázolásaként értelmezhetők.* Valamennyi  $\mathbf{P}$ -re, speciálisan az alcsoportba tartozó  $\mathbf{P}_R$ -ekre felírható:

$$\mathbf{P}_R \psi_{\lambda}^{(j)} = \sum_{\lambda} \mathbf{D}^{(j)}(R)_{\lambda\lambda} \psi_{\lambda}^{(j)}.$$

Az alcsoportba tartozó  $R$ -ek mellett azonban a  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$ -ek nem szükségszerűen irreducibilisek, s ahhoz, hogy az alcsoport irreducibilis ábrázolásait megkapjuk, a  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$ -eket ki kell redukálnunk. *A  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$ -eknek mint az alcsoport ábrázolásának a kiredukálásakor kapott irreducibilis komponensek száma és típusa megadja nekünk ama sajátértékek számát és típusát, amelyekre a szemügyre vett sajátérték felhasadhat.*

Látjuk, hogy a *Schrödinger*-egyenlet sajátértékeinek jellemzéséhez szükség van  $n$  elem szimmetrikus csoportja s a háromdimenziós forgáscsoport irreducibilis ábrázolásainak ismeretére. Ezért most rátérünk eme ábrázolások meghatározására.

12. Ebben az egész fejezetben a  $\mathbf{P}_R$  operátorokról csak annyit kellett feltennünk, hogy csoportot alkotnak, s hogy lineárisak és unitérek [a (11.22) egyenletet pl. *nem* használtuk fel]. Ezenkívül csak azt tettük fel, hogy a  $\mathbf{P}_R$ -ek  $\mathbf{H}$  adott sajátértékhez tartozó sajátfüggvényeit ugyanazon sajátértékhez tartozó sajátfüggvényekbe transzformálják. Valójában ezekből a feltevésekből már következik a (11.23) transzformációs egyenlet (amelyet itt a tárgyalás kiindulópontjaként használtunk), valamint az a tény, hogy a benne előforduló *együtthatók* a  $\mathbf{P}_R$  operátorok csoportjának ábrázolását képezik.

Megjegyezzük itt, hogy azokra az operátorokra, amelyek a spinnel rendelkező részecskék sajátfüggvényei esetében a  $\mathbf{P}_R$ -ek szerepét betöltik (ezeket  $\mathbf{O}_R$ -rel fogjuk jelölni), a (11.22) egyenlet többé nem érvényes. Azonkívül a konfigurációs tér szimmetriacsoportja eme operátorok csoportjával nem izomorf, csupán homomorf. A (11.23) egyenlet együtthatói ekkor az  $\mathbf{O}_R$  operátorok csoportjának, nem pedig a konfigurációs tér szimmetriacsoportjának képezik ábrázolását. E fejezet összes többi tétele, így az, amely a különböző irreducibilis ábrázolásokhoz tartozó sajátfüggvények ortogonalitását mondja ki, változatlan marad.



### 13. A SZIMMETRIKUS CSOPORT

1. Az  $n$ -edfokú szimmetrikus csoport elemei:  $n$  objektum permutációi. A rendje  $n$ . Azt a permutációt, amely az 1-et  $\alpha_1$ -gyel, a 2-t  $\alpha_2$ -vel, ..., és végül az  $n$ -et  $\alpha_n$ -nel helyettesíti, a következőképpen jelöljük:  $\begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ \alpha_1 & \alpha_2 & \dots & \alpha_n \end{pmatrix}$ . Ez megegyezik a  $\begin{pmatrix} k_1 & k_2 & \dots & k_n \\ \alpha_{k_1} & \alpha_{k_2} & \dots & \alpha_{k_n} \end{pmatrix}$  permutációval, mivel  $k$ -t ( $k=1, 2, \dots, n$ ) mind a ketten  $\alpha_k$ -ba viszik át. Itt  $k_1, k_2, \dots, k_n$  az  $1, 2, 3, \dots, n$  számokat jelölik tetszőlegesen adott

sorrendben. Két permutáció,  $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ \alpha_1 & \alpha_2 & \dots & \alpha_n \end{pmatrix}$  és  $B = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ \beta_1 & \beta_2 & \dots & \beta_n \end{pmatrix}$

szorzatán a kettőnek egymást követő alkalmazását értjük. Az  $A$  permutáció a  $k$ -t  $\alpha_k$ -ba,  $B$  ezt  $\beta_{\alpha_k}$ -ba transzformálja. Így tehát  $AB$  a  $k$ -t  $\beta_{\alpha_k}$ -ba transzformálja. A (11.E.1) transzformációk az  $n$ -edfokú szimmetrikus csoporttal izomorf csoportot alkotnak; e transzformációk az  $x_1, x_2, \dots, x_n$  pontot at  $x_{\alpha_1}, x_{\alpha_2}, \dots, x_{\alpha_n}$  pontba viszik át; azok tehát a fenti  $A$  permutációnak felelnek meg.

A permutációknak van egy másik jelölése is. Ez a permutációkat „ciklusokra bontja fel”. Az  $(r_1 r_2 \dots r_\lambda)$  ciklus olyan permutáció, amely minden egyes  $r_k$  elemet a rákövetkezővel,  $r_{k+1}$ -gyel helyettesít; kivételt csak a ciklus utolsó eleme, az  $r_\lambda$  képez, melynek helyére az első elem,  $r_1$  lép. A  $(r_1 r_2 \dots r_\lambda)$  ciklus azonos a  $\begin{pmatrix} r_1 r_2 \dots r_\lambda \\ r_2 r_3 \dots r_1 \end{pmatrix}$  permutációval; azonkívül ekvivalens az  $(r_2 r_3 \dots r_\lambda r_1)$  vagy az  $(r_3 r_4 \dots r_\lambda r_1 r_2)$  ciklussal.

Az olyan ciklusok, amelyeknek nincs közös elemük, kommutálnak. P1.

$$(1 \ 3 \ 5)(2 \ 4 \ 6 \ 7) = (2 \ 4 \ 6 \ 7)(1 \ 3 \ 5) = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 5 & 2 & 4 & 6 & 7 \\ 3 & 5 & 1 & 4 & 6 & 7 & 2 \end{pmatrix}.$$

Valamely permutációnak ciklusokra való felbontása azt jelenti, hogy a permutációt kommutáló ciklusokra bontjuk szét; az egyes ciklusok sorrendje, valamint egy-egy ciklus kezdőeleme így még szabadon választható meg. A ciklusokra való felbontást elvégezhetjük mondjuk az 1 elemen kezdve; utána azt az elemet írjuk le, amely az 1 transzformáltja; azután ennek az elemnek a transzformáltját írjuk le, és így tovább. Utolsóként az az elem jelenik meg, amelynek a transzformáltja az 1;

ez az első ciklusnak az utolsó eleme. A következő lépés: tetszésünk szerint kiválasztunk egy újabb elemet, mely az első ciklusban nem lép fel, és az előbb követett eljárást megismételjük. Ezt az eljárást addig folytatjuk, míg az egész ciklust ki nem merítettük.

Az  $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 3 & 4 & 6 & 2 & 5 & 1 \end{pmatrix}$  permutáció ciklusokra való felbontása például

$(1\ 3\ 6)(2\ 4)(5)$ ; ez ugyanaz, mint  $(3\ 6\ 1)(2\ 4)(5)$  vagy  $(2\ 4)(5)(1\ 3\ 6)$ , minthogy a ciklusok sorrendjének nincs jelentősége.

Két permutáció, ha ugyanannyi ciklusból áll és ciklusaik rendre egyenlő hosszúak, ugyanabba az osztályba tartozik. Az

$$R = (r_1 r_2 \dots r_{\mu_1})(r_{\mu_1+1} r_{\mu_1+2} \dots r_{\mu_2}) \dots (r_{\mu_{e-1}+1} \dots r_{\mu_e}),$$

$$S = (s_1 s_2 \dots s_{\mu_1})(s_{\mu_1+1} s_{\mu_1+2} \dots s_{\mu_2}) \dots (s_{\mu_{e-1}+1} \dots s_{\mu_e})$$

permutációk

$$T = \begin{pmatrix} s_1 s_2 \dots s_{\mu_1} s_{\mu_1+1} s_{\mu_1+2} \dots s_{\mu_2} \dots s_{\mu_{e-1}+1} \dots s_{\mu_e} \\ r_1 r_2 \dots r_{\mu_1} r_{\mu_1+1} r_{\mu_1+2} \dots r_{\mu_2} \dots r_{\mu_{e-1}+1} \dots r_{\mu_e} \end{pmatrix}$$

és

$$T^{-1} = \begin{pmatrix} r_1 r_2 \dots r_{\mu_1} r_{\mu_1+1} r_{\mu_1+2} \dots r_{\mu_2} \dots r_{\mu_{e-1}+1} \dots r_{\mu_e} \\ s_1 s_2 \dots s_{\mu_1} s_{\mu_1+1} s_{\mu_1+2} \dots s_{\mu_2} \dots s_{\mu_{e-1}+1} \dots s_{\mu_e} \end{pmatrix}.$$

segítségével egymásba transzformálhatók:  $S = TRT^{-1}$ . Megfordítva, bármely olyan permutáció ciklusainak a hossza, amelyet  $R$ -ből  $T$  segítségével elvégzett transzformációval kaptunk, ismét rendre  $\mu_1, \mu_2 - \mu_1, \dots, \mu_e - \mu_{e-1}$ .

Ha tehát el akarjuk dönteni, hogy két permutáció ugyanabba az osztályba tartozik-e, írjuk le először a leghosszabb ciklust (vagy ciklusokat) mindkettőben, aztán a fennmaradtak közül a leghosszabbat (vagy leghosszabbakat), és így tovább, egészen addig, amíg végül a legrövidebbet (vagy legrövidebbeket) is fel nem írjuk. Ha az összes ciklusok  $\lambda_1 = \mu_1, \lambda_2 = \mu_2 - \mu_1, \dots, \lambda_e = \mu_e - \mu_{e-1}$  hossza (ahol  $\lambda_1 \cong \lambda_2 \cong \dots \cong \lambda_e$  és  $\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_e = \mu_e = n$ ) ugyanakkora mind a két permutációban, azok ugyanabba az osztályba tartoznak; az ellenkező esetben nem. Az osztályok száma tehát egyenlő a különböző lehetséges ciklushosszak, azaz a  $\lambda_1 \cong \lambda_2 \cong \dots \cong \lambda_e$  és a  $\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_e = n$  feltételeket teljesítő  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_e$  sorozatok számával. Ezt a számot,  $n$  lehetséges felbontásainak a számát, pozitív egész összeadandókra a sorrendre való tekintet nélkül,<sup>1</sup>  $n$  „particiós számának” nevezik. A 9. fejezet szerint a különböző irreducibilis ábrázolások száma egyenlő az osztályok számával és így,  $n$  particiós számával.

<sup>1</sup> Ami a  $\lambda$  számrendszerek számát illeti, nyilvánvalóan ugyanarra az eredményre jutunk, akár figyelmen kívül hagyjuk a sorrendet, akár pedig csak egyetlen sorrendet veszünk tekintetbe.

A negyedfokú szimmetrikus csoportnak (ennek rendje 24) öt különböző osztálya van. A következő elemek mindegyike egy-egy osztályt személyesít meg:  $E=(1)(2)(3)(4)$ ;  $(12)(3)(4)$ ;  $(12)(34)$ ;  $(123)(4)$ ;  $(1234)$ . A csoportnak eszerint öt irreducibilis ábrázolással kell rendelkeznie. A harmadfokú szimmetrikus csoportnak három osztálya van:  $E=(1)(2)(3)$ ;  $(12)(3)$ ;  $(123)$ , annak a három irreducibilis ábrázolásnak megfelelően, amelyeket már a 9. fejezetben tárgyaltunk.

Az egyetlen számjegyből álló ciklusokat gyakran elhagyjuk. Például  $(12)(3)(4)$  helyett egyszerűen  $(12)$  írható.

2. A legegyszerűbb permutációk — az azonosságot nem tekintve — azok, amelyek csupán két elem felcserélését eredményezik. Az ilyen permutáció neve *transzpozíció*; ciklusos írásmódban ez így írható:  $(kl)$ . Pl. az olyan permutáció, mely csak egy ciklusból áll, így írható:

$$(\alpha_1\alpha_2\dots\alpha_\lambda)=(\alpha_1\alpha_2)(\alpha_1\alpha_3)\dots(\alpha_1\alpha_\lambda).$$

Nyilvánvaló, hogy ugyanez vonatkozik több ciklus szorzatára is, és így minden permutációra.

A *páros és páratlan permutációk* fogalma fontos szerepet játszik a determinánsok elméletében. Az

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \cdot & \cdot & & \cdot \\ \cdot & \cdot & & \cdot \\ \cdot & \cdot & & \cdot \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix}$$

determináns értéke egyenlő  $n!$  számú szorzat összegével:

$$|a_{jk}| = \sum \varepsilon_{(\alpha_1\alpha_2\dots\alpha_n)} a_{1\alpha_1} a_{2\alpha_2} \dots a_{n\alpha_n},$$

ahol  $\alpha_1\alpha_2\dots\alpha_n$  végigfut az  $1, 2, \dots, n$  számoknak mind az  $n!$  permutációján, és

$\varepsilon_{(\alpha_1\dots\alpha_n)}$  egyenlő  $+1$ -gyel vagy  $-1$ -gyel annak megfelelően, hogy  $\begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ \alpha_1 & \alpha_2 & \dots & \alpha_n \end{pmatrix}$

páros permutáció-e vagy páratlan; azaz: megfelelően annak, hogy páros vagy páratlan számú transzpozíció szorzataként írható-e fel. (Valamely permutáció többféleképpen bontható fel transzpozíciókra; adott permutáció felbontása azonban vagy mindig páros, vagy mindig páratlan számú transzpozíciót szolgáltat.)

Két páros permutáció szorzata ismét páros permutáció, minthogy ez nyilvánvalóan annyi transzpozíció szorzataként írható fel, amennyit a két permutáció együttvéve tartalmaz. A páros permutációk alcsoportot alkotnak; ez az *alternáló csoport*. Az alternáló csoport indexe 2, mivel a páros és a páratlan permutációk között egy-egyértelmű megfeleltetés létesíthető, mondjuk az  $(12)$  transzpozícióval való szorzás útján. Az alternáló csoport invariáns alcsoportja a szimmetrikus csoportnak; valamely  $P$  páros permutációhoz konjugált  $S^{-1}PS$  elemek ugyancsak

páros permutációk, mivel felírhatók mint kétszerannyi transzpozíció szorzata, mint ahány  $S$ -ben van, plusz annyi, ahány transzpozíció  $P$ -ben van.

Az  $(\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_\lambda) = (\alpha_1 \alpha_2)(\alpha_1 \alpha_3) \dots (\alpha_1 \alpha_\lambda)$  ciklus  $\lambda - 1$  transzpozíció szorzataként írható fel. A

$$\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_q \quad (\text{ahol } \lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_q = n)$$

ciklushosszakkal rendelkező permutáció tehát  $\lambda_1 - 1 + \lambda_2 - 1 + \dots + \lambda_q - 1$  transzpozíció szorzataként írható fel. Az alternáló csoport összes eleme esetében a  $\lambda_\mu - 1$ -ek között páros számú páratlan számnak kell fellépnie; a  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_q$  számok között eszerint páros számú páros számnak kell lennie. Az alternáló csoport permutációi páros számú páros hosszúságú ciklust (két, négy stb. elemből álló ciklust) tartalmaznak.

Az alternáló csoport faktorcsoportjának 2 a rendje. A faktorcsoport két irreducibilis ábrázolásából az egész szimmetrikus csoport két ábrázolását kaphatjuk meg, vagy úgy, hogy az (1) mátrixot rendeljük az alternáló csoport elemeihez és mellékosztályának elemeihez (a páratlan permutációkhoz) is, vagy úgy, hogy az (1) mátrixot rendeljük az alternáló csoport elemeihez és a  $(-1)$  mátrixot a mellékosztályához. Az előbbi megfeleltetés a  $\mathbf{D}^{(0)}(R) = (1)$  azonos ábrázolást szolgáltatja; az utóbbi a  $\mathbf{D}(E) = (1)$ ,  $\mathbf{D}(S) = (-1)$  ábrázolást adja, melynek neve *antiszimmetrikus ábrázolás*:  $\bar{\mathbf{D}}^{(0)}(R) = (\varepsilon_R)$ . Mind az azonos ábrázolás, mind pedig az antiszimmetrikus ábrázolás egydimenziós.

3. A szimmetrikus csoport összes többi ábrázolása többdimenziós. Egydimenziós ábrázolásban az (12) transzpozíciónak vagy az (1), vagy a  $(-1)$  mátrixnak kell megfelelnie, mivel e mátrix négyzetének az (1) egységmátrixot kell adnia. Az első esetben az ábrázolás összes transzpozíciója az (1) mátrixnak felel meg, a másodikban minden transzpozíció a  $(-1)$  mátrixnak felel meg, mivel valamennyi transzpozíció ugyanabba az osztályba tartozik, s így tetszőleges ábrázolásban valamennyiüknek ugyanazon karakterrel kell rendelkezniük. A transzpozícióknak megfelelő mátrixok azonban meghatározzák az egész ábrázolást, minthogy minden csoportelem felírható transzpozíciók szorzataként. Eszerint az első esetben az azonos ábrázolást kell kapnunk, a másodikban pedig az antiszimmetrikus ábrázolást.

Az alternáló csoport *Abel*-féle faktorcsoportja igen fontos kapcsolatot szolgáltat az irreducibilis ábrázoláspárok között. Tekintsük a  $\mathbf{D}^{(k)}(R)$  irreducibilis ábrázolást. Ekkor képezhetünk egy másik — úgynevezett asszociált —  $\bar{\mathbf{D}}^{(k)}(R)$  ábrázolást oly módon, hogy az alternáló csoportnak megfelelő valamennyi mátrixot változatlanul hagyjuk, az összes többit pedig  $-1$ -gyel megszorozzuk. Az ily módon kapott mátrixok a csoportot ábrázolják, minthogy  $\bar{\mathbf{D}}^{(k)}(R)$  direkt szorzata  $\mathbf{D}^{(k)}(R)$ -nek s a  $\bar{\mathbf{D}}^{(0)}(R)$  antiszimmetrikus ábrázolásnak. Ez utóbbi egydimenziós, így mátrixai egyszerűen számok.

$$\bar{\mathbf{D}}^{(k)}(R) = \mathbf{D}^{(k)}(R) \times \bar{\mathbf{D}}^{(0)}(R) = \varepsilon_R \mathbf{D}^{(k)}(R).$$

Az asszociált ábrázolások fontos szerepet játszanak a kvantummechanikában, valamint az irreducibilis ábrázolások elméletében. A bennünket érdeklő ábrázolások levezetésében fel fogjuk őket használni.

A szimmetrikus csoport különböző irreducibilis ábrázolásainak száma egyenlő  $n$  partíciós számával. Ez egyszerismind a kvalitatíven különböző sajátértékek száma. Kiténik azonban, hogy csak bizonyos ábrázolásokhoz tartozó sajátértékek felelnek meg az atom valóságos energiaszintjeinek. A többi ábrázolás sajátértékei nem felelnek meg ténylegesen létező stacionárius állapotoknak; fellépésüket megtiltja egy, a sajátérték-egyenletől független elv: a *Pauli*-féle kizárási elv. Noha a szimmetrikus csoport összes irreducibilis ábrázolását meghatározhatnánk az itt használt módszerrel, a meghatározást csak ama ábrázolások esetére végezzük el, amelyeket nem tilt meg a *Pauli*-elv. Ennek az elvnek a szigorú megfogalmazását nem adjuk meg itt. A módszer azonban, amellyel a bennünket érdeklő ábrázolásokat meg fogjuk határozni, pontosan ugyanazokon a megfontolásokon alapul, amelyekre később, a *Pauli*-elv alkalmazásakor szükségünk lesz.

4. Ha olyan változók rendszerével állunk szemben, amelyek csak egy értéket vehetnek fel, mondjuk az 1-et, akkor a változás tartománya egyetlen pontból áll, s minden függvény teljesen meg van határozva, ha az értéke adott ebben a pontban. Ebben a térben nincs két olyan függvény, amely lineárisan független volna; minden függvény konstans „a változás egész tartományán” s így minden más függvénynek a többszöröse. Ebben a térben minden függvény változatlan marad, ha a koordináták értékeit felcseréljük, minthogy ez egyszerűen azt jelenti, hogy az 1-et az 1-gyel cseréljük fel. Ebben a térben valamennyi függvény az azonos ábrázoláshoz tartozik.

Ha  $n$  számú  $s_1, s_2, \dots, s_n$  változót veszünk szemügyre, amelyek mindegyike két értéket vehet fel, mondjuk a +1-et és a -1-et, akkor az egész tér  $2^n$  pontból áll, és  $2^n$  lineárisan független függvény adható meg. Ilyenek pl. azok a függvények, amelyeknek az értéke 1 e  $2^n$  pont egyikében, az összes többi pontban pedig zérus. Két függvény,  $\varphi$  és  $g$  skaláris szorzata ebben a térben

$$\sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \dots \sum_{s_n=\pm 1} \varphi(s_1 \dots s_n) \cdot g(s_1 \dots s_n) = (\varphi, g).$$

Egy  $s_k$  változó térben (mely csak két pontból áll; a lehetséges értékek  $s = +1$  és  $-1$ ) a két függvény,  $\delta_{s_k'-1}$  és  $\delta_{s_k'+1}$  „teljes ortogonális rendszert” képez; e függvények  $2^n$  számú szorzata:  $\delta_{s_1\sigma_1} \delta_{s_2\sigma_2} \dots \delta_{s_n\sigma_n}$  (ahol  $\sigma_1 = \pm 1, \sigma_2 = \pm 1, \dots, \sigma_n = \pm 1$ ) teljes ortogonális rendszert képez az  $s_1, s_2, \dots, s_n$  változók által kifeszített  $n$ -dimenziós térben. Az alább következő képletek kényelmesebben felírhatók, ha a  $\delta_{s_k'+1}, \delta_{s_k'-1}$  függvények helyett az  $1, s_k$  függvényeket használjuk, melyek ugyancsak ortogonálisak:

$$(1, s_k) = \sum_{s_k=\pm 1} 1 \cdot s_k = 1 \cdot (-1) + 1 \cdot 1 = 0.$$



$\Delta^{(1)}(R), \dots, \Delta^{(n)}(R)$  ábrázolásokra, amelyeknek mátrixai az előbb említett tulajdonságúak. Ezt a tényt felhasználva kiszámítjuk most  $\Delta^{(k)}(R)$  átlóját.

A  $\Delta^{(k)}(R)$  mátrix átlósösszege egyenlő ama függvények számával (13.1)  $k$ -adik sorában, amelyek  $\mathbf{P}_R$  alkalmazásakor változatlanok maradnak. A  $\Delta^{(k)}(R)$  mátrixok e függvényeknek megfelelő oszlopaiban az egyes a főátlóban lép fel; minden más sorban másutt lép fel, úgyhogy a főátlóban zérus áll. Most kiszámítjuk ezt a számot.

Legyen  $R$  az  $(1\ 2 \dots \mu_1)(\mu_1+1 \dots \mu_2) \dots (\mu_{e-1}+1, \mu_{e-2}+1, \dots, \mu_e)$  permutáció, melynek ciklusai rendre a  $\lambda_1=\mu_1, \lambda_2=\mu_2-\mu_1, \dots, \lambda_e=\mu_e-\mu_{e-1}$  ( $\mu_e=n$ ) hosszúságúak. Amennyiben az  $s_1^{\alpha_1} s_2^{\alpha_2} \dots s_n^{\alpha_n}$  függvény változatlan marad e permutáció alkalmazásakor,  $s_1, s_2, \dots, s_{\mu_1}$  kitevőinek, hasonlóképpen  $s_{\mu_1+1}, s_{\mu_1+2}, \dots, s_{\mu_2}$  kitevőinek stb., és végül  $s_{\mu_{e-1}+1}, s_{\mu_{e-1}+2}, \dots, s_{\mu_e}=s_n$  kitevőinek mind egyenlőknek kell lenniük. Így tehát mindazok a függvények, amelyek az

$$(s_1 s_2 \dots s_{\mu_1})^{\gamma_1} (s_{\mu_1+1} s_{\mu_1+2} \dots s_{\mu_2})^{\gamma_2} \dots (s_{\mu_{e-1}+1} \dots s_{\mu_e})^{\gamma_e} \quad (13.2)$$

alakban felírhatók,  $\mathbf{P}_R$  alkalmazásakor változatlanok maradnak. (A  $\gamma_k - k$  értéke 0 vagy 1.) Bennünket az érdekel, hogy (13.1)  $k$ -adik sorában hány (13.2) alakú függvény található. Mivel e függvények a  $k$ -adik sorban állnak, fenn kell állnia a

$$\mu_1 \gamma_1 + (\mu_2 - \mu_1) \gamma_2 + \dots + (\mu_e - \mu_{e-1}) \gamma_e = \lambda_1 \gamma_1 + \lambda_2 \gamma_2 + \dots + \lambda_e \gamma_e = k \quad (13.3)$$

összefüggésnek. Eszerint annyi ilyen függvény van, ahány megoldása van (13.3)-nak, ahol a  $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_e$  ismeretlenek csak a 0 és 1 értékeket vehetik fel. Ez az  $R$  csoportelemhez tartozó átlósösszeg a  $\Delta^{(k)}(R)$  ábrázolásban, s egyszersmind mindazon permutációké is, melyeknek a ciklushosszai  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_e$ , mivel ezek mind ugyanabba az osztályba tartoznak és így ugyanaz az átlósösszegük. A (13.3) egyenlet megoldásainak teljes száma adott  $k$  mellett egyenlő  $x^k$  együtthatójával az

$$(1+x^{\lambda_1})(1+x^{\lambda_2}) \dots (1+x^{\lambda_e}) \quad (\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_e = n) \quad (13.4)$$

polinomban, mivel ez az együttható azt adja meg, hogy az egyes tényezőkből felépülő  $x$ -eknek a kitevőit hányféleképpen adhatjuk össze úgy (1 vagy 0 együtthatóval), hogy  $k$ -t kapjunk. Eszerint a (13.4) polinomban  $x$   $k$ -adik hatványának az együtthatója éppen  $\Delta^{(k)}(R)$  átlósösszege.

A  $\Delta^{(k)}(E)$  mátrix átlósösszegének az ábrázolás  $\binom{n}{k}$  dimenziójával kell egyenlőnek lennie. Mínt hogy  $E$  esetében minden ciklus hossza 1-gyel egyenlő, a (13.4) egyenletbe a  $\lambda_1 = \lambda_2 = \dots = \lambda_e = 1$  értékeket kell behelyettesíteni. Ekkor  $x^k$  együtthatója  $\binom{n}{k}$ . Az  $(1) \cdot (3) \cdot (4) \dots (n)$  transzpozíciónak megfelelő mátrix átlója éppen  $x^k$  együtthatója az

$$(1+x^2)(1+x) \dots (1+x) = (1+x^2)(1+x)^{n-2}$$

kifejezésben. A számítás a

$$\sum_{\kappa} \Delta^{(k)}(R)_{\kappa\kappa} = \binom{n-2}{k} + \binom{n-2}{k-2}$$

eredményt adja.

Nyilvánvaló, hogy  $\Delta^{(k)}(R)$  nem irreducibilis ábrázolás, minthogy (13.1)  $k$ -adik sorának  $\binom{n}{k}$  számú függvényéből képezhetők olyan lineáris kombinációk, amelyek  $\mathbf{P}_R$  hatása alatt a  $\Delta^{(k-1)}(R)$  ábrázolásnak megfelelően transzformálódnak; irreducibilis ábrázolás esetében ez nem lenne lehetséges.

A  $k$ -adik sor függvényeinek olyan lineáris kombinációjára, melynek felhasználásával megmutatható  $\Delta^{(k)}(R)$  reducibilitása, különösen egyszerű példa a következő. Képezzük a  $k$ -adik sor összes függvényének összegét. Ez az összeg nyilvánvalóan önmagába transzformálódik tetszőleges permutáció hatása alatt; így tehát a  $k$ -adik sor függvényeire alkalmazott lineáris transzformáció, mely  $\binom{n}{k}$  számú új függvényt szolgáltat (ezek között az említett összeg az első) a  $\Delta^{(k)}(R)$  mátrixok olyan hasonlósági transzformációját eredményezi, amelynek eredményeképpen valamennyien az

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & A \end{pmatrix}$$

alakot öltik. Az olyan ábrázolás, amely hasonlósági transzformáció segítségével ilyen alakra hozható, definíció szerint reducibilis.

A (13.1) alatt a  $k$ -adik sorban álló függvények azon lineáris kombinációi, amelyek úgy transzformálódnak, mint a  $(k-1)$ -edik sor  $s_{\alpha_1} s_{\alpha_2} \dots s_{\alpha_{k-1}}$  függvényei, a következők:

$$F_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}} = s_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}} s_{a_1} s_{a_2} \dots s_{a_{k-1}}. \quad (13.5)$$

Most  $s_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}}$  mindazon  $n-k+1$  számú változó összegét jelenti, amelyek az  $s_{a_1} s_{a_2} \dots s_{a_{k-1}}$  szorzatban *nem* lépnek fel. A  $\mathbf{P}_R$  operátor az  $s_{a_i}$  függvényt  $s_{b_i}$ -be transzformálja. Így tehát az  $s_{a_1} s_{a_2} \dots s_{a_{k-1}}$  függvény  $s_{b_1} s_{b_2} \dots s_{b_{k-1}}$ -be megy át. Az  $s_{a_1}, s_{a_2}, \dots, s_{a_{k-1}}$  változók mindegyikétől *különböző*  $s_c$  olyan  $s_d$ -be megy át, mely különbözik mindazoktól az  $s_b$ -ktől, amelyekbe  $\mathbf{P}_R$  az  $s_a$ -kat transzformálja. Eszerint mindazon  $n-k+1$  számú  $s$  változónak az összege, amelyek nem fordulnak elő az  $s_{a_1}, s_{a_2}, \dots, s_{a_{k-1}}$  változók között, annak az  $n-k+1$  számú változónak az összegébe megy át, amelyek nem fordulnak elő az  $s_b$  változók között. Vagyis:  $s_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}}$  összeg az  $s_{b_1 b_2 \dots b_{k-1}}$  összegbe megy át. Az  $F_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}}$  kombinációk ennél fogva pontosan ugyanúgy transzformálódnak, mint a  $(k-1)$ -edik sorban álló  $s_{a_1} s_{a_2} \dots s_{a_{k-1}}$  függvények.



Az e fejezethez csatolt függelékben megmutatjuk: ha  $k \equiv \frac{1}{2}n$ , akkor az  $\binom{n}{k-1}$  számú  $F_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}}$  függvény lineárisan független rendszert alkot. Képezhetünk tehát e függvényekből olyan  $F_1, F_2, \dots, F_{\binom{n}{k-1}}$  lineáris kombinációkat, amelyek ortogonálisak is és lineárisan függetlenek. Annak érdekében, hogy  $\binom{n}{k}$  számú függvényből álló teljes rendszert kapjunk, (feltételezve, hogy  $k \equiv \frac{1}{2}n$ ) képezhetjük az  $\binom{n}{k}$  számú  $s_{a_1} s_{a_2} \dots s_{a_k}$  függvény

$$l_k = \binom{n}{k} - \binom{n}{k-1} \quad (13.6)$$

számú  $g_1, g_2, \dots, g_{l_k}$  lineáris kombinációját,<sup>4</sup> amelyek az  $F_{\times}$ -kal együtt teljes ortogonális rendszert képeznek. Az  $s_{a_1} s_{a_2} s_{a_3} \dots s_{a_k}$  függvények mind felírhatók e rendszer segítségével, és viszont. A  $\Delta^{(k)}(R)$  ábrázolást abban a  $\bar{\Delta}^{(k)}(R)$  alakban fogjuk vizsgálni, amelyet az akkor ölt, ha az  $s_{a_1} s_{a_2} s_{a_3} \dots s_{a_k}$  rendszer helyett eme  $F_1, F_2, \dots, F_{\binom{n}{k-1}}, g_1, g_2, \dots, g_{l_k}$  teljes rendszert vezetjük be; ez a helyettesítés a  $\Delta^{(k)}(R)$ -ek hasonlósági transzformációját eredményezi.

Mínt hogy minden  $F_{\times}$  lineáris kombinációja az  $F_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}}$ -eknek, a  $\mathbf{P}_R F_{\times}$  transzformáltak lineáris kombinációi a  $\mathbf{P}_R F_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}}$ -eknek, s ennél fogva az  $F_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}}$ -eknek vagy az  $F_{\times}$ -knak, azaz

$$\mathbf{P}_R F_{\times} = \sum_{\lambda=1}^{\binom{n}{k-1}} \bar{\Delta}^{(k-1)}(R)_{\lambda \times} F_{\lambda}. \quad (13.7)$$

Az együtthatókat itt  $\bar{\Delta}^{(k-1)}(R)$ -rel jelöltük, minthogy azok a  $\Delta^{(k-1)}(R)$  ábrázolásal ekvivalens ábrázolást képeznek. A (13.7) egyenletben a  $g_{\times}$ -k mind zérus együtthatóval szerepelnek; ennél fogva  $\bar{\Delta}^{(k)}(R)$  ilyen alakú:

$$\bar{\Delta}^{(k)} = \begin{pmatrix} \bar{\Delta}^{(k-1)}(R) & \mathbf{A}(R) \\ \mathbf{0} & \mathbf{D}^{(k)}(R) \end{pmatrix}.$$

Mivel az  $F_1, F_2, \dots, F_{\binom{n}{k-1}}, g_1, g_2, \dots, g_{l_k}$  teljes rendszer ortogonális,  $\bar{\Delta}^{(k)}(R)$  ezenfelül unitér:

$$\bar{\Delta}^{(k)}(R) = \bar{\Delta}^{(k)}(R^{-1})^{\dagger}.$$

Azaz

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \bar{\Delta}^{(k-1)}(R) & \mathbf{A}(R) \\ \mathbf{0} & \mathbf{D}^{(k)}(R) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \bar{\Delta}^{(k-1)}(R^{-1}) & \mathbf{A}(R^{-1}) \\ \mathbf{0} & \mathbf{D}^{(k)}(R^{-1}) \end{pmatrix}^{\dagger} = \\ &= \begin{pmatrix} \bar{\Delta}^{(k-1)}(R^{-1})^{\dagger} & \mathbf{0} \\ \mathbf{A}(R^{-1})^{\dagger} & \mathbf{D}^{(k)}(R^{-1})^{\dagger} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

<sup>4</sup> Ilyen függvényre példa  $(s_1 - s_2)(s_3 - s_4) \dots (s_{2k-1} - s_{2k})$ .

Eszerint  $\Delta(R) = \mathbf{0}$  és

$$\overline{\Delta}^{(k)}(R) = \begin{pmatrix} \overline{\Delta}^{(k-1)}(R) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D}^{(k)}(R) \end{pmatrix}. \quad (13.8)$$

Így tehát ha  $k \leq \frac{1}{2}n$ , a  $\Delta^{(k)}(R)$  ábrázolás két ábrázolásra bomlik fel,  $\overline{\Delta}^{(k-1)}(R)$ -re és  $\mathbf{D}^{(k)}(R)$ -re, melyeknek dimenziói  $\begin{pmatrix} n \\ k-1 \end{pmatrix}$  és  $l_k = \begin{pmatrix} n \\ k \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} n \\ k-1 \end{pmatrix}$ . Közülük az előbbi ekvivalens  $\Delta^{(k-1)}(R)$ -rel. Ezt követően  $\overline{\Delta}^{(k-1)}(R)$  is felbontható két ábrázolásra,  $\overline{\Delta}^{(k-2)}(R)$ -re és  $\mathbf{D}^{(k-1)}(R)$ -re, azután  $\overline{\Delta}^{(k-2)}$  újra felbontható stb. Végeredményképpen  $\overline{\Delta}^{(k)}$  a  $\mathbf{D}^{(0)} + \mathbf{D}^{(1)} + \dots + \mathbf{D}^{(k)}$  ábrázolásokra bomlik fel. (13.1)  $k$ -adik sorában azt a függvényt, amely  $\mathbf{D}^{(0)}$  szerint transzformálódik (azaz invariáns), az előbb már említettük: az a  $k$ -adik sor összes függvényének összegeként írható fel.

Ez érvényes a  $k \leq \frac{1}{2}n$  esetre. Ha  $k > \frac{1}{2}n$ , az az  $\begin{pmatrix} n \\ k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n \\ n-k \end{pmatrix}$  számú függvény, melyekben  $n-k$  számú változó az első hatványon,  $k$  számú változó pedig a nulladik hatványon lép fel, pontosan ugyanúgy transzformálódik, mint a fenti függvények (melyekben  $n-k$  számú változó lépett fel a nulladik,  $k$  számú pedig az első hatványon). Az  $s$  változóktól függő ortogonális függvényrendszer speciális választása nem játszik szerepet. Az 1,  $s$  függvények helyett választhatunk volna az  $s$ , 1 függvényeket. Így tehát  $\Delta^{(k)}$  ekvivalens  $\Delta^{(n-k)}$ -val és ugyanazokra a komponensekre bontható fel. Eszerint  $\Delta(R)$  felbontása páros  $n$  (pl.  $n=4$ ) mellett a következő alakot ölti:

$$\Delta(R) = \begin{cases} \Delta^{(0)}(R) = \mathbf{D}^{(0)} = \mathbf{D}^{(0)}, \\ \Delta^{(1)}(R) = \Delta^{(0)} + \mathbf{D}^{(1)} = \mathbf{D}^{(0)} + \mathbf{D}^{(1)}, \\ \Delta^{(2)}(R) = \Delta^{(1)} + \mathbf{D}^{(2)} = \mathbf{D}^{(0)} + \mathbf{D}^{(1)} + \mathbf{D}^{(2)}, \\ \Delta^{(3)}(R) \sim \Delta^{(1)} = \mathbf{D}^{(0)} + \mathbf{D}^{(1)}, \\ \Delta^{(4)}(R) \sim \Delta^{(0)} = \mathbf{D}^{(0)}, \end{cases}$$

páratlan  $n$  (pl.  $n=5$ ) mellett pedig:

$$\Delta(R) = \begin{cases} \Delta^{(0)}(R) = \mathbf{D}^{(0)} = \mathbf{D}^{(0)}, \\ \Delta^{(1)}(R) = \Delta^{(0)} + \mathbf{D}^{(1)} = \mathbf{D}^{(0)} + \mathbf{D}^{(1)}, \\ \Delta^{(2)}(R) = \Delta^{(1)} + \mathbf{D}^{(2)} = \mathbf{D}^{(0)} + \mathbf{D}^{(1)} + \mathbf{D}^{(2)}, \\ \Delta^{(3)}(R) \sim \Delta^{(2)} = \mathbf{D}^{(0)} + \mathbf{D}^{(1)} + \mathbf{D}^{(2)}, \\ \Delta^{(4)}(R) \sim \Delta^{(1)} = \mathbf{D}^{(0)} + \mathbf{D}^{(1)}, \\ \Delta^{(5)}(R) \sim \Delta^{(0)} = \mathbf{D}^{(0)}. \end{cases}$$

Most megmutatjuk, hogy a fent kapott  $\mathbf{D}^{(0)}, \mathbf{D}^{(1)}, \dots, \mathbf{D}^{(\frac{1}{2}n)}$  (vagy  $\mathbf{D}^{(\frac{1}{2}n-\frac{1}{2})}$ ) ábrázolások irreducibilisek és különbözőek. A bizonyítást az indukció módszerével végezzük el: feltesszük, hogy az  $(n-1)$ -edfokú szimmetrikus csoport ugyan-

ilyen módon kapott  $'\mathbf{D}^{(0)}(R'), \dots, '\mathbf{D}^{(k)}(R')$  ábrázolásai ( $k \cong \frac{1}{2}(n-1)$ ) irreducibilisek és különbözőek; feltesszük, hogy dimenziójuk:<sup>5</sup>  $l'_k = \binom{n-1}{k} - \binom{n-1}{k-1}$ . A bizonyítás fő mozzanata annak kimutatása, hogy ama  $R'$  permutációkra, melyek  $s$ -et nem érintik,  $\mathbf{D}^{(k)}$  az  $(n-1)$ -edfokú szimmetrikus csoport ábrázolása és irreducibilis részei  $'\mathbf{D}^{(k-1)}$  és  $'\mathbf{D}^{(k)}$ . Ebből azután a  $\mathbf{D}^{(k)}$ -k irreducibilitása és különböző volta könnyűszerrel következik.

5. A  $g_1, \dots, g_{l_k}$  függvények, melyek lineárisak az  $s_n$  változóban, felírhatók a

$$g_{\alpha} = g'_{\alpha} s_n + h'_{\alpha} \quad (13.9)$$

összeg alakjában oly módon, hogy  $s_n$  mind  $g'_{\alpha}$ -ben, mind  $h'_{\alpha}$ -ben a nulladik hatványon lép fel. Így  $g'_{\alpha}$  és  $h'_{\alpha}$  egyedül az  $s_1, s_2, \dots, s_{n-1}$  változók függvényeinek tekinthetők;  $g'_{\alpha}$   $(\alpha-1)$ -edfokú,  $h'_{\alpha}$  pedig  $k$ -adfokú.

Megtörténhet, hogy a  $g_{\alpha}$  függvényekből olyan lineáris kombinációk képezhetők, amelyek nem tartalmaznak  $s_n$ -nel arányos tagot. Legyen az ilyen lineárisan független lineáris kombinációk száma  $l''$ . Ezekre alkalmazhatjuk a *Schmidt*-féle ortogonalizálási eljárást. A kapott függvényeket a  $\bar{g}_{0\alpha}$  szimbólummal fogjuk jelölni:

$$\bar{g}_{0\alpha} = \bar{h}'_{0\alpha} \quad (\alpha = 1, 2, \dots, l''). \quad (13.9a)$$

A vesszős függvények mind függetlenek lesznek  $s_n$ -től. Természetesen  $l''$  zérus is lehetne, ki fog azonban tűnni, hogy általában nem ez a helyzet. A fennmaradó  $g_{\alpha}$ -kat ekkor ortogonalizálhatjuk a  $\bar{g}_{0\alpha}$  függvényekre vonatkozóan és egymás között; ily módon kapjuk:

$$\bar{g}_{1\alpha} = \bar{g}'_{1\alpha} s_n + \bar{h}'_{1\alpha} \quad (\alpha = 1, 2, \dots, l_k - l''). \quad (13.9b)$$

Az ily módon kapott  $\bar{g}'_{1\alpha}$  függvények lineárisan függetlenek. Ha nem így volna, további olyan  $\bar{g}$  függvényeket kaphatnánk, amelyek nem tartalmazzák  $s_n$ -t. A szimmetrikus csoport ama ábrázolása, amely a  $\bar{g}$  függvényekre alkalmazandó, ekvivalens  $\mathbf{D}^{(k)}$ -val, minthogy a  $\bar{g}$  függvények lineáris kombinációi a  $g$ -knek. Ez az ábrázolás unitér, mivel a  $g$  függvények ortogonálisak. Most megvizsgáljuk a  $\bar{g}_{0\alpha}, \bar{g}_{1\alpha}$  függvények viselkedését ama  $\mathbf{P}_{R'}$  permutációk hatása alatt, amelyek  $s_n$ -et változatlanul hagyják. Ezek a permutációk az  $n-1$ -edfokú szimmetrikus csoporttal izomorf csoportot alkotnak. Ki fog tűnni, hogy a  $\bar{g}_{0\alpha}$  függvények e csoport  $'\mathbf{D}^{(k)}$  áb-

<sup>5</sup> A vesszős mennyiségek mindig az  $(n-1)$ -edfokú szimmetrikus csoportra vonatkoznak, vagy az  $n-1$  számú  $s_1, s_2, \dots, s_{n-1}$  változó függvényeire.

rázolásához tartoznak, a  $\bar{g}_{1\kappa}$  függvények pedig a  $'\mathbf{D}^{(k-1)}$  ábrázoláshoz. Megjegyezzük, hogy e két ábrázolás dimenzióinak összege valóban egyenlő  $l_k$ -val:

$$\begin{aligned} l'_k + l'_{k-1} &= \binom{n-1}{k} - \binom{n-1}{k-1} + \binom{n-1}{k-1} - \binom{n-1}{k-2} = \\ &= \binom{n}{k} - \binom{n}{k-1} = l_k. \end{aligned} \quad (13.10)$$

Amint ezt megmutattuk,  $\mathbf{D}^{(k)}$  irreducibilis volta ebből könnyűszerrel következik.

Vegyük szemügyre először a  $\bar{g}_{1\kappa}$  függvényeket. Mindegyik  $\bar{g}_{1\kappa}$  ortogonális valamennyi  $F_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}}$ -re, és speciálisan az

$$F_{a_1 a_2 \dots a_{k-2} n} = s_{a_1} s_{a_2} \dots s_{a_{k-2}} s_n s_{a_1 a_2 \dots a_{k-2} n}$$

függvényre. Minthogy  $\bar{h}_{1\kappa}$  az  $s_n$ -et a nulladik hatványon tartalmazza, ez a függvény is ortogonális  $F_{a_1 a_2 \dots a_{k-2} n}$ -re; következésképpen ortogonális  $\bar{g}_{1\kappa} s_n$  is. Így tehát  $\bar{g}_{1\kappa}$  ortogonális az  $s_{a_1} s_{a_2} \dots s_{a_{k-2}} s_{a_1 a_2 \dots a_{k-2} n}$  függvények mindegyikére. De éppen ez az ortogonalitás definiálja az  $s_1, s_2, \dots, s_{n-1}$  változók ama  $l'_{k-1}$  számú,  $k-1$ -edfokú függvényét, melyek e változók permutációinak hatása alatt a feltevésünk szerint irreducibilis  $'\mathbf{D}^{(k-1)}$  ábrázolás szerint transzformálódnak. Minthogy az  $s_1, s_2, \dots, s_{n-1}$  változóknak csak  $l'_{k-1}$  számú,  $k-1$ -edfokú függvénye van, amelyek ilyen tulajdonságúak (vagyis ortogonálisak az  $s_{a_1} s_{a_2} \dots s_{a_{k-2}} s_{a_1 a_2 \dots a_{k-2} n}$  függvényekre),  $\bar{g}_{1\kappa}$  függvény nem lehet több, mint  $l'_{k-1}$ . Ténylegesen éppen  $l'_{k-1}$  ilyen függvény van, s ezek ama  $R'$  permutációk hatása alatt, amelyek  $s_n$ -et változatlanul hagyják,  $'\mathbf{D}^{(k-1)}$  szerint transzformálódnak. Abból a célból, hogy erről meggyőződjünk, alkalmazzuk  $\mathbf{P}_{R'}$ -t (13.9b)-re. Minthogy ez  $s_n$ -et érintetlenül hagyja, kapjuk:

$$\mathbf{P}_{R'} \bar{g}_{1\kappa} = s_n \mathbf{P}_{R'} \bar{g}'_{1\kappa} + \mathbf{P}_{R'} \bar{h}'_{1\kappa}. \quad (13.11)$$

Ha ezeket a függvényeket mint a  $\bar{g}_{0\kappa}$  és  $\bar{g}_{1\kappa}$  függvények lineáris kombinációit fejezzük ki,  $s_n$  együtthatójának az összehasonlítása azt mutatja, hogy a  $\mathbf{P}_{R'} \cdot \bar{g}'_{1\kappa}$  függvények lineáris kombinációi maguknak a  $\bar{g}'_{1\kappa}$ -eknek. Minthogy a  $\bar{g}'_{1\kappa}$  függvények a  $'\mathbf{D}^{(k-1)}$  irreducibilis ábrázoláshoz tartoznak, ez csak akkor lehetséges, ha a lineárisan független  $\bar{g}'_{1\kappa}$  függvények száma vagy  $l'_{k-1}$ , vagy 0. Ez utóbbi lehetőség kizárható, minthogy ez azt jelentené, hogy valamennyi  $g$ , és így valamennyi  $g$  is független  $s_n$ -től. Minthogy az  $n$  a  $g$ -k megválasztásánál nem játszott semmilyen különleges szerepet bármely más indexhez képest, ez nem lehetséges. Kapjuk tehát:

$$\mathbf{P}_{R'} \bar{g}'_{1\kappa} = \sum_{\lambda=1}^{l'_{k-1}} 'D^{(k-1)}(R')_{\lambda\kappa} \bar{g}'_{1\lambda} \quad (\kappa=1, 2, \dots, l'_{k-1}) \quad (13.11a)$$

és  $l_k - l'' = l'_{k-1}$ . Ha  $l_k = l'_{k-1}$ , a (13.9a) típusú függvények száma zérus, azaz: ebben az esetben a (13.9) alatt fellépő  $g_\kappa$  függvények lineárisan függetlenek. Később igazolni fogjuk azonban, hogy  $l_k = l'_{k-1}$  csak  $k = \frac{1}{2} n$  esetén áll fenn.

Ha  $l_k > l'_k$ , tekintsük a (13.9a) függvényeket. Az első  $n-1$  változóra ható tetszőleges  $R'$  permutációt a (13.9a) alatt megadott  $\bar{g}_{0\kappa} = \bar{h}'_{0\kappa}$  függvényekre alkalmazva, újból olyan függvényt kapunk, amely független  $s_n$ -től. Eszerint ha a  $\mathbf{P}_{R'} \bar{g}_{0\kappa}$  függvényeket kifejezzük a  $\bar{g}$ -k segítségével, a  $\bar{g}_{1\lambda}$  mellett álló együttható eltűnik. Minthogy a  $\bar{g}'_{1\lambda}$  függvények lineárisan függetlenek, a (13.9b) alatt fellépő  $\bar{g}_{1\lambda}$ -k valamely lineáris kombinációja csak akkor lehet független  $s_n$ -től, ha mindegyikük együtthatója eltűnik. Eszerint a  $\mathbf{P}_{R'} \bar{g}_{0\kappa}$  függvények kizárólag a  $\bar{g}_{0\kappa}$ -k lineáris kombinációi; ezek a függvények az  $s_n$ -et változtatlanul hagyó  $\mathbf{P}_{R'}$  permutációs operátorok alkotta  $n-1$ -edfokú szimmetrikus csoport egy ábrázolásához tartoznak. Eme ábrázolások meghatározása céljából jegezzük meg, hogy a  $g_\kappa$ -k, és így a  $\bar{g}_{0\kappa}$ -k is ortogonálisak valamennyi  $F_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}}$ -re. Tekintsük ebben az esetben azokat az  $F$ -eket, amelyeknek indexei *nem* tartalmazzák az  $n$ -et. Ezek az

$$F_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}} = s_{a_1} s_{a_2} \dots s_{a_{k-1}} (s_{a_1 a_2 \dots a_{k-1} n} + s_n)$$

alakban írhatók fel. A  $\bar{g}_{0\kappa}$  függvényben  $s_n$  a nulladik hatványon lép fel. Az tehát ortogonális  $s_{a_1} s_{a_2} \dots s_{a_{k-1}} s_n$ -re, és ortogonálisnak kell lennie  $s_{a_1} s_{a_2} \dots s_{a_{k-1}} s_{a_1 a_2 \dots a_{k-1} n}$  re is. Fokszáma egyenlő  $k$ -val. Ez azonban éppen  $s_1, s_2, \dots, s_{n-1}$  ama függvényeinek a definíciója, amelyek a  $\mathbf{D}^{(k)}$  ábrázolásához tartoznak (ez az ábrázolás feltevésünk szerint ugyancsak irreducibilis). A  $\bar{g}_{0\kappa}$  függvényeknek ennél fogva a  $\mathbf{P}_{R'}$  operátorok csoportjának eme ábrázolásához kell tartozniuk;  $\kappa = 1, 2, \dots, l'' = l'_k$  mellett fennáll:

$$\mathbf{P}_{R'} \bar{g}_{0\kappa} = \sum_{\lambda=1}^{l'_k} \mathbf{D}^{(k)}(R')_{\lambda\kappa} \bar{g}_{0\lambda}. \quad (13.11b)$$

A (13.11b), (13.11a) egyenletek lehetővé teszik a  $\mathbf{D}^{(k)}(R)$  ábrázolási mátrixok meghatározását, legalábbis ama  $R = R'$  permutációk esetére, amelyek  $s_n$ -et változtatlanul hagyják. A meghatározni kívánt kifejezések egyszerűbbek lesznek, ha  $\mathbf{D}^{(k)}$  sorainak és oszlopainak számozása megfelel a  $\bar{g}$  függvények indexelésének (13.9a) és (13.9b) alatt:

$$\mathbf{P}_R \bar{g}_{0\kappa} = \sum_{\lambda=1}^{l'_k} \mathbf{D}^{(k)}(R)_{0\lambda; 0\kappa} \bar{g}_{0\lambda} + \sum_{\lambda=1}^{l'_{k-1}} \mathbf{D}^{(k)}(R)_{1\lambda; 0\kappa} \bar{g}_{1\lambda}, \quad (13.12a)$$

$$\mathbf{P}_R \bar{g}_{1\kappa} = \sum_{\lambda=1}^{l'_k} \mathbf{D}^{(k)}(R)_{0\lambda; 1\kappa} \bar{g}_{0\lambda} + \sum_{\lambda=1}^{l'_{k-1}} \mathbf{D}^{(k)}(R)_{1\lambda; 1\kappa} (\bar{g}'_{1\lambda} s_n + \bar{h}'_{1\lambda}). \quad (13.12b)$$

$\mathbf{D}^{(k)}$  a következő szupermátrix:

$$\mathbf{D}^{(k)}(R) = \begin{pmatrix} \mathbf{D}_{00}^{(k)}(R) & \mathbf{D}_{01}^{(k)}(R) \\ \mathbf{D}_{10}^{(k)}(R) & \mathbf{D}_{11}^{(k)}(R) \end{pmatrix}. \quad (13.12)$$

Az olyan  $R = R'$  permutációk esetében, amelyek  $s_n$ -et változatlanul hagyják, (13.12a) és (13.11b) egybevetése valamennyi  $\bar{g}$  lineáris függetlensége folytán a következőket adja:

$$D^{(k)}(R')_{0\lambda;0\kappa} = {}'D^{(k)}(R')_{\lambda\kappa}, \quad D^{(k)}(R')_{1\lambda;0\kappa} = 0. \quad (13.13a)$$

Mint hogy  $\mathbf{P}_{R'}$  nem hat  $s_n$ -re, (13.11a) és (13.12b) összehasonlításakor az előbbi behelyettesíthetjük  $\mathbf{P}_{R'}\bar{g}_{1\kappa}$  (13.9b) felhasználásával adódó kifejezésébe:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{R'}\bar{g}_{1\kappa} &= s_n \mathbf{P}_{R'}\bar{g}'_{1\kappa} + \mathbf{P}_{R'}\bar{h}'_{1\kappa} = \\ &= \sum_{\lambda=1}^{l'_k-1} {}'D^{(k-1)}(R')_{\lambda\kappa} \bar{g}'_{1\lambda} s_n + \mathbf{P}_{R'}\bar{h}'_{1\kappa}. \end{aligned}$$

Mint hogy a  $\bar{g}'_{1\lambda} s_n$ -ek mind lineárisan függetlenek és ortogonálisak a  $\bar{g}_{0\lambda}$ ,  $\bar{h}'_{1\lambda}$  és  $\mathbf{P}_{R'}\bar{h}'_{1\kappa}$  függvények mindegyikére (melyek  $s_n$ -et a nulladik hatványon tartalmazzák), az utóbbi egyenlet összehasonlítása (13.12b)-vel a következőket adja:

$$D^{(k)}(R')_{1\lambda;1\kappa} = {}'D^{(k-1)}(R')_{\lambda\kappa}. \quad (13.13b)$$

Eszerint olyan  $R'$  esetében, mely nem hat  $s_n$ -re,

$$\mathbf{D}^{(k)}(R') = \begin{pmatrix} {}'D^{(k)}(R') & \mathbf{0} \\ \mathbf{B}(R') & {}'D^{(k-1)}(R') \end{pmatrix},$$

ahol  $\mathbf{B}(R')$  mindeddig ismeretlen. Mivel azonban a  $\bar{g}$  függvények ortogonalitása folytán  $\mathbf{D}^{(k)}$  unitér, a  $\mathbf{B}(R')$  mátrixoknak el kell tűnniök. Ebből következik, hogy a  $\mathbf{D}^{(k)}(R)$  ábrázolás, ha azt az  $(n-1)$ -edfokú szimmetrikus csoport ábrázolásának tekintjük, két különböző irreducibilis komponensre bomlik fel (kivéve, ha  $l_k = l'_{k-1}$ ). Azok a mátrixok, amelyek az  $s_n$ -et változatlanul hagyó  $R'$  permutációknak felelnek meg, a következő alakúak:

$$\mathbf{D}^{(k)}(R') = \begin{pmatrix} {}'D^{(k)}(R') & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & {}'D^{(k-1)}(R') \end{pmatrix}. \quad (13.13)$$

Emlékezzünk meg itt az  $l_k = l'_{k-1}$  esetről. Ez csak akkor fordulhat elő, ha  $k = \frac{1}{2}n$ . Ez legegyszerűbben a (13.10) azonosságból következik, mely szerint

$$l_k - l'_{k-1} = \binom{n-1}{k} - \binom{n-1}{k-1}.$$

Ez csak akkor lehet zérus, ha  $k + (k-1) = n-1$ . Ennek az esetnek a kivételes voltát várni lehetett, mint hogy  ${}'D^{(k)}$  csak a  $k \leq \frac{1}{2}(n-1)$  esetre van definiálva, s ez a feltevés nem teljesül, ha  $k = \frac{1}{2}n$ . Ebben az esetben a  $\mathbf{D}^{(k)}$  mátrixok irreducibilitása azonban azonnal következik; a (13.13) egyenlet helyett ebben az esetben  $\mathbf{D}^{(k)}(R') =$

$= \mathbf{D}^{(k-1)}(R)$  egyenlet érvényes. Eszerint  $\mathbf{D}^{(k)}(R)$  irreducibilis annak folytán, hogy azok a mátrixok, amelyek  $s_n$ -et változatlanul hagyják, már irreducibilisek.

Az általános esetben tekintsük az

$$\begin{pmatrix} \mathbf{M}_1 & \mathbf{M}_2 \\ \mathbf{M}_3 & \mathbf{M}_4 \end{pmatrix} \quad (13.14)$$

mátrixot, mely kommutál a  $\mathbf{D}^{(k)}(R)$ -ek mindegyikével. A (13.14) képletben a sorok és oszlopok felosztása legyen ugyanolyan, mint (13.13) alatt. Speciálisan (13.14)-nek kommutálnia is kell a (13.13) alatt felírt  $\mathbf{D}^{(k)}(R')$  mátrixokkal:

$$\begin{pmatrix} {}'\mathbf{D}^{(k)}(R') & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & {}'\mathbf{D}^{(k-1)}(R') \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{M}_1 & \mathbf{M}_2 \\ \mathbf{M}_3 & \mathbf{M}_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_1 & \mathbf{M}_2 \\ \mathbf{M}_3 & \mathbf{M}_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} {}'\mathbf{D}^{(k)}(R') & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & {}'\mathbf{D}^{(k-1)}(R') \end{pmatrix}.$$

Ennélfogva az  $s_1, \dots, s_{n-1}$  változók permutációival izomorf  $(n-1)$ -edfokú szimmetrikus csoport  $'\mathbf{D}^{(k-1)}(R')$  vagy  $'\mathbf{D}^{(k)}(R')$  irreducibilis ábrázolásaira a következőknek kell teljesülniök:

$${}'\mathbf{D}^{(k)}(R') \mathbf{M}_1 = \mathbf{M}_1 {}'\mathbf{D}^{(k)}(R'),$$

$${}'\mathbf{D}^{(k)}(R') \mathbf{M}_2 = \mathbf{M}_2 {}'\mathbf{D}^{(k-1)}(R'),$$

$${}'\mathbf{D}^{(k-1)}(R') \mathbf{M}_3 = \mathbf{M}_3 {}'\mathbf{D}^{(k)}(R'),$$

$${}'\mathbf{D}^{(k-1)}(R') \mathbf{M}_4 = \mathbf{M}_4 {}'\mathbf{D}^{(k-1)}(R').$$

Ebből azonban a 9. fejezet 2. és 3. tétele szerint következik, hogy  $\mathbf{M}_2$  és  $\mathbf{M}_3$  zérusmátrixok,  $\mathbf{M}_1$ -nek és  $\mathbf{M}_4$ -nek pedig az egységmátrix többszörösét kell adnia. Ekkor (13.14)-nek, a (13.13) mátrixokkal való felcserélhetőség folytán, a következő alakúnak kell lennie:

$$\begin{pmatrix} m_1 \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & m_4 \mathbf{1} \end{pmatrix}. \quad (13.14a)$$

Tekintsünk ezek után egy olyan  $R$  permutációt, amely nem hagyja változatlanul  $s_n$ -et, hanem azt egy másik  $s_r$ -be transzformálja, amely  $\bar{h}'_{0x}$ -ban az első hatványon lép fel. A  $\mathbf{P}_R \bar{h}'_{0x}$  függvény lineáris előállításában a  $\bar{g}_{1x}$ -k közül legalábbis egyet fel kell használnunk. Ha tehát  $\mathbf{D}^{(k)}(R)$ -et a

$$\mathbf{D}^{(k)}(R) = \begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{pmatrix} \quad (13.14b)$$

alakban írjuk fel,  $\mathbf{C}$  bizonyosan nem zérusmátrix. Ekkor (13.14a) csak abban az esetben kommutál (13.14b)-vel, ha  $m_1 = m_4$ , (13.14a) tehát konstansmátrix. Ez azonban annak elégséges feltétele, hogy  $\mathbf{D}^{(k)}(R)$  irreducibilis legyen, amit így tehát igazoltunk.

Az a tény, hogy a  $\mathbf{D}^{(0)}, \mathbf{D}^{(1)}, \dots, \mathbf{D}^{(\frac{1}{2}n)}$  (vagy  $\mathbf{D}^{(\frac{1}{2}n-\frac{1}{2})}$ ) ábrázolások mind különbözőek, (13.13)-ból látható; az  $s_1, s_2, \dots, s_{n-1}$  változók  $R$  permutációinak megfelelő mátrixok mindezekben az ábrázolásokban inekvivalensek. Ennélfogva maguknak az ábrázolásoknak is inekvivalenseknek kell lenniök.

6. Számítsuk ki még a  $\mathbf{D}^{(k)}(R)$  irreducibilis ábrázolás  $\chi^{(k)}(R)$  karakterét. Mint-hogy  $\Delta^{(k)}(R)$  a

$$\Delta^{(k)}(R) = \begin{pmatrix} \Delta^{(k-1)}(R) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D}^{(k)}(R) \end{pmatrix} \quad (13.8)$$

alakra transzformálható,  $\chi^{(k)}(R)$  egyenlő  $\Delta^{(k)}(R)$  és  $\Delta^{(k-1)}(R)$  karaktereinek a különbségével. A (13.4) egyenlet szerint  $\Delta^{(k)}(R)$  karaktere egyenlő  $x^k$  ( $k \leq \frac{1}{2}n$ ) együtthatójával az

$$(1+x^{\lambda_1})(1+x^{\lambda_2}) \dots (1+x^{\lambda_\rho}) \quad (\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_\rho = n) \quad (13.14)$$

polinomban;  $\Delta^{(k-1)}(R)$  karaktere egyenlő  $x^{k-1}$  együtthatójával ebben a kifejezésben, vagy  $x^k$  együtthatójával (13.4)  $x$ -szeresében. A  $\chi^{(k)}(R)$  karaktert e két együttható különbsége adja meg, azaz:  $x^k$  együtthatója az

$$(1-x)(1+x^{\lambda_1})(1+x^{\lambda_2}) \dots (1+x^{\lambda_\rho}) = \sum x^k \chi^{(k)}(R) \quad (13.15)$$

kifejezésben, ahol  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_\rho$  az  $R$  permutáció ciklusainak a hossza.

A  $\bar{\mathbf{D}}^{(k)}(R)$  asszociált ábrázolás esetében ez a kifejezés változatlan vagy ellentett előjellel veendő aszerint, hogy  $R$  páros vagy páratlan permutáció, azaz: aszerint, hogy  $\lambda_1 - 1 + \lambda_2 - 1 + \dots + \lambda_\rho - 1 = n - \rho$  páros-e vagy páratlan. A  $\bar{\chi}^{(k)}(R)$  karakter  $x^k$  együtthatója a

$$(-1)^{n-\rho} (1-x)(1+x^{\lambda_1})(1+x^{\lambda_2}) \dots (1+x^{\lambda_\rho}) = \sum x^k \bar{\chi}^{(k)}(R) \quad (13.15a)$$

kifejezésben.  $\mathbf{D}^{(0)}(R)$  az azonos,  $\bar{\mathbf{D}}^{(0)}(R)$  az antiszimmetrikus ábrázolás.

Amint azt korábban említettük, az előbbi tárgyalás nem adja meg a szimmetrikus csoport valamennyi irreducibilis ábrázolását, hanem csak azokat, amelyek szerepet játszanak az atomspektroszkópiában. Az irreducibilis ábrázolások matematikai elméletében (melynek úttörői A. YOUNG és G. FROBENIUS voltak) az egyes ábrázolások nem egyes  $k$  indexeknek felelnek meg, hanem az  $n$  szám különböző, pozitív egész összeadandókra való felosztásainak; az összes ilyen felosztás száma egyenlő az irreducibilis ábrázolások számával. A  $\mathbf{D}^{(k)}(R)$  ábrázolások az  $n$  szám két összeadandóra való felbontásának felelnek meg:  $(n-k) + k$ . (Tekintettel az  $n-k \equiv k$  megszorításra, itt  $k \leq \frac{1}{2}n$ .) A  $\bar{\mathbf{D}}^{(k)}(R)$  ábrázolások pedig az  $n$  szám 1-esekre és 2-esekre való felbontásának:  $2+2+\dots+2+1+1+\dots+1=n$ , ahol az egyesek száma  $(n-2k)$ , a ketteseké  $k$ .



Az a tény, hogy a természetben előforduló összes sajátfüggvény az elektronok koordinátáinak permutálásakor ezen ábrázolás szerint transzformálódik, azzal kapcsolatos, hogy egy elektron számára külső mágneses térben csak két különböző orientáció lehetséges. Ha a lehetséges orientációk száma három (mint pl. a nitrogénmag esetében, melynek spinje egy),  $n$  három összeadandóra való felbontása szintén előfordul, azonkívül ezek asszociált ábrázolásai is, melyek az  $n$  szám egyesek, kettesek és hármasok összegére való felbontásának felelnek meg. Másrésztől, ha csak egy kvantált irány lehetséges (pl. a héliummag esetében, melynek spinje zérus), akkor csak a szimmetrikus ábrázolás, amely az  $n$  szám egyetlen összeadandóra való felbontásának felel meg:  $n=n$ , valamint az egyesekre való  $n=1+1+\dots+1$  felbontásnak megfelelő antiszimmetrikus ábrázolás fellépése gondolható el.

Hasonlítsuk össze e fejezet eredményeit a harmadfokú szimmetrikus csoportnak a 90.–91. oldalakon megadott (7.E.1), (9.E.1), (9.E.3) irreducibilis ábrázolásaival. Az az ábrázolás, melyet egyedül az (1) mátrix létesít, a  $\mathbf{D}^{(0)}(R)$  azonos ábrázolás ( $n=3+0$ ). Ennek asszociáltja a  $\bar{\mathbf{D}}^{(0)}(R)$  antiszimmetrikus ábrázolás ( $n=1+1+1$ ). A harmadik ábrázolás  $\mathbf{D}^{(1)}(R)$  ( $n=2+1$ ); az asszociáltja  $\bar{\mathbf{D}}^{(1)}(R)$  ( $n=2+1$ ), mely az előbbivel ekvivalens.

A negyedfokú szimmetrikus csoport esetében

$$\begin{aligned} \mathbf{D}^{(0)}(R) \quad (n=4), \quad \text{és} \quad \bar{\mathbf{D}}^{(0)}(R) \quad (n=1+1+1+1), \quad \text{dimenziója} \quad \begin{pmatrix} 4 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 4 \\ 1 \end{pmatrix} = 1, \\ \mathbf{D}^{(1)}(R) \quad (n=3+1), \quad \text{és} \quad \bar{\mathbf{D}}^{(1)}(R) \quad (n=2+1+1), \quad \text{dimenziója} \quad \begin{pmatrix} 4 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 4 \\ 0 \end{pmatrix} = 3, \\ \mathbf{D}^{(2)}(R) \quad (n=2+2), \quad \text{a vele ekvivalens} \quad \bar{\mathbf{D}}^{(2)}(R) \quad (n=2+2), \quad \text{dimenziója} \quad \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 4 \\ -1 \end{pmatrix} = 2. \end{aligned}$$

Összesen öt irreducibilis ábrázolás van, melyek a csoport öt osztályának felelnek meg. Dimenzióik négyzetösszege egyenlő a csoport rendjével:  $1^2+1^2+3^2+3^2+2^2=24=4!=h!$  Ugyanúgy, mint a harmadfokú szimmetrikus csoport esetében, a felsorolt ábrázolások ez esetben is felélelik valamennyi irreducibilis ábrázolást.

Az  $n=5$  esetben ily módon hat irreducibilis ábrázolást kapunk ( $\mathbf{D}^{(2)}(R)$  nem ekvivalens  $\bar{\mathbf{D}}^{(2)}(R)$ -rel). Minthogy azonban az osztályok száma hét, ez nem az összes irreducibilis ábrázolás. Nagyobb  $n$ -re az irreducibilis ábrázolások egyre csökkenő hányada lép fel a  $\mathbf{D}^{(k)}(R)$ -ek és  $\bar{\mathbf{D}}^{(k)}(R)$ -ek között. Mindamellett a Pauli-elv folytán az a következtetés adódik, hogy a fennmaradó ábrázolások nem játszanak szerepet az atomszínképek elméletében. Ezek az ábrázolások ugyanolyan módon kaphatók, mint a fent kapott ábrázolások; eltérés csak ott van, hogy olyan  $n$ -változós függvényeket kell tekintenünk, amelyek nem csupán két értéket vehetnek fel, mint ahogy azt a fenti tárgyalásban feltettük.

### Függelék a 13. fejezethez

#### SEGÉDTÉTEL A SZIMMETRIKUS CSOPORTRA VONATKOZÓAN

Most megmutatjuk, hogy  $k \leq \frac{1}{2}n$  mellett az  $\begin{pmatrix} n \\ k-1 \end{pmatrix}$  számú

$$F_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}} = s_{a_1} s_{a_2} \dots s_{a_{k-1}} s_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}} \quad (13.15)$$

függvény (ahol  $a_1 < a_2 < \dots < a_{k-1}$  és  $s_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}}$  mindazon  $s$ -ek összege, amelyek indexei nem fordulnak elő az  $a_1, a_2, \dots, a_{k-1}$  számok között) lineárisan független. Csak ha ez igaz, csak akkor vonhatjuk le a következtetést, hogy az  $s_{a_1 a_2 \dots a_k}$  szorzatoknak legfeljebb  $\binom{n}{k} - \binom{n}{k-1}$  számú lineáris kombinációja ortogonális valamennyi  $F_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}}$ -re. Az  $F_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}}$ -ek lineáris kombinációi az  $s_{a_1 a_2 \dots a_k}$  szorzatoknak:

$$F_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}} = \sum_b m_{a_1 \dots a_{k-1}; b_1 \dots b_k} s_{b_1} s_{b_2} \dots s_{b_k} \quad (13.16)$$

itt feltehetjük, hogy  $b_1 < b_2 < \dots < b_k$  és

$$m_{a_1 \dots a_{k-1}; b_1 \dots b_k} = \begin{cases} 1, & \text{ha } a_1, a_2, \dots, a_{k-1} \text{ mind előfordulnak} \\ & b_1, b_2, \dots, b_k \text{ között,} \\ 0 & \text{egyébként.} \end{cases} \quad (13.17)$$

A (13.16) összegben  $b_1, b_2, \dots, b_k$  végigfut az  $1, 2, \dots, n$  számoknak mind az  $\binom{n}{k}$  kombinációján. Ha az  $F_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}}$  függvények között fennállna valamilyen lineáris reláció, mondjuk

$$\sum_a c_{a_1 \dots a_{k-1}} F_{a_1 \dots a_{k-1}} = \sum_{a,b} c_{a_1 \dots a_{k-1}} m_{a_1 \dots a_{k-1}; b_1 \dots b_k} s_{b_1} \dots s_{b_k} \quad (13.18)$$

(összegezni ismét az  $a$ -k  $\binom{n}{k-1}$  kombinációjára s a  $b$ -k  $\binom{n}{k}$  kombinációjára kell), akkor következne, hogy minden  $x_{b_1 \dots b_k}$  számra (ezek  $b_1 < b_2 < \dots < b_k$  mellett vannak definiálva) fennáll:

$$\sum_{a,b} c_{a_1 \dots a_{k-1}} m_{a_1 \dots a_{k-1}; b_1 \dots b_k} x_{b_1 \dots b_k} = 0. \quad (13.19)$$

Ez úgy mutatható meg, hogy (13.18) és  $s_{d_1} s_{d_2} s_{d_3} \dots s_{d_k}$  skalárszorzatát megszorozzuk  $x_{d_1 \dots d_k}$ -val és a kapott egyenleteket összeadjuk a  $d_i$ -k minden lehetséges kombinációjára.

Az  $x_{b_1 b_2 \dots b_k}$  számokat most úgy választjuk, hogy legyen

$$\sum_b m_{a_1 \dots a_{k-1}; b_1 \dots b_k} x_{b_1 \dots b_k} = \begin{cases} 1, & \text{ha } a_1 = 1, a_2 = 2, \dots, a_{k-1} = k-1; \\ 0, & \text{egyébként.} \end{cases} \quad (13.20)$$

Ekkor (13.19) ekvivalens a

$$c_{12 \dots k-1} = 0 \quad (13.21)$$

feltétellel. A (13.21) egyenletnek az összes többi  $c_{a_1 \dots a_{k-1}}$  együtthatóra is teljesülnie kell, minthogy ezek mind egyöntetűen lépnek fel; azaz: lehetséges hasonló módon az  $x_{b_1 \dots b_k}$  együtthatókat úgy választani, hogy minden  $c$  eltűnését igazoljuk. (Csupán az  $1, 2, \dots, k-1$  indexeket kell a gondolatmenet hátralevő részében az  $a_1, a_2, \dots, a_{k-1}$  indexekkel helyettesítenünk.) Ennélfogva csak azt kell megmutat-

nunk, hogy a (13.30)-ra vezető választás tényleg lehetséges; ezzel teljes lesz az  $F_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}}$  függvények lineáris függetlenségének bizonyítása.

A  $x_{b_1 \dots b_k}$  együtthatókkal szabadon rendelkezhetünk. Válasszuk egymással egyenlőknek mindazokat az  $x_{b_1 \dots b_k}$  együtthatókat, amelyek  $b_1, b_2, \dots, b_k$  indexei között  $1, 2, \dots, k-1$  közül pontosan  $\tau$  szám lép fel (ahol  $0 \leq \tau \leq k-1$ ); eme  $x_{b_1 \dots b_k}$  együtthatók értékét jelölje  $x_\tau$ . Tekintsük most azokat a (13.20) alatt felírt egyenleteket, amelyekben  $a_1, a_2, \dots, a_{k-1}$  között  $1, 2, \dots, k-1$  közül pontosan  $\sigma$  szám lép fel. Minthogy  $m_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}; b_1 b_2 \dots b_k}$  csak akkor különbözik zérustól, ha az  $a_i$ -k mind fellépnek a  $b_i$ -k között, a (13.20) összeghez csak azok a tagok járulnak hozzá, melyeknek  $b_i$  indexei között  $1, 2, \dots, k-1$  közül  $\delta$  számú,  $k, k+1, \dots, n$  közül pedig  $k-1-\sigma$  számú fordul elő. Az az egy  $b$  index, melynek értéke nincs rögzítve, lehet az  $1, 2, \dots, k-1$  vagy a  $k, k+1, \dots, n$  számok valamelyike. Az előbbi esetben  $k-1-\sigma$  értéket vehet fel; az utóbbi esetben pedig  $n-k+1-(k-1-\sigma) = n-2k+2+\sigma$  értéket, minthogy nem lehet egyenlő az  $a_1, a_2, \dots, a_{k-1}$  számok egyikével sem. Eszerint (13.20) így írható:

$$(k-1-\sigma)x_{\sigma+1} + (n-2k+2+\sigma)x_\sigma = \begin{cases} 1, & \text{ha } \sigma = k-1, \\ 0, & \text{ha } \sigma = 0, 1, \dots, k-2. \end{cases} \quad (13.22)$$

Innen kapjuk:

$$x_{k-1} = \frac{1}{(n-k+1)}$$

és

$$-\frac{x_\sigma}{x_{\sigma+1}} = \frac{k-1-\sigma}{n-2k+2+\sigma}, \quad \text{ha } \sigma = 0, 1, \dots, k-2.$$

Ezek az egyenletek  $n-2k+2 > 0$  vagy  $k \leq \frac{1}{2}n+1$  esetén kielégíthetők; annál in-

kább teljesíthetők tehát  $k \leq \frac{1}{2}n$  esetén. Eszerint az  $x_{b_1 b_2 \dots b_k}$  együtthatók úgy választhatók, hogy (13.20) teljesül; így tehát (13.21) fennállása következik. Hasonlóképpen (13.18) alatt az összes többi  $c$  együtthatónak el kell tűnnie; ennél fogva az  $F$  függvények lineáris függetlenségét igazoltuk.

## 14. FORGÁSCSOPORTOK

1. Azt a folytonos csoportot, amelyet az összes valós ortogonális mátrix halmaza képez, *n*-dimenziós forgáscsoportnak nevezzük. A *tiszta forgáscsoport* csak azokat az ortogonális mátrixokat tartalmazza, amelyeknek a determinánsa  $+1$ , a *forgás-tükrözés-csoport* magában foglalja azokat is, amelyeknek a determinánsa  $-1$ ; az utóbbi tehát az *összes* valós ortogonális mátrixot tartalmazza. A csoportművelet ismét a mátrixszorzás, az azonosság pedig az egységmátrix.

A 3. fejezetben láttuk, hogy minden valós ortogonális mátrix átlós alakra hozható unitér mátrix segítségével. Mindegyik átlós elem abszolútértéke  $1$ ; egyeseknek  $+1$ , másoknak  $-1$  az értéke, a többi sajátértéket pedig  $e^{i\varphi}$ ,  $e^{-i\varphi}$  konjugált komplex számpárok képezik. A  $+1$  vagy  $-1$  sajátértékekhez tartozó sajátvektorok valós alakba írhatók, azok pedig, amelyek komplex konjugált sajátértékekhez tartoznak, komplex konjugált vektorpárként írhatók fel. Ez utóbbi sajátvektorok, mint a sajátvektorok általában, hermitikus értelemben ortogonálisak egymásra, ezért önmagukra komplex ortogonális értelemben ortogonálisak: komponenseik négyzetösszege zérus.

Valamely *n*-dimenziós ortogonális mátrix az ortogonális koordinátengelyek egy rendszerét egy másik ilyen rendszerbe transzformálja, azaz a koordinátengelyek elforgatását írja le. A mátrix ortogonalitása maga után vonja, hogy az új koordináta-rendszer tengelyei mind egymásra páronként ortogonálisak, és hogy az új tengelyek mentén a hosszegység ugyanakkora, mint a régi tengelyek mentén volt. A *tiszta forgáscsoport* csak olyan transzformációkat tartalmaz, amelyek valamely „jobb sodrású koordináta-rendszert” egy másik „jobb sodrású rendszerbe” transzformálnak; a *forgás-tükrözés-csoport* olyan transzformációkat is tartalmaz, amely jobb sodrású koordináta-rendszerből bal sodrásúba transzformál, és megfordítva. Ezeket nevezik „improprius” elforgatásoknak is.

Ahhoz, hogy általános eredményeinket folytonos csoportokra alkalmazhassuk, mindenekelőtt paramétereket kell bevezetnünk. Ezt csak aszimmetrikus módon tehetjük meg, minthogy bizonyos térbeli irányokat (a koordinátengelyekét) ki kell tüntetnünk a többivel szemben, s még maguk a koordinátengelyek sem részeshíthetők egyenlő elbánásban. Először határozzuk meg az adott csoport esetében

definiálendő paramétertér dimenziószámát. Tekintsünk egy  $n$ -dimenziós valós ortogonális mátrixot. Minthogy az első sor egységnyi hosszúságú  $n$ -dimenziós vektor (amely az új rendszer  $x$  tengelyét adja meg), ez az  $a_{11}^2 + a_{12}^2 + \dots + a_{1n}^2 = 1$  feltétel folytán pontosan  $n-1$  paramétert foglal magában. A második sornak (az  $y$  tengelynek) ortogonálisnak kell lennie az elsőre:  $a_{11}a_{21} + a_{12}a_{22} + \dots + a_{1n}a_{2n} = 0$ ; ez homogén lineáris egyenletet jelent az  $a_{21}, a_{22}, \dots, a_{2n}$  együtthatókra vonatkozóan, azonkívül fennáll az egységnyi hosszúságot kifejező  $a_{21}^2 + a_{22}^2 + \dots + a_{2n}^2 = 1$  feltétel. Eszerint a második sor  $n-2$  szabad paramétert tartalmaz. A  $k$ -edik sornak ortogonálisnak kell lennie a megelőző  $k-1$  sorra — ez  $k-1$  homogén egyenletet jelent — s a hosszúsága egységnyi. Ez tehát  $n-k$  számú szabad paramétert jelent. Összesen tehát

$$(n-1) + (n-2) + (n-3) + \dots + (n-(n-1)) + 0 = \frac{1}{2}n(n-1)$$

szabad paraméter van.

2. A következőkben a két- és a háromdimenziós forgáscsoportra korlátozódunk.

A kétdimenziós tiszta forgáscsoport általános elemét úgy kapjuk meg, hogy a síkban<sup>1</sup> új koordináta-rendszerre térünk át:

$$\begin{aligned} x' &= x \cos \varphi + y \sin \varphi \\ y' &= -x \sin \varphi + y \cos \varphi \end{aligned} \quad (14.1)$$

ahol az elforgatás  $\varphi$  szöge  $-\pi$ -től  $+\pi$ -ig változik. A csoport általános eleme eszerint

$$\begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ -\sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix}. \quad (14.2)$$

Ha ezután egy második transzfornációt is alkalmazunk, a koordináta-rendszert  $\varphi'$  szöggel elforgatva, amely az  $x', y'$  koordinátákat az  $x'', y''$  koordinátákba viszi át, a két transzformáció szorzatát kapjuk:

$$\begin{pmatrix} \cos \varphi' & \sin \varphi' \\ -\sin \varphi' & \cos \varphi' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ -\sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\varphi + \varphi') & \sin(\varphi + \varphi') \\ -\sin(\varphi + \varphi') & \cos(\varphi + \varphi') \end{pmatrix} \quad (14.3)$$

A (14.3) egyenlet mutatja, hogy a szorzat egyszerűen egy  $\varphi + \varphi'$  szögű elforgatás.

A kétdimenziós tiszta forgáscsoport *Abel*-csoport, minthogy elemeit egyetlen

<sup>1</sup> A forgatás akkor „pozitív”, ha az  $x$  tengely az  $y$  felé fordul el, ez a háromdimenziós forgatásokkal összhangban van. Általában valamely tengely körüli forgatás akkor pozitív, ha az illető tengely pozitív irányában előrehaladó jobb csavar forgatásával egyezik meg.

paraméter jellemzi. Ha a  $\varphi$  paraméterértékhez tartozó csoportelemre bevezetjük a 10. fejezetben használt  $\{\varphi\}$  jelölést, akkor (14.3) helyett írható:

$$\{\varphi'\} \cdot \{\varphi\} = \{\varphi + \varphi'\} = \{\varphi\} \cdot \{\varphi'\}. \quad (14.4)$$

Ha  $\varphi + \varphi'$  nem  $-\pi$  és  $+\pi$  között fekszik,  $2\pi$ -nek valamely egész számú többszörösét úgy kell hozzáadnunk vagy levonnunk, hogy a paraméterérték abba a tartományba essék, amelyen belül a paraméternek változnia szabad.

A (14.2) mátrix  $e^{\pm i\varphi}$  sajátértékeinek komplex fázisa a  $\varphi$  szög. A (14.2)-t diagonalizáló  $\mathbf{u}$  unitér mátrix oszlopait az

$$|u_{1z}|^2 + |u_{2z}|^2 = 1; \quad u_{1z}^2 + u_{2z}^2 = 0; \quad u_{1z} = \pm iu_{2z}$$

összefüggésekből határozhatjuk meg (egy egységnyi abszolútértékű tényező erejéig, amely önkényesen választható). Ezek a feltételek az  $u_{11} = 1/\sqrt{2}$ ,  $u_{21} = -i/\sqrt{2}$ ,  $u_{22} = +i/\sqrt{2}$ ,  $u_{12} = -1/\sqrt{2}$  értékeket adják:

$$\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ -\sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi} & 0 \\ 0 & e^{+i\varphi} \end{pmatrix} \quad (14.5)$$

Eszerint a (14.2) mátrixok mindegyikének ugyanazok a sajátvektorai. Minthogy a kétdimenziós tiszta forgáscsoport *Abel*-csoport, minden egyes eleme egymagában egy-egy osztályt képez.

3. Bármely kétdimenziós mátrixból, melynek  $-1$  a determinánsa, a második sornak  $-1$ -gyel való szorzása útján olyan mátrixot kaphatunk, amelynek a determinánsa  $+1$ . Megfordítva, a  $-1$  determinánsú ortogonális mátrix általános alakját oly módon kapjuk meg, hogy (14.2) második sorában megváltoztatjuk az előjeleket:

$$\begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ \sin \varphi & -\cos \varphi \end{pmatrix}. \quad (14.2a)$$

A (14.2) és (14.2a) mátrixok  $-\pi \leq \varphi \leq \pi$  mellett a kétdimenziós forgás-tükrözés-csoportot képezik. A (14.2a) mátrixok mindegyikének  $+1$  és  $-1$  a sajátértékei. Ezen mátrixoknak a sajátvektorai különbözőek:  $\mathbf{u}_1 = (\cos \varphi/2, \sin \varphi/2)$ ,  $\mathbf{u}_2 = (-\sin \varphi/2, \cos \varphi/2)$ , ugyanakkor a (14.2) mátrixok mindegyikének ugyanazok a sajátvektorai, sajátértékeik azonban különbözőek. Közvetlenül ellenőrizhetjük, hogy az a mátrix, melyet ebből a két sajátvektorból képezünk, a diagonális mátrixot tényleg (14.2a)-ba transzformálja:}

$$\begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi/2 & -\sin \varphi/2 \\ \sin \varphi/2 & \cos \varphi/2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \cos \varphi/2 & \sin \varphi/2 \\ -\sin \varphi/2 & \cos \varphi/2 \end{pmatrix} \quad (14.5a)$$

A (14.2a) „improprius” elforgatás (14.5a) alakja azt a tényt szemlélteti, hogy minden (14.2a) improprius elforgatás egy egyenesre való tükrözésként értelmez-

hető; (14.5a) mutatja: (14.2a) úgy kapható, hogy először  $\varphi/2$  szöggel *elforgatunk*, *azután tükrözünk* az  $x$  tengelyre, és *végül visszaforgatunk*,  $-\varphi/2$  szöggel. Másként is eljárhattunk volna ehelyett: a tükrözés elvégezhető arra az egyenesre vonatkozóan, amely az  $x$  tengellyel  $\varphi/2$  szöget zár be.

A kétdimenziós forgás—tükrözés-csoport vegyes folytonos csoport. E csoport legtermészetesebb paraméterezése egy  $\varphi$  folytonos és egy  $d$  diszkrét paraméter felhasználásával történhet. Az utóbbi a determináns értékével, azaz  $\pm 1$ -gyel egyenlő. Ekkor írható:

$$\{\varphi, d\} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ -d \sin \varphi & d \cos \varphi \end{pmatrix}, \quad (14.6)$$

$$\{\varphi, d\} \cdot \{\varphi', d'\} = \{d'\varphi + \varphi', dd'\}.$$

Ez a csoport nem *Abel*-csoport; a (14.2a) mátrixok nem kommutálnak és nincsenek közös sajátvektoraik.

A csoportnak osztályokra való felosztása ugyancsak megváltozik: (14.5a) azt mutatja, hogy a (14.2a) elemek mind *egy osztályban* vannak, mivel mind  $\{0, 1\}$ -be transzformálhatók. A (14.2) elemek egymagukban mégsem képeznek egy-egy osztályt, pl.

$$\begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ -\sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix} \quad (14.7)$$

így tehát  $\{\varphi, 1\}$  és  $\{-\varphi, 1\}$  ugyanabba az osztályba tartozik. Ez az osztály más elemet nem tartalmazhat, mivel az összes többi elem sajátértékei különbözőek, s így őket nem lehet a fent megadott elemek egyikébe vagy másikába transzformálni.

4. A *Hurwitz*-integrálra vonatkozóan a 10. fejezetben közölt általános megfontolásoknak megfelelően a kétdimenziós tiszta forgáscsoport tartományában létezik egy

$$\int_{-\pi}^{\pi} J(\{\varphi\}) g(\{\varphi\}) d\varphi = \int_{-\pi}^{\pi} J(R\{\varphi\}) g(\{\varphi\}) d\varphi \quad (14.8)$$

tulajdonságú invariáns integrál, ahol  $R$  a csoport bármely eleme lehet,  $g(T)$ -t pedig (10.9) definiálja:

$$g(T) = \frac{g(E)}{\frac{\partial p(T, \{\alpha\})}{\partial \alpha}} \quad (\text{e kifejezés értéke az } \alpha = 0 \text{ helyen veendő}). \quad (14.9)$$

Itt  $p(T)$  a  $T$  elem paramétere.

A kétdimenziós forgáscsoport esetében a közvetlen szemlélet mutatja, hogy egyenlő tartományoknak egyenlő súlyt kell tulajdonítanunk. Legyen  $t$  a  $T$  elem-

nek megfelelő paraméter; ekkor (14.4) szerint  $p(T) \cdot \{\alpha\} = t + \alpha$ . Ez 1-et ad, ha  $\alpha$  szerint differenciáljuk, így

$$g(T) = g(E). \quad (14.10)$$

Eszerint az invariáns integrál

$$\int_{-\pi}^{\pi} J(\{\varphi\}) d\varphi = \int_{-\pi}^{\pi} J(R \cdot \{\varphi\}) d\varphi \quad (14.11)$$

A kétdimenziós tiszta forgáscsoport irreducibilis ábrázolásai mind egydimenziósak. Ez minden *Abel*-csoportra igaz; speciális esetként igaz a folytonos *Abel*-csoportokra is. Tekintsünk egy több dimenziós, mondjuk kétdimenziós ábrázolást. Az ábrázolás valamely mátrixát átlós alakra hozhatjuk. Ha a két átlós elem nem egyenlő, a mátrix az

$$\begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix} \quad (14.E.1)$$

alakban írható fel. Mindazokban a mátrixokban, amelyek ezzel felcserélhetők — s így az ábrázolás valamennyi mátrixában —, a (14.E.1) mátrix különböző átlós elemeihez tartozó metszéspontokban csupa zérusoknak kell állniuk, tehát az ábrázolás reducibilis. Ha nem ez lenne a helyzet, akkor a (14.E.1) mátrix sajátértékei mind egyenlők volnának: (14.E.1) konstansmátrix lenne. Ekkor viszont a transzformáció elvégzése előtt is átlós alakú lett volna. Ez azonban az ábrázolás minden mátrixára igaz, így az ábrázolás annál inkább reducibilis lenne.

A (14.4) egyenletből következik, hogyha valamely ábrázolásban a  $\{\varphi\}$  elemnek az  $(f(\varphi))$  mátrix felel meg, akkor

$$(f(\varphi)) \cdot (f(\varphi')) = (f(\varphi')) \cdot (f(\varphi)) = (f(\varphi + \varphi')),$$

és így

$$f(\varphi) = e^{ik\varphi}.$$

Mínt hogy a mátrixnak  $\varphi = -\pi$  és  $\varphi = +\pi$  mellett egyenlő értékeket kell felvennie, fennáll:  $e^{ik\varphi} = e^{-ik\pi}$  és így  $e^{2ik\pi} = 1$ . Ebből következik, hogy  $k$  valós egész szám. A kétdimenziós tiszta forgáscsoportnak végtelen sok irreducibilis ábrázolása van, ezek mindegyike egydimenziós. Az  $m$ -edik ábrázolásban a  $\varphi$  elforgatási szöghöz tartozó (14.2) elem mátrixa

$$(e^{im\varphi}).$$

Minden pozitív és negatív  $m$  értékhez ( $m = \dots -4, -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3, \dots$ ) tartozik a kétdimenziós tiszta forgáscsoportnak egy-egy irreducibilis ábrázolása; ezek mind különbözőek.



A

$$\int_{-\pi}^{\pi} (e^{im'\varphi})^* (e^{im\varphi}) d\varphi = \begin{cases} 0, & \text{ha } m \neq m', \\ \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi = 2\pi, & \text{ha } m = m' \end{cases}$$

ortogonalitási összefüggések éppen a *Fourier*-sorok ortogonalitási összefüggései. Hasonlóképpen: az ábrázolás koefficienseinek teljessége a *Fourier*-kifejtés teljessége.

5. Most meg fogjuk határozni a kétdimenziós forgás—tükrözés-csoport irreducibilis ábrázolásait. A felhasznált módszer meglehetősen bonyolultnak tűnik majd erre a célra. Ugyanezt a módszert azonban később a háromdimenziós forgáscsoportra fogjuk alkalmazni. Azonkívül ez is példaként szolgál az ábrázolások és a megfelelő függvények között fennálló kapcsolatra.

Tekintsük a kétváltozós harmonikus polinomok

$$\frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial y^2} = 0 \quad (14.12)$$

differenciálegyenletét. Ez láthatóan invariáns a (14.6) transzformációkkal szemben. A (14.12) egyenlet  $x$ -ben és  $y$ -ban homogén  $m$ -edfokú megoldása  $\mathbf{P}_R$  hatása alatt [ahol az  $R$  transzformáció a (14.6) alakú] ugyanilyen alakú polinomba transzformálódik, mivel a  $\mathbf{P}_R$  transzformáció lineáris az  $x, y$  változóiban:

$$\mathbf{P}_{\{\varphi, d\}} f(x \cos \varphi + y \sin \varphi, -dx \sin \varphi + dy \cos \varphi) = f(x, y), \quad (14.13)$$

vagy minthogy  $\{\varphi, d\}^{-1}$  egyenlő  $\{-d\varphi, d\}$ -vel;

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{\{\varphi, d\}} f(x, y) &= f(x \cos(-d\varphi) + y \sin(-d\varphi), -xd \sin(-d\varphi) + yd \cos(-d\varphi)) = \\ &= f(x \cos \varphi - yd \sin \varphi, x \sin \varphi + yd \cos \varphi). \end{aligned} \quad (14.14)$$

Ha tehát  $f(x, y)$   $m$ -edfokú homogén polinom, akkor  $\mathbf{P}_R f$  szintén az.

A (14.12) egyenlet éppen az egyszimmetrikus hullámeqyenlet,  $i$  imaginárius sebességgel. Ennek általános megoldása

$$f(x, y) = f_-(x - iy) + f_+(x + iy) \quad (14.15)$$

Ha  $f(x, y)$   $m$ -edfokú homogén függvénye  $x$ -nek és  $y$ -nak,  $f_+$ -t és  $f_-$ -t (állandó tényezőtől eltekintve) a

$$f_-(x - iy) = (x - iy)^m; \quad f_+(x + iy) = (x + iy)^m \quad (14.16)$$

kifejezések adják meg. A  $\mathbf{Z}^{(m)}(\{\varphi, d\})$  ábrázolás, mely ezekhez a függvényekhez tartozik, kétdimenziós. Az ábrázolás első  $(-)$  oszlopát (11.23) és (14.14) segítségével határozhatjuk meg:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{\{\varphi, d\}} f_-(x, y) &= f_-(x \cos \varphi - y d \sin \varphi, x \sin \varphi + y d \cos \varphi) = \\ &= [(x \cos \varphi - y d \sin \varphi) - i(x \sin \varphi + y d \cos \varphi)]^m = \\ &= [x(\cos \varphi - i \sin \varphi) - i y d (\cos \varphi - i \sin \varphi)]^m = \\ &= (x - i y d) e^{-i m \varphi}. \end{aligned}$$

Az ábrázolás együtthatói segítségével ez így írható fel:

$$\mathbf{P}_{\{\varphi, d\}} f_-(x, y) = \mathbf{Z}^{(m)}(\{\varphi, d\})_{--} f_- + \mathbf{Z}^{(m)}(\{\varphi, d\})_{+-} f_+.$$

Az együtthatók kifejezései tehát:

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}^{(m)}(\{\varphi, 1\})_{--} &= e^{-i m \varphi} & \mathbf{Z}^{(m)}(\{\varphi, 1\})_{+-} &= 0 \\ \mathbf{Z}^{(m)}(\{\varphi, -1\})_{--} &= 0 & \mathbf{Z}^{(m)}(\{\varphi, -1\})_{+-} &= e^{-i m \varphi}. \end{aligned} \quad (14.17)$$

A másik  $(+)$  oszlop ugyanígy határozható meg  $f_+$  segítségével. A  $\mathbf{Z}^{(m)}(\{\varphi, 1\})$  mátrix számára, amely ebben az ábrázolásban a tiszta  $\varphi$  szögű elforgatásnak felel meg, ily módon a

$$\mathbf{Z}^{(m)}(\{\varphi, 1\}) = \begin{pmatrix} e^{-i m \varphi} & 0 \\ 0 & e^{i m \varphi} \end{pmatrix} \quad (14.18)$$

kifejezést kapjuk; itt a  $(-)$  sort (ill. oszlopot) írtuk elsőként, a  $(+)$  sort (ill. oszlopot) pedig másodiknak. A (14.2a) csoportelemnek megfelelő mátrix

$$\mathbf{Z}^{(m)}(\{\varphi, -1\}) = \begin{pmatrix} 0 & e^{i m \varphi} \\ e^{-i m \varphi} & 0 \end{pmatrix}. \quad (14.18a)$$

Az  $f_-$  függvény a  $\mathbf{Z}^{(m)}$  ábrázolás  $(-)$  (első) sorához tartozik; az  $f_+$  függvény pedig a  $(+)$  (vagyis a második) sorhoz.

Ezek az ábrázolások *irreducibilisek* és az  $m=1, 2, 3, \dots$  értékek mellett különbözőek. A (14.18) mátrixszal csak átlós mátrix cserélhető fel; az átlós mátrixok közül (14.18a)-val azonban csupán a konstans mátrix kommutál. A (14.6) mátrixok természetesen ugyancsak „ábrázolását” képezik önnön csoportjuknak. Ez az ábrázolás ekvivalens a (14.18), (14.18a) ábrázolás  $m=1$  speciális esetével; a (14.5) alatt felhasznált mátrix (14.6)-ot a (14.18), (14.18a) alakra transzformálja.

Megjegyzendő, hogy (14.18) és (14.18a)  $m=0$  mellett is ábrázolást képez. Ez azonban nem irreducibilis, mivel ebben az esetben (14.18)-cal minden mátrix fel-

cserélhető; ebben a speciális esetben (14.18a) átlós alakra hozható és az ábrázolás két irreducibilis komponensre bomlik:

$$\mathbf{Z}^{(0)}(\{\varphi, 1\}) = (1); \quad \mathbf{Z}^{(0)}(\{\varphi, -1\}) = 1, \quad (14.19)$$

és

$$\mathbf{Z}^{(0')}(\{\varphi, 1\}) = (1); \quad \mathbf{Z}^{(0')}(\{\varphi, -1\}) = (-1). \quad (14.20)$$

6. Megkaptuk tehát a kétdimenziós forgás—tükrözés-csoport összes irreducibilis ábrázolását. Ezeket  $m=1, 2, 3, \dots$  esetén (14.18) és (14.18a) adja meg, és kétdimenziósak; az  $m=0$  és  $m=0'$  esetben (14.19) és (14.20) adja meg az ábrázolásokat, amelyek egydimenziósak.

A  $\mathbf{Z}^{(m)}(\{\varphi, d\})_{\pm\pm}$  reprezentációs együtthatók teljes rendszert képeznek  $\varphi$  és  $d$  terében. Azaz: minden  $g(\varphi, d)$  függvény (ahol  $\varphi$  a  $-\pi$  és  $+\pi$  határok között változik,  $d$  pedig a  $+1$  vagy a  $-1$  értéket veheti fel) felírható ezek lineáris kombinációja alakjában. Az  $\frac{1}{2}(\mathbf{Z}^{(0)} + \mathbf{Z}^{(0')})$ ,  $\mathbf{Z}^{(1)}_{--}$ ,  $\mathbf{Z}^{(1)}_{++}$ ,  $\mathbf{Z}^{(2)}_{--}$ ,  $\mathbf{Z}^{(2)}_{++}$  függvények  $d=1$  mellett az  $1, e^{-i\varphi}, e^{i\varphi}, e^{-2i\varphi}, e^{2i\varphi}, \dots$  sorozatot adják,  $d=-1$  mellett pedig eltűnnek. Másrésztől  $\frac{1}{2}(\mathbf{Z}^{(0)} - \mathbf{Z}^{(0')})$ ,  $\mathbf{Z}^{(1)}_{+-}$ ,  $\mathbf{Z}^{(1)}_{-+}$ ,  $\mathbf{Z}^{(2)}_{+-}$ ,  $\mathbf{Z}^{(2)}_{-+}$ ,  $\dots$  egyenlő zérussal, ha  $d=1$ ;  $d=-1$  mellett pedig az  $1, e^{-i\varphi}, e^{i\varphi}, e^{-2i\varphi}, e^{2i\varphi}, \dots$  sorozatot adja. A  $g(\varphi, 1)$  függvény kifejezhető az első sorozat lineáris kombinációja alakjában, a  $g(\varphi, -1)$  függvény pedig a második lineáris kombinációjaként.

Abból, hogy a mátrixelemek teljes rendszert képeznek a paraméterterben, következik, hogy (14.18), (14.18a), (14.19) és (14.20) mellett *a kétdimenziós forgáscsoportnak más irreducibilis ábrázolása nincs.*

7. Most rátérünk a háromdimenziós tiszta forgáscsoport tanulmányozására. Valamely valós ortogonális egységnyi determinánsú  $\mathbf{a}$  mátrix sajátértékeinek az  $1, e^{-i\varphi}, e^{+i\varphi}, \dots$  alakúaknak kell lenniök, mivel mindnek  $1$  az abszolút értéke, és azok, amelyek komplexek, konjugált párokban lépnek fel. A komplex sajátértékek  $\varphi$  fázisának neve: *az elforgatás szöge.* Az  $1$  sajátértékhez tartozó  $\mathbf{v}_{\cdot 1}$  sajátvektort<sup>2</sup> *az elforgatás tengelyének* nevezzük. Ennek  $v_{11}, v_{21}, v_{31}$  komponenseit egyszerűen az  $\mathbf{a}\mathbf{v}_{\cdot 1} = 1\mathbf{v}_{\cdot 1}$  egyenletből kiindulva határozhatjuk meg. Ha ezt megszorozzuk  $\mathbf{a}^{-1} = \mathbf{a}'$ -vel, kapjuk:  $(\mathbf{a} - \mathbf{a}')\mathbf{v}_{\cdot 1} = 0$ . Innen következik:

$$\begin{aligned} (a_{12} - a_{21})v_{21} + (a_{13} - a_{31})v_{31} &= 0, \\ (a_{21} - a_{12})v_{11} + (a_{23} - a_{32})v_{31} &= 0, \\ (a_{31} - a_{13})v_{11} + (a_{32} - a_{23})v_{21} &= 0. \end{aligned} \quad (14.21)$$

Ezek alapján:

$$v_{11} : v_{21} : v_{31} = a_{23} - a_{32} : a_{31} - a_{13} : a_{12} - a_{21}. \quad (14.22)$$

<sup>2</sup> Noha  $\mathbf{v}_{\cdot 1}$  vektor, e vizsgálatban a mátrix oszlopának szerepét is játssza, így a mátrixelemekre vonatkozó megállapodásaink szerint jelöljük.

Az elforgatás  $\varphi$  szögét a legkönnyebben úgy határozhatjuk meg, hogy a sajátértékek összegét egyenlővé tesszük a mátrix átlósösszegével:

$$1 + e^{-i\varphi} + e^{i\varphi} = 1 + 2 \cos \varphi = a_{11} + a_{22} + a_{33}, \quad (14.23)$$

itt  $\varphi$  zérus és  $\pi$  között fekszik.

Az  $e^{-i\varphi}$ -nek és  $e^{+i\varphi}$ -nek megfelelő  $\mathbf{v}_2$  és  $\mathbf{v}_3$  sajátvektorok komplex konjugáltak:  $\mathbf{v}_2^* = \mathbf{v}_3$ . Másrésztől feltesszük, hogy  $\mathbf{v}_1$  valós:  $(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) = ((\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_1)) = 1$ .

Azon  $\mathbf{v}$  mátrix, amelynek oszlopai az  $\mathbf{a}$  mátrix  $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3$  sajátvektorai,  $\mathbf{a}$ -t átlós alakra transzformálja. Ennélfogva  $\mathbf{v}^\dagger \mathbf{a} \mathbf{v}$  átlós mátrix, melynek átlós elemei az  $1, e^{-i\varphi}, e^{i\varphi}$  sajátértékek. Legyen most  $\mathbf{V} = \mathbf{v} \mathbf{v}_0$ , ahol<sup>3</sup>

$$\mathbf{v}_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -i/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 0 & +i/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \quad (14.24)$$

A  $\mathbf{V}$  mátrix oszlopait  $\mathbf{v}_1, \frac{-i}{\sqrt{2}}(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_2^*)$  és  $\frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{v}_2 + \mathbf{v}_2^*)$  adja, tehát  $\mathbf{V}$  valós. Azon-

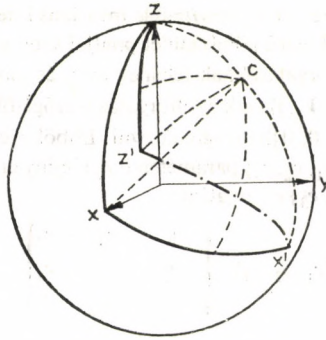
felül  $\mathbf{V}$ , mint a  $\mathbf{v}, \mathbf{v}_0$  unitér mátrixok szorzata, szintén unitér;  $\mathbf{V}$  tehát valós ortogonális mátrix, és így eleme a forgáscsoportnak. Ha a  $\mathbf{v}^\dagger \mathbf{a} \mathbf{v} = \mathbf{d}$  mátrixot  $\mathbf{v}_0$  segítségével transzformációnak vetjük alá, kapjuk:

$$\mathbf{V}^\dagger \mathbf{a} \mathbf{V} = \mathbf{v}_0^\dagger \mathbf{v}^\dagger \mathbf{a} \mathbf{v} \mathbf{v}_0 = \mathbf{v}_0^\dagger \mathbf{d} \mathbf{v}_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi & \sin \varphi \\ 0 & -\sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix} = \boldsymbol{\varepsilon}_\varphi \quad (14.25)$$

Ebben az egyenletben még azt is feltehetjük, hogy  $\mathbf{V}$  tiszta elforgatás; ha ugyanis  $\mathbf{V}$  determinánsa  $-1$  volna,  $\mathbf{V}$ -t meg lehetne szorozni  $-1$ -gyel anélkül, hogy ezzel a (14.25) egyenletet megváltoztatnánk. Látható (14.25)-ből, hogy minden elforgatás, melynek ugyanakkora az elforgatási szöge, azonos osztályba tartozik, mivel transzformáció útján mind átvihető  $\boldsymbol{\varepsilon}_\varphi$ -be. Másrésztől azok a mátrixok, amelyeknek elforgatási szöge különbözik  $\varphi$ -től, nem tartozhatnak ugyanebbe az osztályba, mivel sajátértékeik különbözőek és így nem lehet őket  $\boldsymbol{\varepsilon}_\varphi$ -be transzformálni.

E gondolatmenet geometriai interpretációja az a jól ismert tétel, hogy a háromdimenziós térben minden ortogonális transzformáció helyettesíthető alkalmas  $\mathbf{v}_1$  tengely körül végrehajtott elforgatással. (Az  $\mathbf{a} \mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_1$  egyenletnek megfelelően a forgástengelyt nem változtatja meg az elforgatás.) Ha a transzformáció a  $\delta$  ábrán az  $XZ$  ívet az  $X'Z'$  ívbe viszi át, akkor a forgástengelynek rajta kell feküdnie  $ZZ'$  és  $XX'$  felezőmerőlegesein, s így azok  $C$  metszéspontján is. Valóban, a  $C$

<sup>3</sup>  $\mathbf{v}_0$ -t úgy választottuk meg, hogy  $\mathbf{a}$ -nak  $\mathbf{v}_0$ -ával való transzformáltja  $X$  tengely körüli forgatás legyen.  $\mathbf{v}_0$ -nak más választása például  $Y$ -tengely körüli forgatáshoz vezet.



6. ábra

*A (14.25) egyenlet geometriai interpretációja (lásd a szöveget)*

körül végrehajtott elforgatás  $Z$ -t  $Z'$ -be és  $X$ -et  $X'$ -be transzformálja:  $ZCX$  és  $Z'C'X'$  háromszögek egybevágóságából (oldalaik rendre megegyező voltából) következik, hogy a  $ZCX$  és  $Z'C'X'$  szögek egyenlők. Ennélfogva a  $ZCZ'$  és  $XCX'$  szögek szintén egyenlők és megegyeznek az elforgatás  $\varphi$  szögével. Egy  $\varphi$  szögű elforgatást egy másik, azonos szögű elforgatásba transzformálhatunk oly módon, hogy az első elforgatás forgástengelyét egy  $V$  elforgatás segítségével átvisszük a második elforgatás tengelyébe, ezután elvégezzük a  $\varphi$  szögű elforgatást, végül a tengelyt  $V^{-1}$  segítségével visszavisszük eredeti helyzetébe.

Az elforgatások egyértelmű jellemzésére a forgástengelynek irányítást kell adnunk, ami egyszerre  $v_1$  előjelének is értelmet ad. Az elforgatás az óramutató járásával egyező irányban fog történni, az elforgatás tengelyének pozitív irányába tekintve.

A háromdimenziós tiszta forgáscsoport paraméterezése (1. ábra, 99. o.), melyet a 10. fejezetben tárgyaltunk, ezeken a jellemzőkön alapszik. A  $v_1$  tengely körül végrehajtott  $\varphi$  szögű elforgatásnak a kezdőponttól a  $v_1$  irányban  $\varphi$  távolságra fekvő pont felel meg.<sup>4</sup> A  $\varphi$  forgásszöget mindenkor egyértelműen meghatározza az elforgatás. A  $\varphi=0$  szögű elforgatás esetében (ez valójában nem jelent elforgatást) a forgástengely iránya meghatározatlan; a paraméterter megfelelő pontja mindazonáltal egyértelműen meg van adva: az a gömbnek a középpontja.

A paraméterterben a  $\varphi=\pi$  gömbfelületen a forgástengely iránya nincs egyértelműen meghatározva; az ellentett irányítású tengelyek körül végrehajtott  $\pi$  szögű elforgatások azonosak. A gömbfelület ellentett pontjainak eszerint ugyanaz az elforgatás felel meg. Ettől eltekintve az elforgatások egy-egyértelmű módon felelnek meg a paraméterter pontjainak. Egy-egy adott osztály elemei koncentrikus gömbökön fekszenek.

<sup>4</sup> A 10. fejezetben az 1. ábrához fűződő magyarázatban az origótól való távolság  $\varphi/\pi$  és nem  $\varphi$  volt. A jelen diszkusszió során az ábra bal oldali részét  $\pi : 1$  arányban meg kell nagyítani.

A paraméterek ezen rendszerében a Hurwitz-féle invariáns integrált is meglehetősen könnyen megfogalmazhatjuk. Mivel a  $\varphi$  sugarú gömbfelület pontjai azonos szöggel, de különböző irányú tengelyek körül végrehajtott elforgatásoknak felelnek meg, és mivel a térben minden forgástengely ekvivalens,  $g(\{\varphi V_{11}, \varphi V_{21}, \varphi V_{31}\})$  csak az elforgatás  $\varphi$  szögétől függhet,  $v_{,1}$  irányától azonban független. Elegendő tehát  $g(\{\varphi, 0, 0\})$ -t meghatározni. Ebből a célból [lásd a (10.9) egyenletet] először kiszámítjuk  $\{\varphi, 0, 0\} \cdot \{e_1, e_2, e_3\}$  paramétereit  $e_i$  kicsiny értékeire, azután az  $e_i$  értékekkel zérushoz közelítünk. Az  $\{e_1, e_2, e_3\}$  elforgatást

$$\{e_1, e_2, e_3\} = \begin{pmatrix} 1 & e_3 & -e_2 \\ -e_3 & 1 & e_1 \\ e_2 & -e_1 & 1 \end{pmatrix}$$

adja meg, az  $e_i$ -k első hatványáig terjedő pontossággal. [Lásd a (14.22) egyenletet.] A  $\{\varphi, 0, 0\} \cdot \{e_1, e_2, e_3\} = \varepsilon_\varphi \cdot \{e_1, e_2, e_3\}$  elforgatás számára a

$$\begin{pmatrix} 1 & e_3 & -e_2 \\ -e_3 \cos \varphi + e_2 \sin \varphi & \cos \varphi - e_1 \sin \varphi & e_1 \cos \varphi + \sin \varphi \\ e_3 \sin \varphi + e_2 \cos \varphi & -\sin \varphi - e_1 \cos \varphi & -e_1 \sin \varphi + \cos \varphi \end{pmatrix}$$

kifejezést kapjuk. Ebből a (14.23) egyenlet alapján kiszámítjuk az elforgatás  $\varphi'$  szögét:

$$1 + 2 \cos \varphi' = 1 + 2 \cos \varphi - 2e_1 \sin \varphi; \quad \varphi' = \varphi + e_1 \quad (14.23a)$$

A forgástengely irányát pedig a (14.22) egyenletből kapjuk meg:

$$v'_{11} : v'_{21} : v'_{31} = 2e_1 \cos \varphi + 2 \sin \varphi : e_3 \sin \varphi + e_2(1 + \cos \varphi) : e_3(1 + \cos \varphi) - e_2 \sin \varphi. \quad (14.22a)$$

Felhasználva a  $v'_{11}{}^2 + v'_{21}{}^2 + v'_{31}{}^2 = 1$  normálási feltételt, innen (az  $e$ -ben első rendű tagokig terjedő pontossággal) kapjuk:

$$v'_{11} = 1; \quad v'_{21} = \frac{e_2(1 + \cos \varphi)}{2 \sin \varphi} + \frac{e_3}{2}; \quad v'_{31} = \frac{e_3(1 + \cos \varphi)}{2 \sin \varphi} - \frac{e_2}{2}.$$

Eszerint  $\{\varphi, 0, 0\} \cdot \{e_1, e_2, e_3\}$  paramétereit

$$\varphi + e_1, \quad \varphi \left[ \frac{e_2(1 + \cos \varphi)}{2 \sin \varphi} + \frac{e_3}{2} \right], \quad \varphi \left[ \frac{e_3(1 + \cos \varphi)}{2 \sin \varphi} - \frac{e_2}{2} \right].$$

Behelyettesítve ide az  $e_1 = e_2 = e_3 = 0$  értékeket, megkajuk  $\varepsilon_\varphi$  paramétereit:  $\varphi, 0, 0$ . A bennünket érdeklő Jacobi-determináns értéke  $e_1 = e_2 = e_3 = 0$  mellett

$$\frac{\partial(p_1(\{\varphi, 0, 0\}\{e_1, e_2, e_3\}), \dots, p_3(\{\varphi, 0, 0\}\{e_1, e_2, e_3\}))}{\partial(e_1, e_2, e_3)} =$$

$$= \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \varphi \frac{1 + \cos \varphi}{2 \sin \varphi} & -\frac{\varphi}{2} \\ 0 & +\frac{\varphi}{2} & \varphi \frac{1 + \cos \varphi}{2 \sin \varphi} \end{vmatrix} = \frac{\varphi^2 (1 + \cos \varphi)^2 + \sin^2 \varphi}{4 \sin^2 \varphi} =$$

$$= \frac{\varphi^2}{2(1 - \cos \varphi)}.$$



# 15. A HÁROMDIMENZIÓS VALÓDI FORGÁSCSOPORT

## A GÖMBHARMONIKUSOK

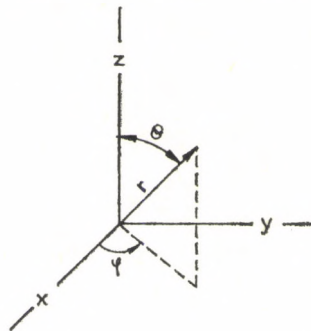
1. A háromdimenziós forgáscsoport irreducibilis ábrázolásai a kétdimenziós csoportéhoz hasonlóan a

$$\frac{\partial^2 J(x, y, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 J(x, y, z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 J(x, y, z)}{\partial z^2} = 0 \quad (15.1)$$

*Laplace*-féle differenciálegyenletet kielégítő homogén  $l$ -ed fokú polinomok segítségével vezethetők le. Az ilyen polinomok valamely  $R$  ortogonális transzformációja egy másik  $l$ -ed fokú polinomot eredményez, amely ugyancsak megoldása a (15.1) egyenletnek, ezért a nemtranszformált polinomok lineáris kombinációjaként kifejezhető. Az együtthatók egy ábrázolást alkotnak; ezt  $\mathbf{D}^{(l)}(R)$ -rel jelöljük. A módszert, amely a *Laplace*-egyenleten alapul, csak röviden ismertetjük, mert más eljárással fogjuk a háromdimenziós forgáscsoport irreducibilis ábrázolásait meghatározni.

(15.1) megoldása során az  $x$ ,  $y$  és  $z$  helyébe az  $r$ ,  $\vartheta$  és  $\varphi$  polárkoordinátákat szokás bevezetni (lásd a 7. ábrát); az  $l$ -ed fokú polinomok alakja ekkor  $r^l Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ . Ha ezt az alakot behelyettesítjük a polárkoordinátás formába írt (15.1) egyenletbe, akkor  $r$  kiesik és a  $\vartheta$  és  $\varphi$  változókban ( $l$ -et tartalmazó) differenciálegyenletet kapunk. Ezen egyenlet

$$Y_{l,-l}(\vartheta, \varphi), Y_{l,-l+1}(\vartheta, \varphi), \dots, Y_{l,l-1}(\vartheta, \varphi), Y_{l,l}(\vartheta, \varphi) \quad (15.2)$$



7. ábra

Az  $r$ ,  $\vartheta$  és  $\varphi$  polárkoordináták



$(2l+1)$  lineárisan független megoldása  $l$ -ed fokú gömbharmonikus néven ismert.<sup>1,2</sup>  
E megoldások alakja a következő:

$$Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) = \Phi_m(\varphi) \Theta_{lm}(\vartheta), \quad (15.3)$$

ahol

$$\begin{aligned} \Phi_m(\varphi) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \\ \Theta_{lm} &= \left[ \frac{2l+1}{2} \cdot \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} \sin^m \vartheta \frac{d^m}{d(\cos \vartheta)^m} P_l(\cos \vartheta) (-1)^m, \\ \Theta_{l-m} &= \left[ \frac{2l+1}{2} \cdot \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} \sin^m \vartheta \frac{d^m}{d(\cos \vartheta)^m} P_l(\cos \vartheta). \end{aligned} \quad (15.3a)$$

A  $P_l(\cos \vartheta)$  a Legendre-polinom, amelyet a

$$P_l(\cos \vartheta) = \frac{1}{2^l l!} \cdot \frac{d^l}{d(\cos \vartheta)^l} (\cos^2 \vartheta - 1)^l \quad (15.3b)$$

képlet ad meg. Ha  $\vartheta=0$ , akkor valamennyi  $Y_{lm}$  eltűnik, kivéve az  $Y_{l0}$ -t; ahogy annak lennie is kell, hiszen  $\vartheta=0$  esetén  $\varphi$  határozatlan, így e pontban  $Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \sim e^{im\varphi} P_l(\cos \vartheta)$  értéke nem függhet  $\varphi$ -től.<sup>3</sup>

(15.3) legfontosabb jellemzője a  $\varphi$  függés. Alkalmazzuk a  $Z$  tengely körüli  $\alpha$  szögű  $R$  forgatáshoz tartozó  $\mathbf{P}_R$  operátort  $r^l Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ -re. Ekkor a sugár és a  $\vartheta$  polárszög nem változik,  $\varphi$  pedig  $(\varphi + \alpha)$ -ba megy át. Ha tehát a forgatást az  $\{\alpha, \beta, \gamma\}$  Euler-szögekkel jelöljük, akkor

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{\{\alpha, 0, 0\}} r^l Y_{lm}(\vartheta, \varphi) &= r^l \frac{e^{im(\varphi + \alpha)}}{\sqrt{2\pi}} \Theta_{lm}(\vartheta) = \\ &= e^{im\alpha} r^l Y_{lm}(\vartheta, \varphi). \end{aligned} \quad (15.4)$$

Az  $l$ -edfokú gömbharmonikusokhoz tartozó  $(2l+1)$ -dimenziós ábrázolás sorait és oszlopait a megfelelő gömbharmonikusoknak a  $-l$ -től  $+l$ -ig terjedő második indexe sorszámozza. Így

$$\mathbf{P}_{\{\alpha, \beta, \gamma\}} r^l Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \sum_{m'=-l}^l D^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{m'm} r^l Y_{lm}(\vartheta, \varphi). \quad (15.5)$$

Az együtthatókat a szokásos módon egyenlővé téve kapjuk, hogy

$$D(\{\alpha, 0, 0\})_{m'm} = e^{im\alpha} \delta_{m'm}.$$

Lásd D. HILBERT, R. COURANT: Methoden der Mathematischen Physik. (Springer, Berlin, 1924) 66, 265, 420 o. Angol fordításban Interscience, New York, 1953. I. kötet 510 o.

<sup>2</sup> A sajátfüggvények fázisait E. U. CONDON, G. H. SHORTLEY: The Theory of Atomic Spectra. (Cambridge Univ. Press, London és New York 1953) c. könyvével összhangban választottuk meg.

<sup>3</sup> Ha  $\Theta_{lm}$  ( $m \geq 0$ ) függvényt osztjuk a (15.3a)-ban szereplő négyzetgyökkel, a gyakran  $P_l(\cos \vartheta)$ -val jelölt asszociált Legendre-polinomot kapjuk meg.

Így a  $\mathbf{D}^{(l)}$  ábrázolásban a  $Z$  tengely körüli forgatásnak diagonális mátrix felel meg. Az  $\alpha$  szögű forgatás ábrázoló mátrixa

$$\mathbf{D}^{(l)}(\{\alpha, 0, 0\}) = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i(l-1)\alpha} & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & e^{i(l-1)\alpha} & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & e^{i\alpha} \end{pmatrix}. \quad (15.6)$$

Most megmutatjuk, hogy a  $\mathbf{D}^{(l)}$  ábrázolások irreducibilisek, mégpedig úgy, hogy bebizonyítjuk: Az olyan mátrix, amelyik minden  $\alpha$ ,  $\beta$  és  $\gamma$  érték esetén felcserélhető  $\mathbf{D}^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})$ -val, szükségképpen az állandómátrix. Először is csak átlós mátrix cserélhető fel az összes (15.6) mátrixszal. Ezért az olyan mátrix, amely elcserélhető az összes  $\mathbf{D}^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})$ -val, biztosan átlós. Továbbá, amint azt alább belátjuk, általában (vagyis  $\beta$  bizonyos diszkrét értékeitől eltekintve)  $\mathbf{D}^{(l)}(\{0, \beta, 0\})$  mátrix 0-ik sorában nem fordulnak elő zérusok. Így csak az olyan átlós mátrix cserélhető fel e mátrixokkal, amelyben valamennyi átlós elem egyenlő egymással (ez az állandó mátrix). Tegyük fel ugyanis, hogy a  $d_k$  elemekkel rendelkező átlós mátrix felcserélhető  $\mathbf{D}^{(l)}(\{0, \beta, 0\})$ -val; a szorzatok 0-ik sorának elemei ekkor

$$d_0 \mathbf{D}^{(l)}(\{0, \beta, 0\})_{0k} = \mathbf{D}^{(l)}(\{0, \beta, 0\})_{0k} d_k, \quad (15.E.1)$$

amiből következik, hogy  $d_0 = d_k$ .

Az, hogy  $\mathbf{D}^{(l)}(\{0, \beta, 0\})$ -ik sorában általában nincs zérus, így látható be: ha  $R$  az  $Y$  tengely körüli  $\beta$  szögű forgatás, akkor  $\mathbf{P}_R$  az  $r$ ,  $\vartheta$ ,  $0$  pontot az  $r$ ,  $\vartheta + \beta$ ,  $0$  ponttal helyettesíti. Ezért az  $r^l Y_{lm}(\vartheta + \beta, 0)$ -k az  $r^l Y_{lm}(\vartheta, 0)$ -k lineáris kombinációi lesznek  $\mathbf{D}^{(l)}(\{0, \beta, 0\})_{m'm}$  együtthatókkal. Tekintsük a  $\vartheta = 0$  pontot, ekkor az  $Y_{em}(\beta, 0)$ -k általában nem zérusok, míg az  $Y_{lm}(0, 0)$ -k mind eltűnnek, kivéve  $Y_{l0}(0, 0)$ -t. Ha e tag  $\mathbf{D}^{(l)}(\{0, \beta, 0\})_{0m}$  együtthatója eltűnnék, akkor az egyenlet jobb oldalán minden tag zérus lenne, viszont a bal oldal nem az; ezért  $\mathbf{D}^{(l)}(\{0, \beta, 0\})_{0m}$  nem tűnhet el.

2. A  $\mathbf{D}^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})$  ábrázolások tehát minden  $l=0, 1, 2, \dots$  esetén irreducibilisek. Abból a célból, hogy karaktereiket meghatározzuk felidézzük, hogy az ugyanazon osztályhoz tartozó mátrixok átlösszegei egyenlőek. Mivel esetünkben egy osztályt annak  $\varphi$  forgásszöge jellemez, a  $\chi^{(l)}(\varphi)$  karakter csupán a forgásszög függvénye, és úgy határozható meg, hogy kiszámítjuk bármely olyan mátrix átlóját, amely  $\varphi$  forgásszögű elemhez tartozik. Ilyen mátrixszal azonban (15.6) alatt már találkoztunk, ha  $\alpha = \varphi$ . Így kapjuk, hogy

$$\chi^{(l)}(\varphi) = \sum_{m=-l}^{+l} e^{im\varphi} = (1 + 2 \cos \varphi + 2 \cos 2\varphi + \dots + 2 \cos l\varphi). \quad (15.7)$$

Az ortogonalitási összefüggések (a (14.27)-ben meghatározott súlyfüggvényt használva) a következők:

$$8\pi g(E) \int_0^\pi \chi^{(l)}(\varphi) \chi^{(l)}(\varphi) (1 - \cos \varphi) d\varphi = 8\pi^2 g(E) \delta_{l'l}.$$

Ezt egyszerű integrálással könnyen bebizonyíthatjuk. Az is belátható, hogy a  $\mathbf{D}^{(l)}$ -eken kívül nem létezik irreducibilis ábrázolás: bármilyen ilyen ábrázolás karaktereinek *Fourier-tételének* értelmében el kell tűnniük, hiszen  $(1 - \cos \varphi)$ -vel szorozva  $0 \leq \varphi \leq \pi$  tartományban ortogonálisak valamennyi  $\lambda^{(l)}$ -re, tehát valamennyi  $\lambda^{(l+1)} - \lambda^{(l)}$ -re is, de ezek éppen az  $1, 2 \cos \varphi, 2 \cos 2\varphi, 2 \cos 3\varphi, \dots$  függvények.

Ebből következik tehát, hogy a  $\mathbf{D}^{(0)}, \mathbf{D}^{(1)}, \mathbf{D}^{(2)}, \dots$  sorozat a háromdimenziós forgáscsoport valamennyi inekvivalens ábrázolását tartalmazza. Ezek száma végtelen, amint annak lennie is kell, hiszen a forgáscsoport osztályainak száma végtelen.

Az azonos ábrázolás a  $\mathbf{D}^{(0)}$ . A háromdimenziós ortogonális mátrixok — mint saját csoportjuk ábrázolása — ekvivalensek  $\mathbf{D}^{(1)}$ -gyel; ez vagy a dimenzióból, vagy onnan látható be azonnal, hogy karaktereik megegyeznek.

A háromdimenziós forgáscsoport minden ábrázolása  $\mathbf{D}^{(0)}, \mathbf{D}^{(1)}, \mathbf{D}^{(2)}, \dots$  valamilyen kombinációja, és hasonlósági transzformáció erejéig megadható ama számokkal, hogy az egyes  $\mathbf{D}^{(0)}, \mathbf{D}^{(1)}, \mathbf{D}^{(2)}, \dots$  ábrázolások hányszor fordulnak elő benne. Ezek az  $A_0, A_1, A_2, \dots$  számok azonban egy alcsoporthoz, nevezetesen a  $Z$  tengely körüli forgások kétdimenziós forgáscsoportjának megfelelő mátrixokból meghatározhatók. Ha a kétdimenziós forgáscsoport ( $\exp im\varphi$ ) ábrázolása  $a_m$ -szer fordul elő, akkor (ha  $m \geq 0$ )  $a_m = A_m + A_{m+1} + \dots$  és  $\mathbf{D}^{(l)}$ -et az egész ábrázolás  $A_l = a_l - a_{l+1}$ -szer tartalmazza. Ügyeljünk arra, hogy ez a következtetés csak úgy vonható le, ha előzőleg már valahogyan meggyőződünk arról, hogy valóban ábrázolással van dolgunk; ez az ismérv nem alkalmazható a mátrixoknak akármilyen rendszerére.

A (15.6) egyenlet megadja a  $\mathbf{D}^{(l)}(\{\alpha, 0, 0\}) = \mathbf{D}^{(l)}(\{0, 0, \gamma\})$  mátrixokat; most már valamennyi  $\mathbf{D}^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})$  mátrixot ismernénk, ha az  $Y$  tengely körüli forgásoknak megfelelő mátrixok a birtokunkban lennének. Jelöljük a  $\mathbf{D}^{(l)}(\{0, \beta, 0\})_{\kappa\lambda}$  mátrixelemet  $d^{(l)}(\beta)_{\kappa\lambda}$ -val. Az  $\{\alpha, \beta, \gamma\}$  forgás a három  $\{\alpha, 0, 0\}, \{0, \beta, 0\}$  és a  $\{0, 0, \gamma\}$  forgás szorzata. Az ennek megfelelő mátrix ezért  $\mathbf{D}^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\}) = \mathbf{D}^{(l)}(\{\alpha, 0, 0\}) \mathbf{D}^{(l)}(\{0, \beta, 0\}) \mathbf{D}^{(l)}(\{0, 0, \gamma\})$ . Ezért az általános forgás mátrixa  $Y$  körüli forgás mátrixának segítségével így írható:

$$\mathbf{D}^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{m'm} = e^{im'\alpha} d^{(l)}(\beta)_{m'm} e^{im\gamma} \quad (15.8)$$

## A KÉTDIMENZIÓS UNITÉR CSOPORT HOMOMORF A FORGÁSCSOPORTRA

3. A háromdimenziós forgáscsoport irreducibilis ábrázolásait most egy másik, H. WEYL által javasolt módszer szerint kívánjuk levezetni. Áttérünk e módszerre, noha a Laplace-egyenletet gyümölcsötzető levezetést csupán röviden ismertettük, ugyanis a Weyl-féle eljárás lehetőséget nyújt a szokásos ábrázolásokkal egy időben az úgynevezett „kétértékű ábrázolások” levezetésére is. Ezek a spin elméletével kapcsolatos megfontolásainkban ugyanolyan fontos szerepet játszanak majd, mint a szokásos ábrázolások.

A szimmetrikus csoport esetén megelégedhetünk az egyes ábrázolások dimenziójának és karaktereinek meghatározásával. A forgáscsoportnál azonban a karaktereken kívül az ábrázolási mátrixok elemeire is szükségünk van. Később látni fogjuk, hogy fizikai szempontból értelmes mennyiségekben valamennyi azonos részecske egyformán szerepel. A tér különböző irányai azonban csak akkor egyenértékűek, ha minden irány egyenrangú mind a keresett fizikai mennyiség képletében, mind pedig a vizsgált speciális mechanikai problémában. Ha például egy dipólusmomentum valamelyik komponensét vizsgáljuk, máris kitüntettünk egy irányt.

Három egyszerű lemmával kezdjük; ezek valójában a mátrixok elemi elméletéhez tartoznak.

a) Az olyan mátrix, amely minden valós vektort valós vektorba transzformál át, maga is valós, vagyis minden eleme valós. Ha ezt a mátrixot a  $k$ -edik egységvektorra (ennek  $k$ -edik komponense 1, a többi 0) alkalmazzuk, eredményül a mátrix  $k$ -edik sorát alkotó vektort kapjuk. E sornak tehát valósnak kell lennie. Ez az érvelés azonban bármely  $k$ -ra érvényes, tehát a mátrix valamennyi sora valós.

b) Beláttuk a 3. fejezetben (a 34. oldalon), hogy a  $\mathbf{O}$  mátrix komplex ortogonális, ha tetszőleges két vektor közöséges skalárszorzatát változatlanul hagyja, vagyis ha  $((\mathbf{a}, \mathbf{b})) = ((\mathbf{Oa}, \mathbf{Ob}))$ . Egy ezzel egyenértékű feltétel is kimondható egyetlen tetszőleges vektor segítségével. Az  $\mathbf{O}$  mátrix komplex ortogonális, ha egy tetszőleges vektor hossza a transzformáció során változatlan marad.

Tekintsünk két tetszőleges  $\mathbf{a}$  és  $\mathbf{b}$  vektort, és legyen  $\mathbf{v} = \mathbf{a} + \mathbf{b}$ . Ekkor  $\mathbf{O}$  komplex ortogonális voltára új feltételünk a következő:

$$((\mathbf{v}, \mathbf{v})) = ((\mathbf{Ov}, \mathbf{Ov})).$$

Felhasználva, hogy  $((\mathbf{a}, \mathbf{b})) = ((\mathbf{b}, \mathbf{a}))$ , ez így írható:  $((\mathbf{a} + \mathbf{b}, \mathbf{a} + \mathbf{b})) = ((\mathbf{a}, \mathbf{a})) + ((\mathbf{b}, \mathbf{b})) + 2((\mathbf{a}, \mathbf{b})) = ((\mathbf{Oa}, \mathbf{Oa})) + ((\mathbf{Ob}, \mathbf{Ob})) + 2((\mathbf{Oa}, \mathbf{Ob}))$ . Feltételünk szerint azonban  $((\mathbf{a}, \mathbf{a})) = ((\mathbf{Oa}, \mathbf{Oa}))$  és  $((\mathbf{b}, \mathbf{b})) = ((\mathbf{Ob}, \mathbf{Ob}))$ . Így tehát

$$((\mathbf{a}, \mathbf{b})) = ((\mathbf{Oa}, \mathbf{Ob})).$$

Ebből következik, hogy  $\mathbf{O}$  komplex ortogonális. Hasonló módon mutatható meg az, hogy  $\mathbf{U}$  unitér, ha  $(\mathbf{v}, \mathbf{v}) = (\mathbf{U}\mathbf{v}, \mathbf{U}\mathbf{v})$  minden vektorra érvényes.

Az olyan mátrix, amely minden valós vektort valós vektorba visz át, és minden valós vektor hosszát változatlanul hagyja, *forogás*. E tétel geometriai alapja az az egyszerű tény, hogy ha a kiinduló és transzformált alakzatban minden távolság ugyanaz, akkor a transzformáció csupán forogás lehet.

c) Határozzuk most meg a kétdimenziós egységnyi determinánsú

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

unitér mátrix általános alakját. Tekintsük e célból az  $\mathbf{u}\mathbf{u}^\dagger = \mathbf{1}$  szorzat elemeit.  $a^*c + b^*d = 0$ -ból következik, hogy  $c = -b^*d/a^*$ , ezt az  $ad - bc = 1$  egyenlőségbe helyettesítve kapjuk, hogy  $(aa^* + bb^*)d/a^* = 1$ . Továbbá  $aa^* + bb^* = 1$  fennállásából következik  $d = a^*$  és  $c = b^*$ . Így az általános kétdimenziós egységnyi determinánsú unitér mátrix alakja:

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \quad (15.9)$$

és még  $|a|^2 + |b|^2 = 1$ .

4. Tekintsük most a „Pauli-mátrixokat”:

$$\mathbf{s}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{s}_y = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{s}_z = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (15.10)$$

Minden zérus átlósszögű kétdimenziós  $\mathbf{h}$  mátrix úgy értelmezhető, mint e mátrixok lineáris kombinációja:  $\mathbf{h} = x\mathbf{s}_x + y\mathbf{s}_y + z\mathbf{s}_z = [\mathbf{r}, \mathbf{S}]$ ; vagy részletesen

$$\mathbf{h} = [\mathbf{r}, \mathbf{S}] = \begin{pmatrix} -z & x + iy \\ x - iy & +z \end{pmatrix}. \quad (15.10a)$$

Itt  $2x = h_{12} + h_{21}$ ;  $2iy = h_{12} - h_{21}$  és  $z = -h_{11} = +h_{22}$ . Ha  $x$ ,  $y$  és  $z$  valósak, akkor  $\mathbf{h}$  hermitikus.

Transzformáljuk most  $\mathbf{h}$ -t tetszőleges egységnyi determinánsú unitér mátrixszal; az így kapott  $\mathbf{h} = \mathbf{u}\mathbf{h}\mathbf{u}^\dagger$  mátrix átlója zérus, így  $\mathbf{h}$  ismét  $\mathbf{s}_x$ ,  $\mathbf{s}_y$  és  $\mathbf{s}_z$  lineáris kombinációja.

$$\bar{\mathbf{h}} = \mathbf{u}\mathbf{h}\mathbf{u}^\dagger = \mathbf{u}[\mathbf{r}, \mathbf{S}]\mathbf{u}^\dagger = x'\mathbf{s}_x + y'\mathbf{s}_y + z'\mathbf{s}_z, \quad (15.11)$$

$$\begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -z & x + iy \\ x - iy & z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^* & -b^* \\ b^* & a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -z' & x' + iy' \\ x' - iy' & z' \end{pmatrix} \quad (15.11a)$$

Ez az egyenlet megadja  $(x', y', z')$ -t mint  $x, y, z$  lineáris függvényét. (15.11a) segítségével felkutatható az az  $\mathbf{R}_u$  transzformáció, amely  $\mathbf{r}=(x, y, z)$ -t átviszi az  $\mathbf{R}_u\mathbf{r}=\mathbf{r}'=(x', y', z')$ -be:

$$\begin{aligned}x' &= \frac{1}{2}(a^2 + a^{*2} - b^2 - b^{*2})x + \frac{1}{2}i(a^2 - a^{*2} + b^2 - b^{*2})y + (a^*b^* + ab)z, \\y' &= \frac{1}{2}i(a^{*2} - a^2 + b^2 - b^{*2})x + \frac{1}{2}(a^2 + a^{*2} + b^2 + b^{*2})y + i(a^*b^* - ab)z, \\z' &= -(a^*b + ab^*)x + i(a^*b - ab^*)y + (aa^* - bb^*)z.\end{aligned}\quad (15.12)$$

Az  $\mathbf{R}_u$  mátrix tényleges alakja e kifejezésben nem érdekes.<sup>4</sup> Az lényeges, hogy

$$x'^2 + y'^2 + z'^2 = x^2 + y^2 + z^2, \quad (15.13)$$

és ez annak a következménye, hogy  $\mathbf{h}$  és  $\bar{\mathbf{h}}$  determinánsa megegyezik. (b) szerint tehát az  $\mathbf{R}_u$  transzformációnak komplex ortogonálisnak kell lennie; ez a (15.12) képletből közvetlenül is belátható.

$\bar{\mathbf{h}}$  hermitikus, ha  $\mathbf{h}$  is az; más szóval  $\mathbf{r}'=(x', y', z')$  valós, ha  $\mathbf{r}=(x, y, z)$  is valós. Ebből következik (a) szerint, hogy  $\mathbf{R}_u$  tisztán valós, amint az (15.12)-ből közvetlenül is belátható. Ily módon  $\mathbf{R}_u$  forgatás: minden kétdimenziós unitér egységnyi determinánsú mátrix valamilyen háromdimenziós  $\mathbf{R}_u$  forgatásnak felel meg; a megfeleltetést (15.11), illetőleg (15.12) adja meg.

$\mathbf{R}_u$  determinánsa  $+1$ , mert amint  $\mathbf{u}$  folytonosan átmegy az egységmátrixba  $\mathbf{R}_u$  folytonosan a háromdimenziós egységmátrixba megy át. Ha e folyamat elején a determináns  $-1$  lenne, akkor át kellene ugrania a  $+1$  értékre, ez azonban lehetetlen, tehát  $\mathbf{R}_u$  tiszta forgatás minden  $\mathbf{u}$ -ra.

*A megfeleltetés olyan, hogy két unitér  $\mathbf{q}$  és  $\mathbf{u}$  mátrix  $\mathbf{q}\mathbf{u}$  szorzatának a megfelelő forgatások  $\mathbf{R}_{\mathbf{q}\mathbf{u}}=\mathbf{R}_{\mathbf{q}}\cdot\mathbf{R}_u$  szorzata felel meg. Ha (15.11)-et  $\mathbf{u}$  helyett  $\mathbf{q}$ -ra alkalmazzuk, akkor*

$$\mathbf{q}[\mathbf{r}, \mathbf{S}]\mathbf{q}^\dagger = [\mathbf{R}_{\mathbf{q}}\mathbf{r}, \mathbf{S}], \quad (15.12a)$$

ezt pedig  $\mathbf{u}$ -val transzformálva

$$\mathbf{u}\mathbf{q}[\mathbf{r}\mathbf{S}]\mathbf{q}^\dagger\mathbf{u}^\dagger = \mathbf{u}[\mathbf{R}_{\mathbf{q}}\mathbf{r}, \mathbf{S}]\mathbf{u}^\dagger = [\mathbf{R}_u\mathbf{R}_{\mathbf{q}}\mathbf{r}, \mathbf{S}] = [\mathbf{R}_{\mathbf{u}\mathbf{q}}\mathbf{r}, \mathbf{S}].$$

Itt ismét (15.11)-et használtuk fel úgy, hogy  $\mathbf{r}$  helyett  $\mathbf{R}_{\mathbf{q}}\mathbf{r}$ -et és  $\mathbf{u}$  helyett  $\mathbf{u}\mathbf{q}$ -t írtunk. Így tehát a kétdimenziós unitér  $+1$  determinánsú mátrixok („unitér csoport”) és a háromdimenziós forgatások csoportja között homomorfizmus van; a megfeleltetést (15.11) és (15.12) adja meg. Megjegyezzük azonban, hogy ezidáig nem mutattuk meg, hogy az egész forgáscsoport és a kétdimenziós unitér csoport között létezik homomorfizmus. Ez azt jelentené, hogy  $\mathbf{R}_u$  az összes forgatást befutja, mi-

<sup>4</sup> A (15.12)-ben szereplő és a forgatást jellemző komplex  $a$  és  $b$  paramétereket ( $|a|^2 + |b|^2 = 1$ ) Cayley—Klein-paramétereknek szokás nevezni. Rövidség kedvéért a kétdimenziós egységnyi determinánsú unitér mátrixok csoportját gyakran unitér csoportnak fogjuk nevezni.

közben  $\mathbf{u}$  a teljes unitér csoporton fut át. Ezt rövidesen bebizonyítjuk. Azt is meg kell jegyeznünk, hogy  $e$  homomorfizmus nem izomorfizmus, mivel ugyanannak a forgatásnak egynél több unitér mátrix felel meg. Ezt is részletesen belátjuk majd a továbbiakban.

Először feltételezzük, hogy  $\mathbf{u}$  a diagonális  $\mathbf{u}_1(\alpha)$  mátrix (vagyis legyen  $b=0$  és később világossá váló okok miatt legyen  $a=e^{-\frac{1}{2}i\alpha}$ ). Így  $|a|^2=1$  és  $\alpha$  valós.

$$\mathbf{u}_1(\alpha) = \begin{pmatrix} e^{-\frac{1}{2}i\alpha} & 0 \\ 0 & e^{\frac{1}{2}i\alpha} \end{pmatrix}. \quad (15.14a)$$

(15.12)-ből látható, hogy a megfelelő forgatás

$$\mathbf{R}_{\mathbf{u}_1} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (15.14a')$$

ez  $\alpha$  szögű forgatás a  $Z$  tengely körül. Tegyük fel ezután, hogy  $\mathbf{u}$  valós:

$$\mathbf{u}_2(\beta) = \begin{pmatrix} \cos \frac{1}{2} \beta & -\sin \frac{1}{2} \beta \\ +\sin \frac{1}{2} \beta & \cos \frac{1}{2} \beta \end{pmatrix}. \quad (15.14b)$$

(15.12) szerint

$$\mathbf{R}_{\mathbf{u}_2} = \begin{pmatrix} \cos \beta & 0 & -\sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ +\sin \beta & 0 & \cos \beta \end{pmatrix}, \quad (15.14b')$$

amely  $\beta$  szögű forgatás az  $Y$  tengely körül. A három unitér mátrix  $\mathbf{u}_1(\alpha)\mathbf{u}_2(\beta)\mathbf{u}_1(\gamma)$  szorzatának a  $Z$  tengely körül  $\gamma$ , az  $Y$  tengely körül  $\beta$  és a  $Z$  tengely körül  $\alpha$  szögű forgatások szorzata, vagyis az  $\alpha, \beta, \gamma$  Euler-szögekhez tartozó forgatás felel meg. Ebből következik, hogy a (15.11)-ben definiált megfeleltetés nemcsak egy háromdimenziós forgatást rendel minden kétdimenziós unitér mátrixhoz, hanem legalább egy unitér mátrixot is minden valódi forgatáshoz. Nevezetesen a

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} e^{-\frac{1}{2}i\alpha} & 0 \\ 0 & e^{\frac{1}{2}i\alpha} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{1}{2} \beta & -\sin \frac{1}{2} \beta \\ \sin \frac{1}{2} \beta & \cos \frac{1}{2} \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-\frac{1}{2}i\gamma} & 0 \\ 0 & e^{\frac{1}{2}i\gamma} \end{pmatrix} = \\ & = \begin{pmatrix} e^{-\frac{1}{2}i\alpha} \cos \frac{1}{2} \beta \cdot e^{-\frac{1}{2}i\gamma} & -e^{-\frac{1}{2}i\alpha} \sin \frac{1}{2} \beta \cdot e^{\frac{1}{2}i\gamma} \\ e^{\frac{1}{2}i\alpha} \sin \frac{1}{2} \beta \cdot e^{-\frac{1}{2}i\gamma} & e^{\frac{1}{2}i\alpha} \cos \frac{1}{2} \beta \cdot e^{\frac{1}{2}i\gamma} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (15.15)$$

mátrix megfelel az  $\{\alpha, \beta, \gamma\}$  forgatásnak. Így  $e$  homomorfizmus valóban az unitér csoport homomorfizmusa a teljes háromdimenziós forgáscsoportra.

Hátramaradt még a homomorfizmus multiplicitásának kérdése, vagyis az, hogy hány uniter  $\mathbf{u}$  mátrix felel meg ugyanannak a forgatásnak. Elég azt megnézni, hogy hány uniter  $\mathbf{u}_0$  mátrix felel meg a forgáscsoport egységelemének, vagyis az  $x' = x, y' = y, z' = z$  transzformációnak. Ezekre az  $\mathbf{u}_0$  mátrixokra az  $\mathbf{u}_0 \mathbf{h} \mathbf{u}_0^\dagger = \mathbf{h}$  azonoságnak minden  $\mathbf{h}$ -ra igaznak kell lennie; ez pedig csak akkor következik be, ha  $\mathbf{u}_0$  az állandó mátrix ( $b=0$  és  $\alpha = \alpha^*$  valós)  $\mathbf{u}_0 = (\pm \mathbf{1})$  (mivel  $|a|^2 + |b|^2 = 1$ ). Így a forgáscsoport egységelemének a  $(+\mathbf{1})$  és  $(-\mathbf{1})$  uniter mátrixok és csak ezek felelnek meg. E két elem az uniter csoport invariáns alcsoportját alkotja, tehát azok (és csak azok) az elemek, amelyek az invariáns alcsoport ugyanazon mellékosztályában vannak, vagyis  $\mathbf{u}$  és  $-\mathbf{u}$  felelnek meg ugyanannak a forgatásnak. Hogy  $\mathbf{u}$  és  $-\mathbf{u}$  ugyanolyan forgatásnak felelnek meg, az közvetlenül belátható akár (15.11), akár (15.12) segítségével.

Másként megfogalmazva egyszerűen kijelenthetjük, hogy (15.15) trigonometriai függvényeiben csak a fél Euler-szögek fordulnak elő. Az Euler-szögeket a forgatás csak  $2\pi$ , tehát a félszögeket  $\pi$  valamely többszörösének erejéig határozza meg. Így tehát (15.15)-ben a trigonometrikus függvények csak előjeltől eltekintve vannak rögzítve.

Ilyen módon nagyon fontos eredményt kaptunk: a kétdimenziós egységnyi determinánsú uniter mátrixok csoportjának kettő-egyértelmű homomorfizmusa létezik a háromdimenziós valódi forgáscsoportra vonatkozóan egy-egyértelmű megfeleltetés van minden  $\mathbf{u}$ ,  $-\mathbf{u}$  mátrixpár és az  $\mathbf{R}_\mathbf{u}$  forgatás között oly módon, hogy  $\mathbf{u}\mathbf{q} = \mathbf{t}$ -ből következik, hogy  $\mathbf{R}_\mathbf{u}\mathbf{R}_\mathbf{q} = \mathbf{R}_\mathbf{t}$  és fordítva  $\mathbf{R}_\mathbf{u}\mathbf{R}_\mathbf{q} = \mathbf{R}_\mathbf{t}$ -ből, hogy  $\mathbf{u}\mathbf{q} = \pm \mathbf{t}$ . Az  $\mathbf{u}$  uniter mátrix ismeretében a megfelelő  $\mathbf{R}_\mathbf{u}$  forgatás legkönnyebben (15.12)-ből; és fordítva, az  $\{\alpha, \beta, \gamma\}$  forgatásból az uniter mátrix legkönnyebben (15.15)-ből kapható meg.

## AZ UNITÉR CSOPORT ÁBRÁZOLÁSAI

5. Az imént levezetett homomorfizmus szoros kapcsolatot teremt a két csoport ábrázolásai között. A kisebbik csoport — esetünkben a forgáscsoport — minden  $\mathbf{D}(\mathbf{R})$  ábrázolásából megalkotható az uniter csoport egy  $\mathbf{U}(\mathbf{u})$  ábrázolása, amint azt már a 9. fejezetben általában kifejtettük. Ez úgy történik, hogy az  $\mathbf{U}(\mathbf{u}) = \mathbf{D}(\mathbf{R}_\mathbf{u})$  mátrixot használjuk a második csoport minden olyan ( $\mathbf{u}$  és  $-\mathbf{u}$ ) elemének ábrázolására, mely a homomorfizmus során az első csoport ugyanazon  $\mathbf{R}_\mathbf{u}$  elemének felel meg. Nevezetesen a  $\mathbf{D}(\mathbf{E})$  egységmátrix a  $+\mathbf{1}$  és  $-\mathbf{1}$  két uniter mátrixnak felel meg. Fordítva, ha az uniter csoport minden ábrázolása ismeretes, akkor kiválaszthatjuk azokat, amelyekben ugyanaz a  $\mathbf{U}(\mathbf{u}) = \mathbf{U}(-\mathbf{u})$  mátrix ábrázolja az  $\mathbf{u}$  és  $-\mathbf{u}$  mátrixot. Minden ilyen ábrázolás segítségével lehetővé válik, hogy a forgáscsoport egy ábrázolását megalkossuk úgy, hogy az  $\mathbf{R}_\mathbf{u}$  forgásnak a  $\mathbf{D}(\mathbf{R}_\mathbf{u}) = \mathbf{U}(\mathbf{u}) = \mathbf{U}(-\mathbf{u})$



mátrixot feleltetjük meg. Ilyen módon a forgáscsoport minden ábrázolását megkaphatjuk.

Legyen az unitér csoport  $\mathbf{U}(\mathbf{u})$  ábrázolása irreducibilis. Az  $\mathbf{u} = -\mathbf{1}$  elem felcserélhető a csoport valamennyi elemével; ezért az  $\mathbf{U}(-\mathbf{1})$  mátrixnak felcserélhetőnek kell lennie minden  $\mathbf{U}(\mathbf{u})$ -val. Az irreducibilis ábrázolások általános elmélete szerint tehát állandómátrixnak kell lennie. Mivel  $(-\mathbf{1})^2$ , e csoportelem négyzetét az egységmátrix ábrázolja.<sup>5</sup> Így tehát vagy

$$\mathbf{U}(-\mathbf{1}) = +\mathbf{U}(\mathbf{1}), \quad \text{vagy pedig} \quad \mathbf{U}(-\mathbf{1}) = -\mathbf{U}(\mathbf{1}).$$

Az olyan ábrázolást, amelyben  $\mathbf{U}(-\mathbf{1}) = +\mathbf{U}(\mathbf{1})$ , páros ábrázolásnak nevezzük. Páros ábrázolásban  $\mathbf{U}(-\mathbf{u}) = \mathbf{U}(-\mathbf{1})\mathbf{U}(\mathbf{u}) = \mathbf{U}(\mathbf{1})\mathbf{U}(\mathbf{u}) = \mathbf{U}(\mathbf{u})$ , vagyis ugyanaz a mátrix felel meg az  $\mathbf{u}$  és a  $-\mathbf{u}$  elemnek. A páros ábrázolások tehát a forgáscsoport reguláris ábrázolásai, ezek az 1. szakaszból már valamennyien ismeretesek.

Az olyan ábrázolást, amelyben  $\mathbf{U}(-\mathbf{1}) = -\mathbf{U}(\mathbf{1})$ , páratlan ábrázolásnak nevezzük. Páratlan ábrázolásban  $\mathbf{U}(-\mathbf{u}) = \mathbf{U}(-\mathbf{1})\mathbf{U}(\mathbf{u}) = -\mathbf{U}(\mathbf{u})$ ; ellenkező előjelű mátrixok felelnek meg előjelben különböző elemeknek. Az unitér csoport páratlan ábrázolásai nem a forgáscsoport reguláris, hanem csupán a „kétértékű” vagy másnéven „fél-egész” ábrázolásait szolgáltatják; ezekben két mátrix,  $\mathbf{U}(\mathbf{u})$  és  $\mathbf{U}(-\mathbf{u}) = -\mathbf{U}(\mathbf{u})$  felel meg minden egyes  $\mathbf{R}_\mathbf{u} = \mathbf{R}_{-\mathbf{u}}$  forgatásnak; az egyik mátrix elemei előjelben különböznek a másik elemeitől.

Az unitér csoport egyik páratlan ábrázolását maga a csoport alkotja:  $\mathbf{U}(\mathbf{u}) = \mathbf{u}$ .

A forgáscsoport megfelelő  $\mathbf{D}^{(\pm)}$  „kétértékű” ábrázolásában az  $\{\alpha, \beta, \gamma\}$  a homomorfizmusban az  $R$ -nek megfelelő  $\mathbf{u} = \mathbf{U}(\mathbf{u})$  mátrixnak felel meg. Ilyen módon (15.15) szerint

$$\mathbf{D}^{(\pm)}(\{\alpha, \beta, \gamma\}) = \pm \begin{pmatrix} e^{-\frac{1}{2}i\alpha} \cos \frac{1}{2}\beta \cdot e^{-\frac{1}{2}i\gamma} & -e^{-\frac{1}{2}i\alpha} \sin \frac{1}{2}\beta \cdot e^{\frac{1}{2}i\gamma} \\ e^{\frac{1}{2}i\alpha} \sin \frac{1}{2}\beta \cdot e^{-\frac{1}{2}i\gamma} & e^{\frac{1}{2}i\alpha} \cos \frac{1}{2}\beta \cdot e^{\frac{1}{2}i\gamma} \end{pmatrix}. \quad (15.16)$$

Az első, illetőleg a második sort vagy oszlopot  $-\frac{1}{2}$ , illetőleg  $+\frac{1}{2}$  sornak vagy oszlopnak szokás nevezni. (15.16) alatt felírtuk a forgáscsoport első kétértékű ábrázolását.

Kétértékű ábrázolásra  $\mathbf{D}(R) \cdot \mathbf{D}(S) = \mathbf{D}(RS)$  nem feltétlenül igaz; csupán az biztos, hogy  $\mathbf{D}(R) \cdot \mathbf{D}(S) = \pm \mathbf{D}(RS)$ , mivel az ábrázolási mátrixok csupán előjeltől eltekintve meghatározottak. Nem lehetséges továbbá lerögzíteni minden mátrix előjelét úgy, hogy az egyértékű ábrázolások szigorú törvénye érvényesüljön. Ilyen

<sup>5</sup> A csoport egységelemének megfelelő  $\mathbf{U}(\mathbf{1})$  mátrix az egységmátrix; dimenziója az ábrázolás dimenziója. Azért használjuk az  $\mathbf{U}(\mathbf{1})$  szimbólumot az egyszerűbb  $\mathbf{1}$  szimbólum helyett, mert ez utóbbival az unitér csoport egységelemét jelöljük, ez pedig mindig kétdimenziós.

módon a kétértékű ábrázolás szerkezete nem olyan, mintha egyértékű ábrázolásban az előjeleket egyszerűen határozatlanul hagynánk. Ez például (15.16)-ból is látható: a  $\pi$  szögű forgatásnak a  $Z$  tengely körül a  $\pm i s_z$  mátrix felel meg; e mátrix négyzete  $-1 = -s_z^2$ , tehát a  $2\pi$  szögű forgatás megfelelője. Az ilyen forgatás tulajdonképpen egyáltalán nem forgatás, hiszen mindent változatlanul hagy; ez tehát a csoport egységeleme. Így kell, hogy a megfelelője legyen az egységmátrix is; nem lehet tehát az ábrázolást egyértékűvé tenni (15.16)-ban az előjelek megválasztásával.

6. Most határozzuk meg a kétdimenziós unitér csoport irreducibilis ábrázolásait. Tekintsük  $\varepsilon$ -nak és  $\zeta$ -nak  $n$ -ed fokú homogén polinomját. Ha végrehajtjuk a változók

$$\begin{aligned} \varepsilon' &= a\varepsilon + b\zeta \\ \zeta' &= b^*\varepsilon + a^*\zeta \end{aligned} \quad (15.17)$$

unitér transzformációját, ismét  $n$ -edfokú homogén polinomot kapunk. (Bár ez tetszőleges lineáris transzformációra igaz, most unitér transzformációkra korlátozódunk.) Ezért a következő  $n+1$  polinom:  $\varepsilon^n, \varepsilon^{n-1}\zeta, \varepsilon^{n-2}\zeta^2, \dots, \varepsilon\zeta^{n-1}, \zeta^n$  az unitér csoport egy  $n+1$ -dimenziós ábrázolásához tartozik. Legyen  $n=2j$ , így azonnal a forgáscsoportnál szokásos jelölést kapjuk meg; az ábrázolás dimenziója ekkor  $2j+1$ ;  $j$  vagy egész vagy félegész.<sup>6</sup> Tekintsük az

$$f_\mu(\varepsilon, \zeta) = \frac{\varepsilon^{j+\mu}\zeta^{j-\mu}}{\sqrt{(j+\mu)!(j-\mu)!}} \quad (15.18)$$

polinomot, itt  $\mu$ -nek  $2j+1$  értéke lehetséges:  $-j, -j+1, -j+2, \dots, j-2, j-1, j$ ; ezek egészek egész  $j$ -re és félegészek félegész  $j$ -re. A  $[(j+\mu)!(j-\mu)!]^{-\frac{1}{2}}$  állandó tényezőt azért csatoltuk  $\varepsilon^{j+\mu}\zeta^{j-\mu}$ -höz, mert látni fogjuk, hogy így a  $2j+1$  számú (15.18) függvényre az  $\mathbf{U}^{(j)}$  ábrázolás unitér ábrázolás lesz.

Megalkotjuk most<sup>7</sup> a (11.19) egyenlet alapján  $\mathbf{P}_u f_\mu(\varepsilon, \zeta)$ -t.

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_u f_\mu(\varepsilon, \zeta) &= f_\mu(a^*\varepsilon - b\zeta, b^*\varepsilon + a\zeta) = \\ &= \frac{(a^*\varepsilon - b\zeta)^{j+\mu} (b^*\varepsilon + a\zeta)^{j-\mu}}{\sqrt{(j+\mu)!(j-\mu)!}}. \end{aligned} \quad (15.19)$$

<sup>6</sup> Ez azt jelenti, hogy  $1/2$ -del különbözik egy egész számtól.

<sup>7</sup>  $\mathbf{u}$  itt a (15.17) unitér transzformáció. A 11. fejezetben  $\mathbf{PR}$ -et csak valós ortogonális  $\mathbf{R}$ -re definiáltuk. Ebben az esetben, amikor  $\mathbf{u}$  unitér, (11.18)-ból következik, hogy

$$x_i = \sum_j R_{ji}^* x_j \quad \text{lép (11.18b) és } R_{ji}^* R_{ji} \text{ helyébe}$$

A binomiális tétel felhasználásával kifejtjük a jobb oldalt, hogy kifejezhessük azt az  $f_{\mu} - k$  lineáris kombinációjaként. A következőt kapjuk:

$$\sum_{\kappa=0}^{j+\mu} \sum_{\kappa'=0}^{j-\mu} (-1)^{\kappa} \frac{\sqrt{(i+\mu)!(i-\mu)!}}{\kappa!\kappa'!(j+\mu-\kappa)!(i-\mu-\kappa)!} \times \\ \times a^{\kappa} a^{*j+\mu-\kappa} b^{\kappa} b^{*i-\mu-\kappa} \varepsilon^{2j-\kappa-\kappa'} \zeta^{\kappa+\kappa'}. \quad (15.19a)$$

Itt az összegezés határait elhagyhatjuk és az összegezést az összes egész számmra kiterjeszthetjük, mivel a binomiális együtthatók eltűnnek, ha  $\kappa$  vagy  $\kappa'$  az összegezés tartományán kívül esik. Legyen  $j-\kappa-\kappa'=\mu'$ , ekkor  $\mu'$ -nek egész  $j$  esetén az összes egészen, félegész  $j$  esetén az összes félegészen kell átfutnia. (15.19a)-ban  $\varepsilon$ -nak és  $\zeta$ -nak minden függvényét (15.18) alapján  $f_{\mu}$ -vel kifejezve kapjuk, hogy

$$\mathbf{P}_u f_{\mu}(\varepsilon \zeta) = \sum_{\mu'} \sum_{\kappa} (-1)^{\kappa} \frac{\sqrt{(j+\mu)!(j-\mu)!(i+\mu')!(j-\mu')!}}{\kappa!(j-\mu-\kappa)!(j+\mu-\kappa)!(\kappa+\mu'-\mu)!} \times \\ \times a^{j-\mu'-\kappa} a^{*j+\mu-\kappa} b^{\kappa} b^{*\kappa+\mu'-\mu} f_{\mu'}(\varepsilon \zeta). \quad (15.20)$$

$\mathbf{U}^{(j)}(\mathbf{u})_{\mu'\mu}$  nem egyéb, mint  $f_{\mu'}$  együtthatója a jobb oldalon:

$$\mathbf{U}^{(j)}(\mathbf{u})_{\mu\mu} = \sum_{\kappa} (-1)^{\kappa} \frac{\sqrt{(j+\mu)!(j-\mu)!(j+\mu')!(j-\mu')!}}{\kappa!(j-\mu'-\kappa)!(j+\mu-\kappa)!(\kappa+\mu'-\mu)!} \quad (15.21)$$

E kifejezések egyszerűbbek, ha  $\mu'=j$ , vagyis, ha az ábrázolási mátrixok utolsó sorairól van szó, mivel ekkor a faktoriális miatt csak a  $\kappa=0$  tag marad meg:

$$\mathbf{U}^{(j)}(\mathbf{u})_{j\mu} = \sqrt{\frac{(2j)!}{(j+\mu)!(j-\mu)!}} a^{*j+\mu} b^{*j-\mu}. \quad (15.21a)$$

Megkaptuk most az  $\mathbf{U}^{(j)}$  ábrázolásokban a mátrixelemeket  $j$  minden lehetséges értékére:  $j=0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$ . Hátravan még annak bizonyítása, hogy a (15.21) ábrázolások unitérek és irreducibilisek, továbbá hogy a kétdimenziós unitér csoportnak a fentiekén kívül nincs más ábrázolása.

7. Először azt bizonyítjuk be, hogy a (15.21) ábrázolás unitér. A bizonyítás azon alapul, hogy az  $f_{\mu}$  polinomokat (15.18)-ban úgy választottuk, hogy

$$\sum_{\mu=-j}^j f_{\mu} f_{\mu}^{*} = \sum_{\mu} \frac{1}{(j+\mu)!(j-\mu)!} |e^{2j+\mu}| \zeta^{2j-\mu} = \frac{(|e^{2j}| + |\zeta^{2j}|)^{2j}}{(2j)!} \quad (15.22)$$

teljesüljön. Hasonlóképpen  $\mathbf{P}_u f_{\mu}$ -nek (15.19) definíciója miatt

$$\sum_{\mu} |\mathbf{P}_u f_{\mu}(\varepsilon \zeta)| = \sum_{\mu} \frac{|a^{*\varepsilon} - b \zeta|^{2(j+\mu)} \cdot |b^{*\varepsilon} + a \zeta|^{2(j-\mu)}}{(j+\mu)!(j-\mu)!} = \\ = \frac{1}{(2j)!} (|a^{*\varepsilon} - b \zeta|^2 + |b^{*\varepsilon} + a \zeta|^2)^{2j} = \frac{1}{(2j)!} (|\varepsilon|^2 + |\zeta|^2)^{2j}. \quad (15.22a)$$

Az utolsó lépés vagy közvetlen számolásból, vagy  $\mathbf{u}$  unitér jellegéből következik. (15.22)-vel összehasonlítva látható, hogy a  $\sum_{\mu} f_{\mu} f_{\mu}^*$  összeg invariáns a  $\mathbf{P}_{\mathbf{u}}$  operációval szemben, tehát

$$\sum_{\mu} |\mathbf{P}_{\mathbf{u}} f_{\mu}|^2 = \sum_{\mu} |f_{\mu}|^2. \quad (15.23)$$

Ez biztosítja majd a  $\mathbf{U}^{(j)}$  ábrázolások unitér jellegét. Valóban, ha eme ábrázolással helyettesítjük  $\mathbf{P}_{\mathbf{u}} f_{\mu}$ -nek  $f_{\mu}$ -vel megadott kifejezését, akkor

$$\sum_{\mu} \sum_{\mu'} U_{\mu'\mu}^{(j)} f_{\mu'} \sum_{\mu''} U_{\mu\mu''}^{(j)*} f_{\mu''} = \sum_{\mu} f_{\mu} f_{\mu}^*. \quad (15.23a)$$

Ha a  $(2j+1)$  számú  $f_{\mu}, f_{\mu}^*$  függvények lineárisan függetlenek, akkor (15.23)-ból és (15.23a)-ból közvetlenül adódik, hogy

$$\sum_{\mu} U_{\mu'\mu}^{(j)} U_{\mu\mu''}^{(j)*} = \delta_{\mu'\mu''}, \quad (15.24)$$

amely annak feltétele, hogy  $\mathbf{U}^{(j)}$  unitér.

Mihelyt megmutatjuk, hogy nem létezik lineáris összefüggés az  $f_{\mu}, f_{\mu''}$ -k között, vagyis hogy a

$$\sum_{\mu'\mu''} c_{\mu'\mu''} \varepsilon^{j+\mu'} \zeta^{j-\mu'} \varepsilon^{*j+\mu''} \zeta^{*j-\mu''} = 0 \quad (15.E.2)$$

egyenletből szükségképpen következik  $c_{\mu'\mu''} = 0$  fennállása,  $\mathbf{U}^{(j)}$  unitér voltát bizonyítottuk. A (15.E.2) egyenletnek az  $\varepsilon$  és  $\zeta$  változók minden értékére fenn kell állnia, hiszen (15.23) és (15.23a) érvényes minden komplex  $\varepsilon$ -ra és  $\zeta$ -ra. Tegyük fel, hogy  $\varepsilon$  valós. Ekkor  $\lambda = 2j + \mu' + \mu''$  segítségével az a követelmény, hogy  $\varepsilon^{\lambda}$  együtt-hatója tűnjék el,  $\zeta^j \zeta^{*3j-\lambda}$ -val való osztás után így írható:

$$\sum_{\mu'} c_{\mu', \lambda-2j-\mu'} (\zeta^*/\zeta)^{\mu'} = 0.$$

Ez azonban azt jelenti, hogy  $c_{\mu', \lambda-2j-\mu'} = 0$ , mivel  $(\zeta^*/\zeta)$  a komplex egységközt szabadon futja be; tehát  $\exp(i\tau)$  alakba írható, ahol  $\tau$  tetszőleges valós értéket vehet fel. Ekkor azonban minden valós  $\tau$ -ra

$$\sum_{\mu'} c_{\mu', \lambda-2j-\mu'} e^{i\mu'\tau} = 0$$

csak úgy elégülhet ki, ha valamennyi  $c$  eltűnik; ebből pedig az  $f_{\mu}, f_{\mu}^*$  függvények lineáris függetlensége következik.

8. Az  $\mathbf{U}^{(j)}$  mátrixrendszer irreducibilitását ugyanúgy lehet megállapítani, mint ahogyan az 1. szakaszban a forgáscsoport  $\mathbf{D}^{(j)}$  ábrázolásainak irreducibilitását megállapítottuk; minden olyan  $\mathbf{M}$  mátrix, amely minden  $\mathbf{u}$ -ra (vagyis minden olyan  $a$ -ra és  $b$ -re, amely az  $|a|^2 + |b|^2 = 1$  feltételt kielégíti) felcserélhető  $\mathbf{U}^{(j)}(\mathbf{u})$ -val, szükségszerűen a konstansmátrix. Legyen először  $\mathbf{u}$  a (15.14a)-ban felírt  $\mathbf{u}_1(\alpha)$  ala-

kú; vagyis legyen  $b=0$ ,  $a=\exp(-\frac{1}{2}i\alpha)$ . Ekkor a (15.21) összegben csak a  $\kappa=0$  tag marad meg, s ez csak akkor nem zérus, ha  $\mu=\mu'$ . Kapjuk tehát, hogy

$$U^{(j)}(\mathbf{u}_1(\alpha))_{\mu'\mu} = \delta_{\mu'\mu} e^{i\mu\lambda} \quad (15.25)$$

Így  $\mathbf{U}^{(j)}$ -ben ama mátrixok, amelyek az  $\mathbf{u}_1(\alpha)$  unitér transzformációknak felelnek meg, ugyanolyan alakúak, mint (15.6),  $j$  azonban — eltérően (15.6)-ban  $l$ -től — mind félegész, mind pedig egész lehet. Ezekkel a mátrixokkal azonban csak diagonális mátrix cserélhető fel, így  $\mathbf{M}$ -nek diagonálisnak kell lennie. Vegyük észre továbbá, hogy (15.21a) következtében  $\mathbf{U}^{(j)}$  utolsó sorában egyik elem sem tűnik el azonosan. Így  $\mathbf{U}^{(j)}\mathbf{M}$  és  $\mathbf{M}\mathbf{U}^{(j)}$   $j$ -sorának elemeit egymással egyenlővé téve ugyanúgy, mint (15.E.1) esetében, arra jutunk, hogy

$$U_{jk}^{(j)} M_{kk} = M_{jj} U_{jk}^{(j)}; \quad M_{kk} = M_{jj},$$

vagyis  $\mathbf{M}$  állandó mátrix, ezért az  $\mathbf{U}^{(j)}$  ábrázolás irreducibilis.

9. Azt is megmutathatjuk, hogy az unitér csoportnak  $\mathbf{U}^{(j)}$ -n kívül nem létezik ábrázolása, mégpedig ugyanúgy, ahogy azt a 2. szakaszban a forgáscsoport ábrázolásaira tettük meg. Először meghatározzuk az „unitér csoport” osztályait. Mivel minden unitér mátrix unitér mátrixszal transzformálható, e transzformáció után minden mátrix  $\mathbf{u}_1(\alpha)$  alakú lesz, itt az  $\alpha$  paraméter 0-tól  $2\pi$ -ig változik ( $\mathbf{u}_1(-\alpha)$   $\mathbf{u}_1(\alpha)$ -val ekvivalens). Mindazon  $\mathbf{u}$ -k, amelyek ugyanarra az  $\mathbf{u}_1(\alpha)$ -ra transzformálhatók, ugyanabba az osztályba tartoznak. (Az a feltevés, hogy csak csoportelemek — csak egységnyi determinánsú unitér mátrixok — fordulnak elő, nem zavaró, mert minden unitér mátrix felírható egy állandómátrix és egy egységnyi determinánsú unitér mátrix szorzataként, és az állandómátrixszal történő transzformációt egyszerűen elhagyhatjuk.)

$\mathbf{U}^{(j)}$  karakterét meghatározandó, elégséges minden egyes osztályból egyetlen elem átlósösszegét kiszámolni. Vegyük  $\mathbf{u}_1(\alpha)$ -t mint  $\mathbf{u}_1(\alpha)$  osztályának elemét, ehhez (15.25) adja meg a megfelelő mátrixot. Ennek átlósösszege

$$\xi_j(\alpha) = \sum_{\mu=-j}^j e^{i\mu\alpha}, \quad (15.26)$$

ahol az összegezést az alsótól a felső határig egész lépésekkel kell végrehajtani.

Világos most már, hogy az unitér csoportnak más irreducibilis ábrázolása, mint  $\mathbf{U}^{(j)}$ ,  $j=0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$ , nem létezik. Az ilyen ábrázolás karakterének ugyanis megfelelő súlyfüggvénnyel szorozva valamennyi  $\xi(\alpha)$ -ra, tehát a  $\xi_0(\alpha)$ ,  $\xi_{\frac{1}{2}}(\alpha)$ ,  $\xi_1(\alpha) - \xi_0(\alpha)$ ,  $\xi_{\frac{3}{2}}(\alpha) - \xi_{\frac{1}{2}}(\alpha)$  függvényekre ortogonálisnak kell lennie. Az olyan függvénynek azonban a Fourier-tétel értelmében el kell tűnnie, amelyik a 0,  $2\pi$  intervallumban ortogonális az  $1, 2 \cos(\frac{1}{2}\alpha), 2 \cos \alpha, 2 \cos(\frac{3}{2}\alpha), \dots$  függvényekre.

## A HÁROMDIMENZIÓS VALÓDI FORGÁSCSOPORT ÁBRÁZOLÁSAI

10. Az unitér csoport minden  $\mathbf{U}^{(j)}$  ábrázolása egyben a forgáscsoportnak is egy- vagy kétértékű ábrázolása. Az  $\mathbf{U}^{(j)}(\mathbf{u})$  mátrix felel meg az  $\{\alpha, \beta, \gamma\}$  forgásnak, ha a homomorfizmus az  $\mathbf{u}$  unitér transzformációt viszi át az  $\{\alpha, \beta, \gamma\}$  forgatásba.  $\mathbf{u}$ -nak  $a$  és  $b$  együtthatóit (15.15) adja meg:

$$a = e^{-\frac{1}{2}i\alpha} \cos \frac{1}{2}\beta e^{-\frac{1}{2}i\gamma}, \quad b = -e^{-\frac{1}{2}i\alpha} \sin \frac{1}{2}\beta e^{\frac{1}{2}i\gamma}. \quad (15.15a)$$

Az  $\{\alpha, \beta, \gamma\}$ -nak megfelelő ábrázolások mátrixelemeit úgy kapjuk meg, hogy (15.15a)-t behelyettesítjük (15.21)-be. E helyettesítésből adódó ábrázolást azért transzformálhatjuk az  $M_{\kappa\lambda} = \delta_{\kappa\lambda} i^{-2\kappa}$  átlós mátrixszal, hogy a jelölésekben (15.16)-tal összhangba jussunk. Ez azt jelenti, hogy a  $\mu'$  sort  $i^{-2\mu'}$ -vel, a  $\mu$  sort  $i^{2\mu}$ -vel szorozzuk, így a  $\mu\mu'$  együttható szorzója  $i^{2(\mu-\mu')} = (-1)^{\mu-\mu'}$  lesz. Az  $\mathbf{U}^{(j)}$ -ből így kapott ábrázolást  $\mathbf{D}^{(j)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})$ -val jelöljük; ennek együtthatói:

$$\begin{aligned} \mathbf{D}^{(j)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu'\mu} &= \sum_{\kappa} (-1)^{\kappa} \frac{\sqrt{(j+\mu)!(j-\mu)!(j+\mu')!(j-\mu')!}}{(j-\mu'-\kappa)!(j+\mu-\kappa)!\kappa!(\kappa+\mu'-\mu)!} \times \\ &\times e^{i\mu'\alpha} \cos^{2j+\mu-\mu'-2\kappa} \frac{1}{2}\beta \sin^{2\kappa+\mu'-\mu} \frac{1}{2}\beta e^{i\mu\gamma}. \end{aligned} \quad (15.27)$$

A  $\mathbf{D}^{(j)}$  ábrázolás  $(2j+1)$ -dimenziós,  $j$  vagy egész, vagy félegész.  $\mathbf{D}^{(j)}$  oszlopait és sorait a  $-j, -j+1, \dots, j-1, j$  egész vagy félegész számok jelölik. (15.27)-ben az összegezés  $\kappa$  minden egész értékén végigfuthat (a nevező faktoriálisai végtelenné válnak, ha  $\kappa$  nem esik abba a tartományba, amelyet 0 és  $\mu-\mu'$  közül a nagyobbik, illetőleg  $j-\mu'$  és  $j+\mu$  közül a kisebbik szám határol.) A  $\mu=j$  és  $\mu'=j$  esetre vonatkozó képlet különösen egyszerű: az elsőben csak a  $\kappa=0$ , a másodikban pedig csak a  $\kappa=j+\mu$  tag fordul elő:

$$\mathbf{D}^{(j)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{j\mu} = \sqrt{\binom{2j}{j-\mu}} e^{ij\alpha} \cos^{j+\mu} \frac{1}{2}\beta \sin^{j-\mu} \frac{1}{2}\beta e^{i\mu\gamma}, \quad (15.27a)$$

$$\mathbf{D}^{(j)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{j\mu} = (-1)^{j+\mu} \sqrt{\binom{2j}{j-\mu}} e^{-ij\alpha} \cos^{j-\mu} \frac{1}{2}\beta \sin^{j+\mu} \frac{1}{2}\beta e^{i\mu\gamma}. \quad (15.27b)$$

Z tengely körüli forgatásra szintén különösen egyszerű alakot ölt valamennyi ábrázolási együttható.  $\alpha$  szögű forgatásnak a Z tengely körül a homomorfizmusban az  $\mathbf{u}_1(\alpha)$  unitér transzformáció felel meg; a megfelelő ábrázolási mátrix együtthatóit (15.25) adja. Az  $\{\alpha, 0, 0\}$  forgatásnak megfelelő mátrix  $\mathbf{D}^{(j)}$ -ben tehát átlós mátrix, melynek diagonális elemei:  $\exp(-ij\alpha)$ ,  $\exp(-i(j-1)\alpha)$ ,  $\dots$ ,  $\exp(i(j-1)\alpha)$ ,

$\exp(-ij\alpha)$ . (15.27)-ből közvetlenül megkaphatjuk ezt az eredményt, ha  $\beta = \gamma = 0$  helyettesítünk. A  $\mathbf{D}^{(j)}(\{\alpha, 0, 0\})$  mátrixot már (15.6)-ban explicit formában megadtuk, e képlet most nemcsak egész  $l$ -re, hanem félegész  $j$ -re is érvényes. Ugyanez igaz (15.8)-ra is.

$\mathbf{D}^{(j)}$ -karaktere  $\chi^{(j)}(\varphi)$  a  $\varphi$  szögű forgatás átlós összege

$$\chi^{(j)}(\varphi) = \sum_{\mu=-j}^j e^{i\mu\varphi} = \begin{cases} 1 + 2 \cos \varphi + \dots + 2 \cos j\varphi & (j \text{ egész}) \\ 2 \cos \frac{1}{2} \varphi + 2 \cos \frac{3}{2} \varphi + \dots + 2 \cos j\varphi & (j \text{ félegész}) \end{cases} \quad (15.28)$$

Reguláris ábrázolásokban csak olyan  $j$ -k fordulnak elő, amelyekre  $\mathbf{U}^{(j)}(-\mathbf{1}) = \mathbf{U}^{(j)}(\mathbf{u}, 2\pi)$  a pozitív egységmátrix. (15.25)-ből látható, hogy ebben az esetben  $\mu$ , tehát  $j$  is egész. Ekkor  $\mathbf{D}^{(j)}$  azonos az 1. szakaszban levezetett  $\mathbf{D}^{(j)}$ -lel; ezt a karakterek egyenlősége is mutatja.

Félegész  $j$ -kre a  $\mathbf{D}^{(j)}$  ábrázolás kétértékű; az  $\{\alpha\beta\gamma\}$  forgatás  $\pm \mathbf{D}^{(j)}(\{\alpha\beta\gamma\})$ -nak felel meg. Ez nem jelenti azt, hogy  $\mathbf{D}^{(j)}$  elemeinek előjelét külön-külön megváltoztathatjuk. Csak az egész mátrix (vagyis egyszerre valamennyi elem) előjelét változtathatjuk meg. Az  $\mathbf{R}_u$  forgatás két uniter mátrix ( $\mathbf{u}$  és  $-\mathbf{u}$ ) megfelelője; ezek mind-egyikének egy egy mátrix ( $\mathbf{U}^{(j)}(\mathbf{u})$  és  $\mathbf{U}^{(j)}(-\mathbf{u})$ ) felel meg; félegész  $j$ -re az utóbbi  $-\mathbf{U}^{(j)}(\mathbf{u})$ -val egyenlő. E két mátrixnak és csak ezeknek megfelelője  $\mathbf{R}_u$  a  $\mathbf{D}^{(j)}$ -ben. Voltaképpen a kétértékű ábrázolások egyáltalában nem ábrázolások. PAULI spinelméletének taglalása során azonban ezekre szükségünk lesz.

A forgáscsoport ábrázolásainak elmélete J. SCHUR-tól származik. A kétértékű ábrázolásokat először H. WEYL állította elő.

11. Az első néhány ábrázolást explicit alakban most adjuk meg.  $\mathbf{D}^{(0)}(R) = 1$  és  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$ -et (15.16) adja. A következő ábrázolás  $\mathbf{D}^{(1)}(R)$ :

$$\mathbf{D}^{(1)}(\{\alpha, \beta, \gamma\}) = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} \frac{1 + \cos \beta}{2} e^{-i\gamma} & -e^{-i\alpha} \frac{\sin \beta}{\sqrt{2}} & e^{-i\alpha} \frac{1 - \cos \beta}{2} e^{i\gamma} \\ \frac{\sin \beta}{\sqrt{2}} e^{-i\gamma} & \cos \beta & -\frac{\sin \beta}{\sqrt{2}} e^{i\gamma} \\ e^{i\alpha} \frac{1 - \cos \beta}{2} e^{-i\gamma} & e^{i\alpha} \frac{\sin \beta}{\sqrt{2}} & e^{i\alpha} \frac{1 + \cos \beta}{2} e^{i\gamma} \end{pmatrix} \quad (15.29)$$

Ebben az egyenletben a félszögek trigonometriai függvényeit a teljes szögek függvényeivel fejeztük ki.

A forgáscsoport ábrázolásai közül legalábbis az egyértékűeket ismerik a fizikusok, mivel ezek éppen a vektorok, tenzorok stb. transzformációs szabályai. Ha új koordináta-rendszerre térünk át, akkor a vektor vagy tenzor új komponensei a régi koordináta-rendszer komponenseinek lineáris kombinációi lesznek. Ha a komponenseket a régi rendszerben  $T_\sigma$ -val jelöljük (itt  $\sigma$  akár több indexet is összefoglalhat), akkor az új koordináta-rendszerben a  $T'_\sigma$  komponensek a következők lesznek:

$$T'_\sigma = \sum_{\rho} D(R)_{\rho\sigma} T_\rho. \quad (15.30)$$

Itt külön feltüntettük a transzformációs együtthatók függését az új koordináta-rendszernek a régre vonatkoztatott  $R$  elforgatásától. Ha másodszor is új koordináta-rendszerre térünk rá, ezúttal mondjuk az  $S$  forgatással, akkor kapjuk, hogy

$$T''_\tau = \sum_{\rho} D(S)_{\tau\rho} T'_\rho = \sum_{\rho\sigma} D(S)_{\tau\rho} D(R)_{\rho\sigma} T_\sigma. \quad (15.31)$$

$T''$ -k a tenzor komponensei az  $SR$  forgatással kapott koordináta-rendszerben, ezért az is igaz, hogy

$$T''_\tau = \sum_{\sigma} D(SR)_{\tau\sigma} T_\sigma. \quad (15.32)$$

Mivel (15.31) és (15.32) a  $T_\sigma$  tenzorkomponensek tetszőleges értékére érvényes, azért

$$D(SR)_{\tau\sigma} = \sum_{\rho} D(S)_{\tau\rho} D(R)_{\rho\sigma}; \quad \mathbf{D}(SR) = \mathbf{D}(S) \mathbf{D}(R). \quad (15.33)$$

Ezért a vektorok vagy tenzorok komponenseinek transzformációs mátrixai a forgáscsoport valamely ábrázolását alkotják.

Így például a vektorok transzformációs mátrixai éppen az  $\mathbf{R}$  forgási mátrixok, ezek saját csoportjuknak egy ábrázolását alkotják. Ez az ábrázolás  $\mathbf{D}^{(1)}$ -gyel ekvivalens. A skalárok „transzformációs mátrixa”  $\mathbf{D}^{(0)}$ .

A leggyakrabban előforduló tenzorokhoz tartozó ábrázolások azonban nem irreducibilisek, ugyanis a tenzor komponenseiből olyan lineáris kombinációk képezhetők, amelyek egymás között transzformálódnak. A reducibilis ábrázolásokat az a mátrix viszi át redukált alakba, amellyel az eredeti komponensekből ezek a lineáris kombinációk képezhetők.

Tekintsünk például valamely másodrendű tenzort, amelynek komponensei  $T_{xx}, T_{xy}, T_{xz}, T_{yx}, T_{yy}, T_{yz}, T_{zx}, T_{zy}, T_{zz}$ . Ez a tenzor egy szimmetrikus és egy antiszimmetrikus tenzor összegeként írható fel. Az előbbi hat komponense:  $T_{xx}, T_{yy}, T_{zz}, T_{xy} + T_{yx}, T_{zx} + T_{xz}, T_{yz} + T_{zy}$ , az utóbbi három komponense:  $T_{xy} - T_{yx}, T_{yz} - T_{zy}, T_{zx} - T_{xz}$ . Az antiszimmetrikus tenzorhoz tartozó ábrázolás ekvivalens  $\mathbf{D}^{(1)}$ -gyel és irreducibilis, a szimmetrikushoz tartozó azonban nem az. Komponenseinek van egy olyan lineáris kombinációja, amely invariáns, ez pedig  $T = T_{xx} + T_{yy} + T_{zz}$ . A maradék öt lineáris kombináció,  $T_{xx} - \frac{1}{3}T, T_{yy} - \frac{1}{3}T, T_{xy} + T_{yx}, T_{yz} + T_{zy}, T_{zx} + T_{xz}$  nem más, mint egy zérus átlósösszegű szimmetrikus tenzor öt egymástól független komponense. Ezek egy  $\mathbf{D}^{(2)}$ -ekvivalens irreducibilis ábrázoláshoz tartoznak.

Utolsó megjegyzésünkkel rámutattunk, hogy miért nem előnyös az irreducibilis ábrázolások sorait és oszlopait azon tenzorkomponensek szimbólumaival jelölni, amelyekre vonatkoznak. Ez ugyan s túlságosan sok komponenshez vezetne. A zérus átlósösszegű tenzor  $T_{xx} - \frac{1}{3}T$  komponensét elhagyhatjuk, helyette a  $T_{zz} - \frac{1}{3}T$  mennyiséget használhatjuk.



$\mathbf{D}^{(1)}$ -ben a három sor nem a vektor  $x$ ,  $y$  és  $z$  komponensére vonatkozik; így ugyanis  $\mathbf{D}^{(1)}$  valós volna. A  $\mathbf{D}^{(1)}$  ábrázolás olyan  $T_i$  vektortranszformációját határozza meg, amelynek komponensei

$$T_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iY),$$

$$T_0 = Z, \tag{15.34}$$

$$T_{+1} = \frac{-1}{\sqrt{2}}(X - iY)$$

$\mathbf{D}^{(1)}$  a (15.34)-ben megjelenő mátrix segítségével átranzformálható a vektor  $x$ ,  $y$  és  $z$  komponenseire alkalmazható ábrázolásba, vagyis magába az  $\mathbf{R}$  forgatás mátrixába. Ez belátható, ha (15.29)-ből  $\mathbf{D}^{(1)}(\{\alpha 0 0\})$ -t és  $\mathbf{D}^{(1)}(\{0 \beta 0\})$ -t a (15.34) alatt leírt transzformációval jobbról és annak adjungáltjával balról megszorozzuk. Az első esetben a (15.14a'), a másodikban a (15.14b') mátrixot kapjuk.

## 16. A DIREKT SZORZAT ÁBRÁZOLÁSAI

1. A legtöbb fizikai problémában nem egy, hanem egymás mellett többféle szimmetria érvényesül. A vízmolekula esetében például a differenciálegyenlet a következő:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2M} \sum_{k=1}^6 \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{k=1}^{30} \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} \right) \psi + V\psi = E\psi. \quad (16.E.1)$$

Itt  $M$  az egyes hidrogénmagok tömege;  $x_1, \dots, x_6$  pedig azok *Descartes*-koordinátái;  $m$  az elektrontömeg;  $x_1, \dots, x_{30}$  az elektronok *Descartes*-koordinátái. Az oxigénatomot nagy tömege miatt a tömegközéppontban nyugvónak tekintjük; a tőle származó potenciális energiát  $V$ -be beleértjük. A (16.E.1) problémának többféle szimmetriája van: először is a hidrogénmagok koordinátái, azután az elektronok koordinátái felcserélhetők, végül az egész rendszer elforgatható. A forgatások között nemcsak a valódi forgáscsoport, hanem a teljes forgás—tükrözés-csoport szerepelni fog. Felmerül tehát a kérdés: hogyan kell a szimmetriatulajdonságok együttes hatását figyelembe venni?

2. A fent említett három operációnak megvan az a tulajdonsága, hogy az egyik típusú operátor *felcserélhető* a másik típus operátoraival. Nyilvánvaló, hogy nem adódik különbség, ha először felcseréljük a részecskék koordinátáit és utána forgatunk, vagy ha először forgatunk és a permutációt utána hajtjuk végre. Ezért felteesszük, hogy bármely operátorcsoport minden eleme felcserélhető a vele együtt vizsgált más operátorcsoportok elemeivel.

Először tekintsük azt az esetet, amikor (16.E.1) csupán két csoporttal szemben invariáns. Legyenek e két csoport elemei  $E', A_2, A_3, \dots, A_n$  és  $E'', B_2, B_3, \dots, B_m$ . Ekkor (16.E.1) nemcsak a  $\mathbf{P}_{E'} = \mathbf{1}, \mathbf{P}_{A_2}, \dots, \mathbf{P}_{A_n}$  és a  $\mathbf{P}_{E''} = \mathbf{1}, \mathbf{P}_{B_2}, \dots, \mathbf{P}_{B_m}$  operátorokkal, hanem eme operátorok valamennyi  $n \cdot m$  számú  $\mathbf{P}_{A_\kappa} \mathbf{P}_{B_\lambda}$  szorzatával szemben is invariáns (az előbb említett felcserélhetőség miatt  $\mathbf{P}_{A_\kappa} \cdot \mathbf{P}_{B_\lambda} = \mathbf{P}_{B_\lambda} \cdot \mathbf{P}_{A_\kappa}$ ). A  $\mathbf{P}_{A_\kappa} \mathbf{P}_{B_\lambda}$ -k az operátorszorzás törvénye szerint csoportot alkotnak, mert két elem szorzata ismét ilyen elem:

$$\mathbf{P}_{A_\kappa} \mathbf{P}_{B_\lambda} \cdot \mathbf{P}_{A_{\kappa'}} \mathbf{P}_{B_{\lambda'}} = \mathbf{P}_{A_\kappa} \cdot \mathbf{P}_{A_{\kappa'}} \mathbf{P}_{B_\lambda} \mathbf{P}_{B_{\lambda'}} = \mathbf{P}_{A_\kappa A_{\kappa'}} \mathbf{P}_{B_\lambda B_{\lambda'}}. \quad (16.1)$$

E csoport egységeleme a  $\mathbf{P}_{E'} \cdot \mathbf{P}_{E''} = \mathbf{1}$  egységoperátor. Ezt a csoportot a  $\mathbf{P}_A$  és  $\mathbf{P}_B$  csoportok *direkt szorzatának* nevezzük; ez alkotja (16.E.1) teljes szimmetriacsoportját.

Általában a direkt szorzat elemei a két  $E', A_2, \dots, A_n$  és  $E'', B_2, \dots, B_m$  csoportból mint „tényezőből” alkotott  $A_\kappa B_\lambda$  párok. A csoportszorzás törvénye:

$$A_\kappa B_\lambda \cdot A_{\kappa'} B_{\lambda'} = A_\kappa A_{\kappa'} \cdot B_\lambda B_{\lambda'} = A_{\kappa''} B_{\lambda''}, \quad (16.1a)$$

ahol  $A_{\kappa''} = A_\kappa A_{\kappa'}$ , és  $B_{\lambda''} = B_\lambda B_{\lambda'}$ . Egyszerűség kedvéért  $A_\kappa \cdot E''$  helyett  $A_\kappa$ -t és  $E' \cdot B_\lambda$  helyett  $B_\lambda$ -t írunk. (16.1) és (16.1a) szerint az  $A_\kappa \cdot B_\lambda$ -k csoportja izomorf a  $\mathbf{P}_{A_\kappa} \cdot \mathbf{P}_{B_\lambda}$ -k csoportjával; ezért írhatjuk, hogy  $\mathbf{P}_{A_\kappa} \mathbf{P}_{B_\lambda} = \mathbf{P}_{A_\kappa B_\lambda}$ . A  $\mathbf{P}_{A_\kappa} \mathbf{P}_{B_\lambda}$  csoport ábrázolásait helyett ezért vizsgálhatjuk az  $A_\kappa \cdot B_\lambda$ -k csoportjának ábrázolásait.

3. Két csoport direkt szorzatának ábrázolását úgy kutatjuk fel, hogy először az egyes tényezők  $A_\kappa$  illetve  $B_\lambda$  elemeinek valamilyen ábrázolásban megfeleltetett  $\mathbf{a}(A_\kappa)$  és  $\mathbf{b}(B_\lambda)$  mátrixok direkt szorzatát feleltetjük meg az  $A_\kappa B_\lambda$  elemnek. Az  $\mathbf{a}(A_\kappa) \times \mathbf{b}(B_\lambda) = \mathbf{d}(A_\kappa B_\lambda)$  mátrixok valóban a direkt szorzat egy ábrázolását alkotják, hiszen (2.7) szerint

$$\begin{aligned} \mathbf{a}(A_\kappa) \times \mathbf{b}(B_\lambda) \cdot \mathbf{a}(A_{\kappa'}) \times \mathbf{b}(B_{\lambda'}) &= \mathbf{a}(A_\kappa) \cdot \mathbf{a}(A_{\kappa'}) \times \mathbf{b}(B_\lambda) \cdot \mathbf{b}(B_{\lambda'}) = \\ &= \mathbf{a}(A_\kappa A_{\kappa'}) \times \mathbf{b}(B_\lambda B_{\lambda'}). \end{aligned} \quad (16.2)$$

Vagyis az  $A_\kappa B_\lambda$  és  $A_{\kappa'} B_{\lambda'}$  elemeknek megfelelő  $\mathbf{a}(A_\kappa) \times \mathbf{b}(B_\lambda)$  és  $\mathbf{a}(A_{\kappa'}) \times \mathbf{b}(B_{\lambda'})$  mátrixok szorzata nem más, mint az  $A_\kappa B_\lambda A_{\kappa'} B_{\lambda'} = A_\kappa A_{\kappa'} B_\lambda B_{\lambda'}$  elemnek megfelelő mátrix.

A  $\mathbf{d}(A_\kappa B_\lambda) = \mathbf{a}(A_\kappa) \times \mathbf{b}(B_\lambda)$  mátrix elemei a következők:

$$d(A_\kappa B_\lambda)_{\rho'\sigma'; \rho\sigma} = a(A_\kappa)_{\rho'\rho} b(B_\lambda)_{\sigma'\sigma}. \quad (16.2a)$$

Ha  $\mathbf{a}(A_\kappa)$  és  $\mathbf{b}(B_\lambda)$  irreducibilis, akkor  $\mathbf{d}(A_\kappa B_\lambda)$  is az. Ha ugyanis az  $(M_{\rho'\sigma'; \rho\sigma})$  mátrix valamennyi  $\mathbf{d}(A_\kappa B_\lambda)$ -val felcserélhető, akkor

$$\sum_{\rho\sigma} M_{\rho'\sigma'; \rho\sigma} a(A_\kappa)_{\rho\rho''} b(B_\lambda)_{\sigma\sigma''} = \sum_{\rho\sigma} a(A_\kappa)_{\rho'\rho} b(B_\lambda)_{\sigma'\sigma} M_{\rho\sigma; \rho''\sigma''} \quad (16.3)$$

minden  $\kappa$ -ra és  $\lambda$ -ra. Legyen most először  $A = E'$ , majd utána  $B = E''$ , ekkor  $\mathbf{a}(E')$ , illetve  $\mathbf{b}(E'')$  az egységmátrix, és (16.3) így írható:

$$\sum_{\sigma} M_{\rho'\sigma'; \rho\sigma} b(B_\lambda)_{\sigma\sigma''} = \sum_{\sigma} b(B_\lambda)_{\sigma'\sigma} M_{\rho\sigma; \rho''\sigma''}, \quad (16.3a)$$

illetőleg

$$\sum_{\rho} M_{\rho'\sigma'; \rho\sigma} a(A_\kappa)_{\rho\rho''} = \sum_{\rho} a(A_\kappa)_{\rho'\rho} M_{\rho\sigma; \rho''\sigma''}. \quad (16.3b)$$

Így

$$\begin{pmatrix} M_{\rho'1; \rho''1} & M_{\rho'1; \rho''2} & \cdots \\ M_{\rho'2; \rho''1} & M_{\rho'2; \rho''2} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (16.E.2)$$

almátrixai minden  $\varrho'$  és  $\varrho''$ -re felcserélhetőek minden  $\mathbf{b}(B_\lambda)$ -val. Ugyanígy (16.3b) szerint

$$\begin{pmatrix} M_{1\sigma';1\sigma''} & M_{1\sigma';2\sigma''} & \dots \\ M_{2\sigma';1\sigma''} & M_{2\sigma';2\sigma''} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (16.E.3)$$

almátrixai felcserélhetőek minden  $\mathbf{a}(A_\kappa)$ -val minden  $\sigma'$  és  $\sigma''$  mellett. Ezért mind (16.E.2), mind pedig (16.E.3) almátrixai állandó mátrixok. Következik tehát, hogy

$$M_{\varrho'\sigma';\varrho''\sigma''} = \delta_{\sigma'\sigma''} M_{\varrho'1;\varrho''1}, \quad (16.4a)$$

$$M_{\varrho'\sigma';\varrho''\sigma''} = \delta_{\varrho'\varrho''} M_{1\sigma';1\sigma''}, \quad (16.4b)$$

amelyből

$$M_{\varrho'\sigma';\varrho''\sigma''} = \delta_{\sigma'\sigma''} M_{\varrho'1;\varrho''1} = \delta_{\sigma'\sigma''} \delta_{\varrho'\varrho''} M_{11;11}. \quad (16.4)$$

Tehát az  $\mathbf{M}$  mátrix maga is szükségképpen állandó mátrix; vagyis  $\mathbf{d}(A_\kappa B_\lambda)$  irreducibilis.

4. Rendelkezésünkre áll tehát a módszer, melynek segítségével két csoport direkt szorzatának irreducibilis ábrázolásait felépíthetjük, ha a „tényezők” irreducibilis ábrázolásait ismerjük. Hátravan még az a kérdés, hogy vajon a direkt szorzat valamennyi irreducibilis ábrázolása előállítható-e ilyen módon.

Jelölje az  $A$  csoport irreducibilis ábrázolásainak dimenzióit  $g_1, g_2, g_3, \dots$ , a  $B$  csoportét pedig  $h_1, h_2, \dots$ . Az első csoport minden egyes ábrázolását a második minden egyes ábrázolásával összepárosítva a direkt szorzat  $g_1 h_1, g_1 h_2, \dots, g_2 h_1, g_2 h_2, \dots$  dimenziójú irreducibilis ábrázolásait kapjuk. A 9. fejezetben tárgyalt tétel alapján állíthatjuk, hogy valamely csoport irreducibilis ábrázolásainak dimenzióit négyzetre emelve és összegezve valamennyi irreducibilis ábrázolásra a csoport rendjét kapjuk, tehát

$$g_1^2 + g_2^2 + \dots = n \quad \text{és} \quad h_1^2 + h_2^2 + \dots = m,$$

ahol  $n$  és  $m$  az  $A$ , illetőleg  $B$  rendje. Ebből következik, hogy a dimenzióknak a direkt szorzat fent előállított ábrázolásaira vett négyzetösszege egyenlő a direkt szorzat  $n \cdot m$  rendjével:

$$\begin{aligned} (g_1 h_1)^2 + (g_1 h_2)^2 + \dots + (g_2 h_1)^2 + (g_2 h_2)^2 + \dots + \dots = \\ = g_1^2 m + g_2^2 m + \dots = n \cdot m \end{aligned}$$

Ebből következik, hogy a megadott eljárás valóban szolgáltatja az összes irreducibilis ábrázolást.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Két, egymástól lényegesen különböző direkt szorzatot vizsgálunk itt meg egyszerre: két csoport és két mátrix direkt szorzatát. A csoportok direkt szorzatának elemei  $A_\kappa B_\lambda$ . Az  $\mathbf{a}(A_\kappa)$  és  $\mathbf{b}(B_\lambda)$  ábrázolások  $\mathbf{a}(A_\kappa) \times \mathbf{b}(B_\lambda)$  direkt szorzata felel meg  $A_\kappa B_\lambda$ -nak.

Ezt a megfontolást átfogalmazhatjuk úgy, hogy folytonos csoportokra is alkalmazható legyen. Az első ábrázolások  $g_1^2 + g_2^2 + \dots$  együtthatói — azokat  $A$  függvényeinek tekintve<sup>2</sup> — teljes rendszert alkotnak  $A$  függvényeire. Ugyanígy a  $h_1^2 + h_2^2 + \dots$  ábrázolási együtthatók — mint  $B$  függvényei — teljes rendszert alkotnak  $B$  függvényeire. Ily módon a két függvényrendszerből alkotott szorzatok összessége a két változó függvényeire alkot teljes rendszert.

5. A (16.E.1) differenciálegyenlet sajátértékei osztályokba csoportosíthatók: a teljes szimmetriacsoport (amely a (16.E.1)-et változatlanul hagyó operátorok csoportja) egy ábrázolása tartozik minden sajátértékhez. E csoport (amely a három említett csoport direkt szorzata) valamely irreducibilis ábrázolását úgy legelőnyösebb jellemezni, hogy a teljes ábrázolást felépítő három irreducibilis ábrázolás jellemző három szimbólumát hasznosítjuk. Ily módon például mondhatjuk, hogy (16.E.1) valamely sajátértéke a  $H$ -magok felcserélésének szimmetrikus, a tíz elektron permutációjának antiszimmetrikus, a forgáscsoportnak pedig kétdimenziós ábrázolásához tartozik. Ezt az állítást tehát úgy kell érteni, hogy e három csoport direkt szorzatának ama ábrázolásához tartozik a kérdéses sajátérték, amely a „tényezők” jelzett ábrázolásaiból épül fel.

Az ilyen sajátérték sajátfüggvénye — ez a három ábrázolás direkt szorzatában valamely sornak felel meg — három indexet hordoz, amely azt jelzi, hogy a három összetevő csoport ábrázolásaiban melyik három sorhoz tartozik. Két olyan sajátfüggvény, amely a három index közül legalább egyben különbözik, ortogonális egymásra. Ez akkor is igaz marad, ha tetszőleges szimmetrikus operátort alkalmazunk rájuk. Az ortogonalitás egyrészt abból a tényből látható be, hogy a direkt szorzat ábrázolásának különböző soraihoz tartoznak, másrészt, hogy — ha például második indexük különbözik — a második csoport ábrázolásának különböző soraihoz tartoznak.

Ha a két csoport direkt szorzatának  $\mathbf{a}(A) \times \mathbf{b}(B)$  ábrázolásában a  $\varrho\sigma$  sorhoz tartozó függvényre hat az első csoport  $\mathbf{P}_A = \mathbf{P}_A \mathbf{P}_{E''}$  operátora, akkor a kapott függvény az  $\mathbf{a}(A) \times \mathbf{b}(B)$  ábrázolás  $1\sigma, 2\sigma, 3\sigma, \dots$  soraihoz tartozó függvények segítségével felírható. Valóban, az együtthatók olyanok, mintha a második csoport nem is lenne jelen.

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_A \mathbf{P}_{E''} \psi_{\varrho\sigma} &= \sum_{\varrho'\sigma'} a(A)_{\varrho'\varrho} b(E'')_{\sigma'\sigma} \psi_{\varrho'\sigma'} = \\ &= \sum_{\varrho'\sigma'} a(A)_{\varrho'\varrho} \delta_{\sigma'\sigma} \psi_{\varrho'\sigma'} = \sum_{\varrho'} a(A)_{\varrho'\varrho} \psi_{\varrho'\sigma}. \end{aligned} \quad (16.5)$$

Az  $\mathbf{a}(A) \times \mathbf{b}(B)$  ábrázolás  $\varrho\sigma$  sorához tartozó függvény tehát  $\mathbf{a}(A)$   $\varrho$  sorához és  $\mathbf{b}(B)$   $\sigma$  sorához tartozik; tehát a kérdéses függvény e két függvényosztály minden tulajdonságával rendelkezik.

6. A perturbációs számításban használt „helyes lineáris kombinációk” megalko-

<sup>2</sup>  $A$  függvénye a  $J(A_{\mu})$  szám megfeleltetése az egyes  $A_{\mu}$  csoportelemeknek.

tásában az egyes függvénycsaládokon belül kell a lineáris kombinációkat képezni; a család a kérdéses szimmetriacsoportok direkt szorzatának  $\mathbf{a}(A) \times \mathbf{b}(B)$  ábrázolásában egy  $\rho\sigma$  sorhoz tartozó függvények összessége. Eljárhatunk úgy, hogy először  $\mathbf{a}(A)$   $\rho$  sorához tartozó  $f_1, f_2, \dots$  lineáris kombinációkat készítjük el; az  $\mathbf{a}(A) \times \mathbf{b}(B)$   $\rho\sigma$  sorához tartozó minden  $\psi_{\rho\sigma}$ -nak az  $f_1, f_2, \dots$  függvények lineáris kombinációjának kell lennie. Tegyük fel ugyanis, hogy  $\psi_{\rho\sigma}$  olyan  $f_1, f_2$  függvényeket is tartalmaz, amelyek nem tartoznak az  $\mathbf{a}(A)$  ábrázoláshoz, vagy annak  $\rho$  sorához, vagyis

$$\psi_{\rho\sigma} = c_1 f_1 + c_2 f_2 + \dots + c'_1 f'_1 + c'_2 f'_2 + \dots \quad (16.6)$$

Ekkor bizonyos, hogy  $c_1 f'_1 + c_2 f'_2 + \dots = 0$ , mert ha (16.6)-ban a  $c_1 f_1 + c_2 f_2 + \dots$  tagokat átvisszük, akkor a teljes bal oldal  $\mathbf{a}(A)$   $\rho$  sorához fog tartozni, a bal oldal ortogonális a jobb oldal minden tagjára, ezért mindkét oldalnak el kell tűnnie.

7. A háromdimenziós forgás—tükrözés-csoport irreducibilis ábrázolásainak meghatározásához felhasználjuk a direkt szorzat ábrázolásaira vonatkozó tételt. A forgás—tükrözés-csoport a  $\pm 1$  determinánsú valós ortogonális háromdimenziós mátrixok csoportja. Ez a valódi forgáscsoport, és az  $E$  egységelemből, valamint az  $I$  inverzióból álló tükrözéscsoporttal izomorf csoport direkt szorzata.

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad I = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Könnyen belátható, hogy minden valós ortogonális mátrix előállítható úgy, hogy valamilyen forgást megszorunk  $E$ -vel vagy  $I$ -vel. Ha a determináns  $+1$ , akkor máris valamilyen valódi forgatásként, ha  $-1$ , akkor valódi forgatásnak és  $I$ -nek szorzataként fogható fel. Az is világos, hogy  $E$  és  $I$  a valódi forgáscsoport valamennyi mátrixával (tulajdonképpen az összes háromdimenziós mátrixszal) felcserélhető.

A tükrözéscsoportnak két irreducibilis ábrázolása van: az azonos ábrázolás (ezt pozitívnak is szokás nevezni) és a negatív ábrázolás, amelyben az azonosság-nak az  $(1)$  mátrix, az  $I$  inverzióknak a  $(-1)$  mátrix felel meg. Ezért a valódi forgáscsoport minden  $\mathbf{D}^{(l)}(R)$  ábrázolásából a forgás—tükrözés-csoportnak két ábrázolása kapható, ha  $\mathbf{D}^{(l)}(R)$ -et a tükrözéscsoport pozitív, illetőleg negatív ábrázolásával kapcsoljuk össze.

A háromdimenziós forgás—tükrözés-csoportnak két (egyértékű) irreducibilis ábrázolása van az  $1, 3, 5, \dots$  dimenzióra, vagyis minden páratlan dimenzióra. Ezeket így jelölhetjük:  $l=0_+, 0_-, 1_+, 1_-, \dots$ . Mind az  $l_+$ , mind pedig az  $l_-$  ábrázolás  $2l+1$  dimenziós; mindkettőben a valódi forgásoknak ugyanazok a mátrixok felelnek meg, mint a valódi forgáscsoport  $2l+1$  dimenziós ábrázolásában.  $l_+$ -ban ugyanaz a  $\mathbf{D}^{(l)}(R)$  mátrix, amely  $R$ -nek felel meg lesz  $IR$  megfelelője is, az  $l_-$ -ban viszont  $-\mathbf{D}^{(l)}(R)$  felel meg  $IR$ -nek.

## 17. ATOMSZÍNKÉPEK

### SAJÁTÉRTÉKEK ÉS KVANTUMSZÁMOK

I. Felhasználjuk most csoportelméleti eredményeinket arra, hogy az atomszínekpek legfontosabb jellegzetességeit megmagyarázzuk.<sup>1</sup> A jelen fejezet csupán az olvasó tájékoztatására szolgál és nem tartalmazza sem a bizonyításokat, sem a részleteket. Reméljük, hogy a matematikai részletek háttérbe szorításával a színekpek szabályszerűségeit úgy tudjuk majd áttekinteni, ahogy maguk a kísérletek derítették fényt rájuk.

Mielőtt a *Schrödinger*-egyenlet tényleges megoldásához fognánk, először a tömegközépponti koordináták leválasztásával foglalkozunk. Eredeti formájában a *Schrödinger*-egyenletnek csak folytonos spektruma van. Ez annak a ténynek a következménye, hogy az egész atom a gerjesztési energián kívül tetszőleges, folytonosan változó mozgási energiával is rendelkezhet. Ha csupán a gerjesztési energiát kívánjuk vizsgálni — és gyakorlatilag mindig ez a helyzet, — akkor fel kell tételeznünk, hogy az atom nyugszik. Az elektron tömege az atommagok tömegéhez képest elhanyagolható, ezért a mag koordinátáit általában a tömegközéppont koordinátaival azonosítják, és feltételezik, hogy a hullámfüggvények függetlenek a mag koordinátáitól. Így a mag nem is jelenik meg a *Schrödinger*-egyenletben, hanem úgy tekintendő, mint annak az erőternek a rögzített centruma, amelyben az elektronok mozognak. Ez természetesen csak az egymagú atomokban lehetséges.

Az alábbi következő általános megfontolások függetlenek attól a feltételezéstől, hogy a „mag mozgása” elhanyagolható, hacsak nem a szintek olyan felhasadására vonatkoznak, amely külső erőterben következnek be. E feltételezést kikerülhetjük, ha a hullámfüggvényt úgy tekintjük, hogy az minden koordinátát mint változót tartalmaz, azonban a tömegközéppont koordinátáitól független. Ilyen módon a hullámfüggvényt állandónak tesszük fel olyan egyenesek mentén, amelyek azonos részecske-elrendezéseket kötnek össze. (Ezek a részecske-elrendeződések csupán az atomnak, mint egésznek egy eltolásában különböznek.)<sup>2</sup> Ezt mellékfeltételnek tekintjük. Az a követelmény, hogy két hullámfüggvény skaláris szorzata maradjon véges, elvben kizárna olyan hullámfüggvényeket, amelyek a konfigurációnak végtelen eltolásakor állandók. Az állandóságot azonban

<sup>1</sup> Az atomszínekpek kísérletileg megfigyelt jellegzetességeit kitűnően és részletesen tárgyalja F. HUND könyve: *Line Spectra and Periodic System*, (Springer, Berlin, 1927) és L. C. PAULING és S. GOUDSMIT műve: *The Structure of Line Spectra*. McGraw-Hill, New York 1930.

<sup>2</sup> Ez az oka annak, hogy a translációs csoportot mint a probléma szimmetriacsoportját nem vezetjük be. Minden hullámfüggvény invariáns a translációkkal szemben, s így a translációs csoport azonos ábrázolásához tartozik.

feltételezhetjük tetszőlegesen nagy eltolásra; ez a levezetendő eredményeink pontosságát nem korlátozza majd. Kétségtelen, hogy ez lenne precízebb nézőpont, azonban az a szokás, hogy a hullámfüggvényeket úgy tekintjük, mintha azok a mag koordinátáit változóként nem tartalmazzák.

Ha a mag mozgásától eltekintünk, a hidrogénatom egyetlen elektrontól áll, amely állandó potenciálú erőterben mozog, ezért színeképe a legegyszerűbb. A *Schrödinger*-egyenlet a következő:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - \frac{e^2}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \right] \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z), \quad (17.1)$$

ez pedig pontosan megoldható. Ily módon kiszámíthatók a lehetséges energiaszintek spektrumai (a „termek” értékei, ahogy a spektroszkópiában mondják) és a sajátfüggvények (vagyis a stacionárius állapotok). A spektrum egy része diszkrét, az energiákra  $E = -2\pi R\hbar c/1^2, -2\pi R\hbar c/2^2, -2\pi R\hbar c/3^2, \dots$  adódik, itt  $R$  a *Rydberg*állandó;

$$E_N = -\frac{me^4}{2\hbar^2 N^2} = -\frac{2\pi R\hbar c}{N^2} = -\frac{2,18 \times 10^{-18}}{N^2} \text{ J} = -\frac{13,60 \text{ eV}}{N^2}. \quad (17.2)$$

Az energiák negatívak, annak megfelelően, hogy a mag közelében az elektronnak jelentős negatív helyzeti energiája van, hiszen ahhoz hogy eltávolítsuk, végtelen messzire, ahol a potenciál zérus, munkát kell befektetnünk. Az egyes szintek különbsége az  $N$  főkvantumszám növekedtével csökken; végtelen nagy kvantumszámokra az energia zérushoz tart. Ez fizikai szempontból azt jelenti, hogy az elektront fokozatosan eltávolítjuk abból a tartományból, amelyben a mag hatása alatt van. Ha az elektron teljesen szabaddá válik, akkor az energiája zérus.

A (17.2) alatt megadott spektrumhoz zérus energiától felfelé folytonos spektrum csatlakozik, ez felöleli a teljes pozitív energiatartományt. E kontinuumban a hidrogénatom ionizált állapotban van. A pozitív energia a végtelenbe eltávolított elektron kinetikus energiájával egyenlő. A folytonos spektrumban szokásos értelemben vett stacionárius állapot nem létezik. Az elektron megfelelően hosszú idő alatt a magtól tetszőlegesen messze eltávolodhat. A stacionárius állapot tehát matematikai szempontból normált hullámfüggvénynek felel meg, a folytonos spektrum sajátfüggvényei azonban nem normálhatók.

Az atomszíneképekre mindig jellemző valamilyen, (17.2)-höz hasonló általános sorozat, amely véges határértékhez tart, ahol az ionizált állapotok folytonos spektruma kezdődik.

A (17.2) sajátértékek elfajultak, vagyis nem egyetlen, hanem több lineárisan független sajátfüggvény tartozik minden egyes sajátértékhez. Az  $N$  indexhez (főkvantumszámhoz) tartozó sajátérték  $N^2$ -szeresen elfajult.



Az olvasó kedvéért megadjuk a normált sajátfüggvényeket. Ezeket az  $r$ ,  $\theta$ ,  $\varphi$  polárkoordinátákban (lásd a 7. ábrát a 166. oldalon) a legkényelmesebb felírni<sup>3</sup>:

$$\Psi_{l\mu}^N = R_{Nl}(\eta) Y_{l\mu}(\theta, \varphi);$$

$$R_{Nl}(\eta) = \left\{ \left( \frac{2}{Nr_0} \right)^2 \frac{(N-l)!}{2N[(N+1)!]^3} \right\}^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}\eta r} L_{N+l}^{2l+1}(\eta), \quad (17.3)$$

$$Y_{l\mu}(\eta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\mu\varphi} \cdot \left[ \frac{2l+1}{2} \cdot \frac{(l-\mu)!}{(l+\mu)!} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{(-\sin\theta)^\mu}{2^l \cdot l!} \left( \frac{d}{d \cos\theta} \right)^{l+\mu} (\cos^2\theta - 1)^l,$$

$$Y_{l, -\mu}(\theta, \varphi) = (-1)^\mu Y_{l, \mu}^*(\theta, \varphi);$$

itt  $\eta = 2r/Nr_0$ , ahol  $r_0 = \hbar^2/mc^2$  az első Bohr-pálya sugara.

Bevezettük az  $l$  indexet (ez a „pályakvantszám”) és a  $\mu$  indexet (ez a „mágneses kvantszám”), ezek az  $E_N$  sajátértékekhez tartozó  $N^2$  számú sajátfüggvényeket különböztetik meg egymástól. Rögzített  $N$  mellett  $l$  az 0, 1, 2, ...,  $N-1$  értékeket veheti fel,  $\mu$  pedig  $-l$ -től  $+l$ -ig fut ( $N$ -től függetlenül). Így az  $E_N$ -hez tartozó sajátfüggvények száma:  $\sum_{l=0}^N (2l+1) = N^2$ . A (15.3a) határozza meg az  $Y_{l\mu}$  normált gömbharmonikusok<sup>4</sup>. Az  $(N+l)$ -ik *Laquerre*-polinomnak,  $L_{N+l}$ -nek  $(2l+1)$ -ik deriváltját  $L_{N+l}^{2l+1}(\eta)$ -val jelöltük;

$$L_v(\eta) = (-1)^v \left[ \eta^v - \frac{v^2}{1!} \eta^{v-1} + \frac{v^2(v-1)^2}{2!} \eta^{v-2} + \dots + (-1)^v v! \right].$$

A hullámfüggvény (17.3) kifejezése és kapcsolata  $Y_{l, \mu}$ -val jelzi, hogy az  $l$  mellékvantszám összefügg a forgáscsoport  $(2l+1)$ -dimenziós ábrázolásával.

A héliumion és a kétszer ionizált lítiumatom, valamint minden olyan rendszer spektruma, amelyben egy mag és egy elektron van, szorosan összefügg a hidrogén spektrumával. A *Schrödinger*-egyenletben a potenciális energia helyébe  $-Ze^2/r$ -et kell írni; az energiaszintek így módosulnak:

$$E_N^{(Z)} = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{N^2}. \quad (17.2a)$$

(17.3)-ban  $\eta$  helyébe

$$\eta^{(Z)} = \frac{2me^2Z}{\hbar^2N} \quad r = \frac{2Zr}{Nr_0} \quad (17.3a)$$

kerül,  $\psi$ -t pedig  $Z^{3/2}$ -el kell szorozni, hogy normált legyen.

<sup>3</sup> Az  $R_{Nl}(\eta)$  radiális sajátfüggvény normálása olyan, hogy  $\int |R_{Nl}|^2 r^2 dr = 1$ . A gömbharmonikusok ugyanazok, amelyeket a 167. oldalon adtunk meg. Felhívjuk a figyelmet (lásd a 4. lábjegyzetet) CONDON és SHORTLEY  $R_{Nl}$ -l a radiális sajátfüggvény  $\eta = 2r/Nr_0$  szorosát jelöli.

<sup>4</sup> Ahogyan azt korábban megjegyeztük, a gömbharmonikusok fázisait E. U. CONDON, G. H. SHORTLEY: *The Theory of Atomic Spectra*. (Cambridge Univ. Press, London és New York, 1953) című művével összhangban választottuk meg. A jelen műben használt megállapodásaink ugyanazok, mint amelyek M. E. ROSE: *Multipole Fields*. (Wiley, New York, 1955) című műve tartalmaz. E megállapodásokat az A. függelékben tárgyaljuk meg.

2. Több — mondjuk  $n$  — elektronos atom szinkéjét nem lehet pontosan kiszámolni. Ez a potenciális energia viszonylag bonyolult alakja miatt van:

$$V = \sum_i^n \frac{-e^2 Z}{\sqrt{x_i^2 + y_i^2 + z_i^2}} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}} \quad (17.4)$$

Ha (17.4)-ben az elektronok kölcsönös tasztításának megfelelő második tag hiányozna, akkor azok csupán a mag állandó erőterének hatása alatt mozognának. Az ekkor adódó

$$(H_1 + H_2 + \dots + H_n)\psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_n, y_n, z_n) = E\psi \quad (17.5)$$

Schrödinger-egyenlet, ahol

$$H_k = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_k^2} \right) - \frac{Ze^2}{\sqrt{x_k^2 + y_k^2 + z_k^2}}, \quad (17.5a)$$

megoldható volna. A sajátértékek és sajátfüggvények (17.5a) sajátértékeinek, illetőleg sajátfüggvényeinek összegei, illetőleg szorzatai lennének; mindezt (17.2a), (17.3) és (17.3a) segítségével kifejezve:

$$\psi(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n) = \psi_{l_1 \mu_1}^{N_1}(x_1, y_1, z_1) \dots \psi_{l_n \mu_n}^{N_n}(x_n, y_n, z_n), \quad (17.6)$$

$$E = E_{N_1} + E_{N_2} + \dots + E_{N_n}. \quad (17.6a)$$

Ez úgy látható be, hogy (17.5)-be behelyettesítjük (17.6)-ot és felhasználjuk, hogy  $\mathbf{H}_k \psi(x_1, \dots, z_n)$  éppen  $E_{N_k} \psi(x_1, \dots, z_n)$ -et ad, mivel

$$\mathbf{H}_k \psi_{l_k \mu_k}^{N_k}(x_k, y_k, z_k) = E_{N_k} \psi_{l_k \mu_k}^{N_k}(x_k, y_k, z_k),$$

és  $\psi$  többi tényezője  $\mathbf{H}_k$  alkalmazásakor állandóként viselkedik.

Természetesen (17.5) a valódi Schrödinger-egyenletnek szegényes közelítése. Ennek ellenére az a szokás, hogy (legalább elvileg) ilyen, vagy ehhez hasonló közelítésből indulnak ki, és az elektronoknak egymásra gyakorolt hatását „perturbációnak” tekintik.

Általában az egyes (17.6a) sajátértékekhez igen sok sajátfüggvény tartozik, hiszen (17.6)-ban  $l_k$  és  $\mu_k$  számos olyan értéket vehet fel, amelynél az energia értéke változatlan marad. Továbbá az  $N_k$  főkvantumszámok sorozatát rögzítve az egyes elektronokat még tetszés szerint permutálhatjuk is anélkül, hogy az energia megváltoznék. Ha azonban az elektronok egymásra gyakorolt hatását perturbációként figyelembe vesszük, az elfajulás részben megszűnik, és a szintek felhasadnak. Az így adódó szintekről — melyek többsége még mindig elfajult — tisztán elméleti alapon semmi egyéb nem állapítható meg (az elhelyezkedésükre vonatkozó durva becsléstől eltekintve), mint szimmetriatulajdonságaik. Ezek a sajátfüggvényeknek

az elektronok permutációi, a tiszta forgatások és az inverziók<sup>5</sup> (tükrözések) során megnyilvánuló transzformációs sajátágaiban öltének testet. Ily módon minden szint három ábrázolásnak felel meg: az egyik a szimmetrikus csoporté, a másik a tiszta forgáscsoporté, a harmadik pedig a tükrözések csoportjáé. (Az utóbbi kettőt a forgás—tükrözés-csoport egy ábrázolásaként szokás összefoglalni.) A megfelelő kvantumszámok (amelyek az ábrázolásokat jellemzik) a következők:<sup>6</sup>

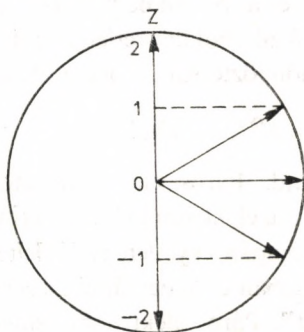
$S$ : multipliett rendszer,

$L$ : a pályaimpulzus-momentum kvantumszáma,

$w$ : a paritás.

3. Az  $L$  pályakvantumszám az  $L=0, 1, 2, \dots$  értékeket veheti fel a különböző szinteknél. A megfelelő sajátértékek a forgáscsoport  $\mathbf{D}^{(0)}(R)$ ,  $\mathbf{D}^{(1)}(R)$ ,  $\dots$  ábrázolásaihoz tartoznak.<sup>7</sup> Ezek az „ $S$ ,  $P$ ,  $D$ ,  $\dots$  szint” nevet viselik. Az  $S$  szinthez egyetlen, a  $P$  szinthez három, a  $D$  szinthez öt stb. sajátfüggvény tartozik. Az  $L$  pályakvantumszámú szinthez tartozó  $2L+1$  sajátfüggvény az  $m$  mágneses kvantumszámokban különbözik egymástól.  $m$  a  $-L$ -tól  $+L$ -ig terjedő egész értékeken fut át (lásd a 8. ábrát). A megfelelő sajátfüggvények a  $\mathbf{D}^{(L)}$  irreducibilis ábrázolás  $m$ -ik sorához tartoznak.

A fizika nyelvén a pályakvantumszám a teljes impulzusmomentum.<sup>8</sup> A mágneses kvantumszám viszont az impulzusmomentumnak a  $Z$  tengely menti vetülete.  $m$  megválasztása a tér egy irányának kijelölését jelenti, ily módon, az ábrázolást



8. ábra

Ha a teljes impulzusmomentum 2, akkor az impulzusmomentum  $Z$  komponense ( $\hbar$  egységekben) a 2, 1, 0, -1, -2 értékeket veheti fel

<sup>5</sup> Valamennyi  $x_1, \dots, z_n$  koordináta előjelének megváltoztatását inverzióknak nevezzük.

<sup>6</sup> Az egész atom kvantumszámait nagybetűvel, az egyes elektronokét kisbetűvel szokás jelölni. A pályakvantumszámot azimutális kvantumszámmal is szokás nevezni.

<sup>7</sup> A 225. oldalon a (19.9b) egyenletben majd rámutatunk arra, hogy ez  $\psi_{l\mu}^Y$ -re is igaz ( $l=0, 1, 2, \dots$ ).

<sup>8</sup> A spint most nem vesszük figyelembe.

teljesen meg kell adnunk ahhoz (nem csupán valamely hasonlósági transzformáció erejéig!), hogy az ábrázolás egy sorához tartozó függvényeket megadhassuk. Ez úgy történik, hogy a (15.6) diagonális mátrixoknak a  $Z$  tengely körüli forgatásokat felletjük meg. Az az állítás azonban, hogy a  $D$  szint minden sajátfüggvénye a  $\mathbf{D}^{(2)}(R)$  ábrázoláshoz tartozik, nem jelenti azt, hogy a térben bármilyen irányt kiválasztottunk.

*Páros paritásúnak*, vagy röviden *párosnak* mondjuk a tükrözési csoport azonos (pozitív) ábrázolásához tartozó szinteket; a többi szint *páratlan paritású*, vagy egyszerűen *páratlan*. A színeképek értelmezésében igen fontos paritás fogalmának a klasszikus elméletben nincs olyan hasonmása, mint amilyen a pályakvantumszám-  
nak az impulzusmomentum. A szint tükrözési sajátosságát, vagyis paritását a szint szimbóluma mellé írt indexszel jelöljük:  $S_+$ ,  $S_-$ ,  $P_+$ ,  $P_-$ , ... A háromdimenziós forgás—tükrözés-csoport megfelelő ábrázolásai  $0_+$ ,  $0_-$ ,  $1_+$ ,  $1_-$ , ... A leggyakoribb szintek:  $S_+$ ,  $P_-$ ,  $D_+$ ,  $F_-$  stb.

Az  $S$  multipllett szerkezet fogalma ugyancsak idegen a klasszikus elmélettől. Az  $n$ -elektron-rendszer minden energiaszintjének az  $n$ -edfokú szimmetrikus csoport egy ábrázolása felel meg. Minden ábrázolás nem fordul elő; hanem csupán a 13. fejezetben  $\mathbf{D}^{(0)}$ ,  $\mathbf{D}^{(1)}$ , ...,  $\mathbf{D}^{(2n)}$ -nel (páros számú elektronra), vagy pedig  $\mathbf{D}^{(2(n-1))}$ -gyel (páratlan számú elektronra) jelölt ábrázolásokhoz *asszociált* ábrázolások bukkantak fel a természetben. Ennek okát a *Pauli*-elvnek és az elektron spinjének taglalása nélkül nem adhatjuk meg. Páros számú elektronra az  $S=0$  szint tartozik a  $\overline{\mathbf{D}}^{(2n)}$ , az  $S=1$  szint a  $\overline{\mathbf{D}}^{(2n-1)}$  és az  $S=\frac{1}{2}n$  pedig a  $\mathbf{D}^{(0)}$  ábrázoláshoz. Annak érdekében, hogy  $S$  értéket az ábrázolásból közvetlenül leolvashassuk és, hogy a forgás-csoport ábrázolásait megkülönböztessük, mostantól az

$$\overline{\mathbf{D}}^{(k)} = \overline{\mathbf{A}}^{(S)}, \quad \text{ahol} \quad S = \frac{1}{2}n - k \quad (17.7)$$

írásmódot alkalmazzuk majd. Páros elektronú atomra  $S$  lehetséges értékei  $0, 1, 2, \dots, \frac{1}{2}n$ ; páratlan számú elektronra (17.7) szerint  $S$  értéke  $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots, \frac{1}{2}n$  lehet. A hidrogénatomban csupán egyetlen érték lehetséges:  $S = \frac{1}{2}$ ; az elsőfokú szimmetrikus csoportnak valóban csak egy ábrázolása van. A szint  $S$  értéke megadja a  $2S+1$  „multiplicitást”. Páros elektronra szingulett, triplett, kvintett stb. szintek vannak, mivel  $2S+1$  lehetséges értékei  $1, 3, 5, \dots$  páratlan elektronra dublett, kvartett, szextett stb. szintek lehetségesek. Az egyelektron-probléma szintjei mind dublett termék. A multiplicitást, vagyis  $2S+1$  értékét a szint szimbóluma előtt felső indexszel jelöljük.  $^1S_+$  páros szingulett  $S$  szintet jelöl;  $^2P_-$  páratlan dublett  $P$  szintet stb. Az antiszimmetrikus  $\overline{\mathbf{D}}^{(0)} = \overline{\mathbf{A}}^{(2n)}$  ábrázoláshoz tartozó szintek multiplicitása a legnagyobb, mégpedig  $n+1$ , míg szingulett szintre  $S=0$  és az ábrázolás  $\overline{\mathbf{D}}^{(2n)} = \mathbf{A}^{(0)}$ .

Az energiaszinteknek három jellemzője van:  $S, L, w$ . Ezek különböztetik meg a szimmetrikus csoport és a forgás—tükrözés-csoport direkt szorzatának külön-

böző  $\mathbf{A}^{(S)} \times \mathbf{D}^{(L,w)}$  ábrázolásait. Mivel azonban egy spektrum számos szintje tartozik ugyanahhoz az ábrázoláshoz, be kell egy olyan  $N$  számot vezetni, amellyel különbséget tehetünk köztük. Az  $E_{SLw}^N$  szint tehát négy indexet hordoz. E szinthez  $(2L+1)g_S$  sajátfüggvény tartozik; itt  $g_S$  az  $\mathbf{A}^{(S)}$  ábrázolás dimenziója. Ezeket úgy jelölhetjük meg, hogy megnevezzük az  $\mathbf{A}^{(S)}$  ábrázolás azon  $\kappa$  sorát, amelyhez tartoznak és hogy  $m$  a mágneses kvantumszám mennyi. A  $\psi_{\kappa m}^{NSLw}$  sajátfüggvény tehát hat indexet visel, s ezek közül legfeljebb (a fizikai jelentéssel nem bíró)  $\kappa$  hagyható el. A különböző  $S$ ,  $L$  és  $w$  indexű szinteket a kísérletekben mutatott sajátosságai jól ismertek. Legfontosabb az a tény, hogy számottevő intenzitású optikai átmenet csak olyan szintek között fordul elő, amelyek pályakvantumszáma vagy egyenlő vagy eggyel különbözik. E szinteknek ezenkívül különböző tükrözési tulajdonságúaknak kell lenniük és ugyanahhoz a multiplett rendszerhez kell tartozniuk. A kvantummechanikának e kombinációs szabályokat ki kell adnia. A következő fejezet feladata lesz ezeknek a kvantummechanikára épülő levezetése.

4. Az elektron spinjének és mágneses momentumának bevezetése (20. fejezet) a *Schrödinger*-egyenlet gyökeres módosításához vezet.

A spin hatása legszembetűnőbb a színekvonalak finomszerkezetében. Olyan energián, ahol az egyszerű *Schrödinger*-elmélet egyetlen  $L$  mellékkvantumszámú és  $S$  multiplett rendszerű szintet jósol, valójában „multiplett” szintrendszer (vagyis számos közeleső szint) figyelhető meg.  $2L+1$  vagy  $2S+1$  szint van a multiplettben attól függően, hogy melyik kisebb; az  $S(L=0)$  szintek mindig egyszeresek;  $P$  szint ( $L=1$ ) csak akkor egyszeres, ha szingulett rendszerhez ( $S=0$ ) és kettős, ha dublett rendszerhez tartozik; a tripllett és az összes magasabb rendszerben a  $P$  szintek háromszorosak. Megfelelően nagy pályakvantumszámnál  $L \cong S$  és a multiplicitás  $2S+1$ .

A multiplett finomszerkezeti komponensei között az azokhoz tartozó teljes  $J$  kvantumszámmal teszünk különbséget:

$$J = |L-S|, |L-S|+1, \dots, L+S-1, L+S$$

$J$ -nek  $2L+1$  vagy  $2S+1$  lehetséges értéke van, attól függően, hogy  $L$  az  $S$ -nél kisebb vagy nagyobb. A teljes kvantumszám az elektron spinjének megfelelő impulzusmomentumot magában foglaló teljes impulzusmomentum szerepét játssza.

$L$ ,  $S$  és  $w$  kiválasztási szabályai a multiplett valamennyi  $2L+1$  vagy  $2S+1$  szintjére érvényesek.<sup>9</sup> Ezenfelül  $J$ -re ugyanolyan kiválasztási szabály érvényes, mint  $L$ -re; optikai átmenetkor  $J$  vagy  $\pm 1$ -gyel, vagy 0-val változik meg; két  $J=0$  szint között tilos az átmenet.

5. Most visszatérünk a 2. szakasz végén félbeszakított megfontolásainkhoz. Ott egyszerű *Schrödinger*-egyenletet állítottunk fel (17.5), amelynek (17.6) és (17.6a)

<sup>9</sup> Valójában az  $L$ -re és  $S$ -re vonatkozó szabályok csak akkor érvényesek, ha a spintől származó erők kicsinyek.

megoldásait közvetlenül fel tudtuk írni. A sajátértékek általában nagyon sokszorosan elfajultak, de megjegyezzük, hogy az elektronok kölcsönös taszításának figyelembevétele — ahogyan azt a helyes (17.4) potenciál adja meg mondjuk a *Rayleigh—Schrödinger*-eljárás segítségével — a (17.6a) sajátértékek felhasadásához és az imént tárgyalt szimbólumokkal jellemzett szintek megjelenéséhez vezet. Az eljárást, amellyel valamely adott (17.6a) szintből származó széthasadt szintek számát és fajtáját meghatározzuk, „építkezési elvnek” fogjuk nevezni.<sup>10</sup>

Az építkezési elv levezetésekor nem szabad azt szem elől téveszteni, hogy a *Schrödinger*-egyenlet a *Pauli*-elv által megtiltott, tehát valójában nem létező állapotokhoz is szolgáltat szinteket. Mi azonban csak a valóban létező szintek számát fogjuk meghatározni.

Ha a spint figyelmen kívül hagyjuk, ezek éppen a  $\bar{D}^{(k)} = \bar{A}^{(2n-k)}$  ábrázolásokhoz tartozó szintek. Ha a spint bevezetjük, a sajátértékek sajátfüggvényei antiszimmetrikusak lesznek (22. fejezet). Az építkezési elvet SLATERTŐL származó módszerrel vezetjük le.

## A VEKTORÖSSZEADÁSI MODELL

6. Itt az építkezési elv egyszerű, erősen sematizált esetét tekintjük. Az elektronok egyenértékűségét nem vesszük figyelembe, és feltesszük, hogy a *Schrödinger*-egyenlet teljes szimmetriacsoportja a forgáscsoport.<sup>11</sup>

Két rendszert tekintünk; a legegyszerűbb esetben mindkét rendszer egyetlen elektrontól áll, és e két elektron ugyanazon mag körül kering. Az első rendszer energiája  $E$ , és  $l$  pályakvantumszámú állapotban van. Legyen e sajátértékhez tartozó  $2l+1$  sajátfüggvény  $\psi_{-l}, \psi_{-l+1}, \dots, \psi_l$ . Ekkor

$$\mathbf{P}_R \psi_\mu = \sum_{\mu'} \mathbf{D}^{(l)}(R)_{\mu'\mu} \psi_{\mu'}, \quad (17.8)$$

ahol  $\mathbf{P}_R$  az első rendszer koordinátáinak forgatása. Legyen a második rendszer energiája  $E$ , pályakvantumszáma  $l$  és sajátfüggvényei  $\bar{\psi}_{-l}, \bar{\psi}_{-l+1}, \dots, \bar{\psi}_l$ . Ekkor

$$\bar{\mathbf{P}}_R \bar{\psi}_\nu = \sum_{\nu'} \bar{\mathbf{D}}^{(l)}(R)_{\nu'\nu} \bar{\psi}_{\nu'}. \quad (17.8a)$$

A  $\bar{\mathbf{P}}_R$  és  $\mathbf{P}_R$  operátor különböző, mivel  $\mathbf{P}_R$  csak  $\psi_\mu$  és  $\bar{\mathbf{P}}_R$  pedig  $\bar{\psi}_\nu$  változóit forgatja el, e két változó tartomány viszont különböző. Ezért valamennyi  $\mathbf{P}_k$  *felcserélhető*, valamennyi  $\bar{\mathbf{P}}_R$ -vel,  $\bar{\mathbf{P}}_R \bar{\psi}_\nu = \bar{\psi}_\nu$  és  $\bar{\mathbf{P}}_R \psi_\nu = \psi_\nu$ , tekintve hogy  $\mathbf{P}_R$  és  $\bar{\mathbf{P}}_R$  nem hat a  $\bar{\psi}_\nu$ , illetőleg  $\psi_\nu$  változóira.

<sup>10</sup> E kifejezést G. HERZBERG javasolta az *Atomic Spectra and Atomic Structure* (Prentice-Hall, 1937) című művében. A német kifejezés: „Aufbauprinzip”, az angol: „building-up principle”. Noha nem terjedt el általánosan e fordításban, mégis ezt a kifejezést használjuk.

<sup>11</sup> Lásd E. FUES: *Z. Physik* **51**, 817 (1928).

Ha most a két rendszert egynek tekintjük, akkor a sajátértékek és sajátfüggvények az egyes rendszerek megfelelő mennyiségeinek összegei, illetőleg szorzatai lesznek. Az  $E + \bar{E}$  sajátértékekhez a következő  $(2l+1)(2\bar{l}+1)$  sajátfüggvény tartozik:

$$\begin{aligned} & \psi_{-l}\bar{\psi}_{-\bar{l}}, \psi_{-l}\bar{\psi}_{-\bar{l}+1}, \dots, \psi_{-l}\bar{\psi}_{\bar{l}-1}, \psi_{-l}\bar{\psi}_{\bar{l}}, \\ & \quad \cdot, \quad \cdot, \quad \dots, \quad \cdot, \quad \cdot, \\ & \psi_{l}\bar{\psi}_{-\bar{l}}, \psi_{l}\bar{\psi}_{-\bar{l}+1}, \dots, \psi_{l}\bar{\psi}_{\bar{l}-1}, \psi_{l}\bar{\psi}_{\bar{l}}, \end{aligned} \quad (17.9)$$

Felmerül a kérdés, hogy ha a két rendszer kölcsönhatását figyelembe vesszük, akkor az összetett rendszer szimmetriacsoportját mely operátorok fogják leírni. Világos, hogy nem a két  $\mathbf{P}_R$  és  $\bar{\mathbf{P}}_R$  operátor-csoport teljes direkt szorzata felel meg  $\psi$  és  $\bar{\psi}$  változóinak koordinátarendszerében a különböző egyidejű forgatásoknak (ennek elemei  $\mathbf{P}_R\bar{\mathbf{P}}_R$  lennének). A bennünket érdeklő csoport az, amelyben a két tengelyrendszer ugyanolyan forgatásokat szenved el; ez pedig csupán a  $\mathbf{P}_R\bar{\mathbf{P}}_R$  és nem a  $\mathbf{P}_R\bar{\mathbf{P}}_R$  operátorokból áll. A  $\mathbf{P}_R\bar{\mathbf{P}}_R$ -ok csoportja a forgáscsoporttal izomorf.  $RQ = T$  fennállásából következik, hogy

$$\mathbf{P}_R\bar{\mathbf{P}}_R \cdot \mathbf{P}_Q\bar{\mathbf{P}}_Q = \mathbf{P}_R\mathbf{P}_Q \cdot \bar{\mathbf{P}}_R\bar{\mathbf{P}}_Q = \mathbf{P}_T\bar{\mathbf{P}}_T.$$

A  $\mathbf{P}_R\bar{\mathbf{P}}_R$  operátorokat a (17.9) függvényekre alkalmazva az eredményül kapott függvények az eredetieknek lineáris kombinációiként írhatók fel.

(17.8) és (17.8a) szerint

$$\begin{aligned} & \mathbf{P}_R\bar{\mathbf{P}}_R\psi_{\mu}\bar{\psi}_{\nu} = \mathbf{P}_R\psi_{\mu}\bar{\mathbf{P}}_R\bar{\psi}_{\nu} = \\ & = \sum_{\mu'} D^{(l)}(R)_{\mu'\mu}\psi_{\mu'} \sum_{\nu'} D^{(\bar{l})}(R)_{\nu'\nu}\bar{\psi}_{\nu'} = \sum_{\mu'\nu'} \Delta(R)_{\mu'\nu';\mu\nu}\psi_{\mu'}\bar{\psi}_{\nu'}. \end{aligned} \quad (17.10)$$

Az összetett rendszer  $(2l+1)(2\bar{l}+1)$  számú (17.9) függvényéhez tartozó  $\Delta(R)$  ábrázolás az egyes rendszerek  $\mathbf{D}^{(l)}$  és  $\mathbf{D}^{(\bar{l})}$  ábrázolásainak direkt szorzata<sup>12</sup>.

$$\Delta(R)_{\mu'\nu';\mu\nu} = D^{(l)}(R)_{\mu'\mu} D^{(\bar{l})}(R)_{\nu'\nu}; \quad \Delta(R) = \mathbf{D}^{(l)}(R) \times \mathbf{D}^{(\bar{l})}(R). \quad (17.11)$$

Most meghatározzuk  $\Delta(R)$  irreducibilis összetevőit. Ez legegyszerűbben úgy hajtható végre, hogy karakterét kifejtjük az irreducibilis ábrázolások karakterei szerint. Ha  $R$   $\varphi$  szögű forgatás, akkor  $\Delta(R)$  karaktere a következő

$$\begin{aligned} & \sum_{\mu\nu} \Delta(R)_{\mu\nu;\mu\nu} = \sum_{\mu} D^{(l)}(R)_{\mu\mu} \sum_{\nu} D^{(\bar{l})}(R)_{\nu\nu} = \\ & = \chi^{(l)}(\varphi) \chi^{(\bar{l})}(\varphi) = \sum_{\mu=-l}^{+l} \exp(i\mu\varphi) \sum_{\nu=-\bar{l}}^{\bar{l}} \exp(i\nu\varphi). \end{aligned} \quad (17.12)$$

<sup>12</sup> Itt a direkt szorzat az előző fejezetbelitől különbözik; ott két szimmetriát (az  $R$  forgatást és az  $I$  inverziót) kapcsolunk össze, s így a csoportot kiterjesztettük. Itt egyforma szimmetriával rendelkező két rendszert csatolunk össze; az összetett rendszernek ugyanaz a szimmetriája.

Foglaljuk most (17.12)-t szimbolikusan táblázatba; így majd kifejtethetjük e kifejezést az irreducibilis karakterek szerint. Képezzünk minden  $\exp(i\kappa\varphi)$  függvényhez egy oszlopot (itt  $\kappa = -l-l, -l-l+1, \dots, -2-1, 0, 1, 2, \dots, +l+l$ ), és helyezzünk el eme oszlopban egy pluszjelet valahányszor az  $\exp(i\kappa\varphi)$  tag előfordul (17.12)-ben. A legkisebb  $\kappa$  amely előfordul  $-l-l$ , a legnagyobb  $l+l$ , így  $2l+2l+1$  oszlopra van szükség. A táblázat sorait  $v$ -nek a  $\kappa = v + \mu$  egyenletből vett értékével jelöljük, a  $v$  sorba az  $\exp[i(v-l)\varphi], \exp[i(v-l+1)\varphi], \dots, \exp[i(v+l)\varphi]$  tagoknak — ezek száma  $2l+1$  — megfelelő pluszjeleket írunk. Feltéve, hogy  $l > l$ , az *I. táblázatot* kapjuk.

I. táblázat

$v$	exp( $i\kappa\varphi$ ) előfordulása a karakterben										
	$\kappa = -l-l$					$-l-l$		$l-l$			$l+l$
$-l$	+	+	+	+		+	+	+			
.		+				+	+		+		
0	→			+		+	+		+	+	
.					+	+	+		+	+	+
$l$						+	+	+	+	+	+

Most a pluszjeleknek az oszlopokon belül végrehajtott áthelyezésével (így az, hogy  $\exp(i\kappa\varphi)$  az összegben hányszor fordul elő, biztosan nem változik meg) elérhetjük, hogy minden egyes sor egy irreducibilis karaktert képviseljen. Ha például a táblázatban a szaggatott vonaltól balra fekvő részt a nyíllal megjelölt sor ( $v=0$  sor) körül megfordítjuk, akkor a *II. táblázatot* kapjuk.

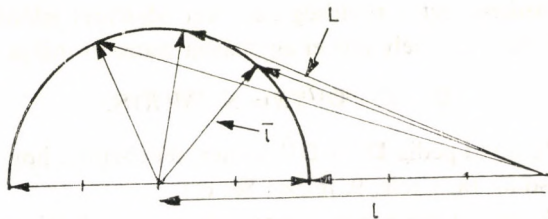
II. táblázat

$v$	A $\Delta(R)$ mátrixban előforduló irreducibilis karakterek										
	$\kappa = -l-l$					$-l-l$		$l-l$			$l+l$
$-l$						+	+	+			
.					+	+	+		+		
0	→			+	+	+	+		+	+	
.		+		+	+	+	+		+	+	+
$l$	+	+		+	+	+	+		+	+	+

A  $v$  sor első pluszjele most a  $-v-l$  oszlopban található; a *II. táblázat*  $v$  sorának megfelelő exponenciálisok összege:

$$\begin{aligned} \exp[-i(v+l)\varphi] + \exp[-i(v+l-1)\varphi] + \dots + \exp[i(v+l-1)\varphi] + \exp[i(v+l)\varphi] = \\ = \chi^{(l+v)}(\varphi). \end{aligned} \quad (17.13)$$





9. ábra

Két impulzusmomentum ( $l=s, \bar{l}=z$ ) összeadásakor  $L$  lehetséges értékei 3, 4, 5, 6 és 7

Ezek együtt éppen az  $L=l+\bar{l}$  irreducibilis ábrázolás karakterét adják. Így tehát a teljes táblázat az

$$L=l-\bar{l}, l-\bar{l}+1, \dots, l+\bar{l}-1, l+\bar{l} \quad (17.E.1)$$

irreducibilis ábrázolások jelenlétére utal.  $l \leq \bar{l}$  esetén az  $E+\bar{E}$  szint a kölcsönhatás folytán  $2l+1$  szintre hasad fel; e szintek pályakvantumszámait (17.E.1) adja meg. Esetünkben tehát  $\mathbf{D}^{(l)}(R) \times \mathbf{D}^{(\bar{l})}(R)$  irreducibilis összetevői a  $\mathbf{D}^{(L)}$ -ek, ahol (17.E.1) szerint képezzük  $L$ -et. Ha  $l < \bar{l}$ , akkor  $l$  és  $\bar{l}$  szerepe felcserélődik, így általában  $L$  értékeire kapjuk, hogy

$$L=|\bar{l}-l|, |\bar{l}-l|+1, \dots, l+\bar{l}-1, l+\bar{l}. \quad (17.14)$$

Ez a „vektorösszeadási modell” (lásd a 9. ábrát) igen általános érvényű, az egész spektroszkópia területén alapvető jelentőségű. A két összetevő rendszer nem áll szükségképpen csupán egyetlen elektrontól<sup>13</sup>, hanem maga is összetett lehet. A vektorösszeadási modell — amint azt látni fogjuk — a spin és pályakvantumszám összetevésekor (az eredményül adódó  $L$ -et teljes kvantumszámmak nevezzük), valamint a teljes kvantumszám és a magspin összeadásakor is alkalmazható.

7. Tudjuk most már, hogy a  $\mathbf{D}^{(l)} \times \mathbf{D}^{(\bar{l})}$  ábrázolás a

$$\begin{pmatrix} \mathbf{D}^{(l-\bar{l})} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{D}^{(l-\bar{l}+1)} & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \mathbf{D}^{(l+\bar{l}-1)} & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \mathbf{D}^{(l+\bar{l})} \end{pmatrix} = \mathbf{M}(R) \quad (17.15)$$

<sup>13</sup> Valóban az itt megadott egyszerű formában a modell nem vet fényt a két elektron esetének minden részletére tekintve, hogy nem ad számot arról, hogy a részecskék azonosak.

ábrázolással ekvivalens; ezt a rövideg kedvéért  $\mathbf{M}(R)$ -rel jelöljük. Léteznie kell tehát olyan  $\mathbf{S}$  mátrixnak, amely ezeket egymásba transzformálja:

$$\mathbf{D}^{(l)}(R) \times \mathbf{D}^{(\bar{l})}(R) = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{M}(R) \mathbf{S}. \quad (17.16)$$

Mivel mind  $\mathbf{M}(R)$ , mind pedig  $\mathbf{D}^{(l)} \times \mathbf{D}^{(\bar{l})}$  unitér, feltehetjük, hogy  $\mathbf{S}$  unitér, vagyis hogy  $\mathbf{S}^{-1} = \mathbf{S}^\dagger$  (lásd az 1a. tételt; 9. fejezet 86. o.).

Az  $\mathbf{S}$  mátrix tágabb értelemben négyzetes, ahogy azt a 2. fejezetben megtárgyaltuk.  $\mathbf{D}^{(l)} \times \mathbf{D}^{(\bar{l})}$  sorait és oszlopait két index jelöli  $\mu$  és  $\nu$ , ezeknek kell tehát  $\mathbf{S}$  oszlopait is jelölniük.  $\mathbf{M}(R)$  sorai és oszlopai ugyancsak két indexet hordoznak, ezeknek jellege azonban más: az első index,  $L$ , azt mutatja, hogy melyik  $\mathbf{D}^{(l)}$  ábrázolás tűnik fel a sorban, a második  $m$  pedig, hogy eme ábrázolás melyik soráról van szó.  $\mathbf{M}(R)$  elemei tehát

$$M(R)_{L'm';Lm} = \delta_{LL'} D^{(L)}(R)_{m'm}. \quad (17.17)$$

$\mathbf{S}$  oszlopait tehát az  $L$  és  $m$  indexszel kell jelölnünk;  $L|\bar{l}$ -től  $(L+\bar{l})$ -ig,  $m$  pedig  $-L$ -től  $L$ -ig fut. (17.16)-ot részletesen kiírva

$$D^{(l)}(R)_{\mu'\mu} D^{(\bar{l})}(R)_{\nu'\nu} = \sum_{m'm} \sum_L S_{Lm';\mu'\nu'}^* D^{(L)}(R)_{m'm} S_{Lm;\mu\nu}^* \quad (17.16a)$$

Az  $\mathbf{S}$  mátrix jelentősége abban rejlik, hogy a  $\psi_\mu \bar{\psi}_\nu$  szorzatok olyan

$$\Psi_m^L = \sum_{\mu\nu} S_{Lm;\mu\nu}^* \psi_\mu \bar{\psi}_\nu \quad (17.18)$$

lineáris kombinációit határozza meg, amelyek a rendszert (beleértve az  $l$  és  $\bar{l}$  impulzusmomentum kölcsönhatását is) invariánsan hagyó  $\mathbf{P}_R \bar{\mathbf{P}}_R$  operációk során irreducibilis ábrázolások szerint transzformálódnak.  $\Psi_m^L$  a következőképp transzformálódik:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_R \bar{\mathbf{P}}_R \Psi_m^L &= \sum S_{Lm;\mu\nu}^* \mathbf{P}_R \psi_\mu \bar{\mathbf{P}}_R \bar{\psi}_\nu = \\ &= \sum_{\mu\nu} \sum_{\mu'\nu'} S_{Lm;\mu\nu}^* D^{(l)}(R)_{\mu'\mu} D^{(\bar{l})}(R)_{\nu'\nu} \psi_{\mu'} \bar{\psi}_{\nu'} = \\ &= \sum_{\mu\mu'} \sum_{\nu\nu'} \sum_{L'm'} S_{Lm;\mu\nu}^* D^{(l)}(R)_{\mu'\mu} D^{(\bar{l})}(R)_{\nu'\nu} S_{L'm';\mu'\nu'} \Psi_{m'}^{L'} = \\ &= \sum_{L'm'} [\mathbf{S} \cdot \mathbf{D}^{(l)}(R) \times \mathbf{D}^{(\bar{l})}(R) \cdot \mathbf{S}^{-1}]_{L'm';Lm} \Psi_{m'}^{L'} = \\ &= \sum_{L'm'} M(R)_{L'm';Lm} \Psi_{m'}^{L'} = \sum_{m'} D^{(L)}(R)_{m'm} \Psi_{m'}^L. \end{aligned} \quad (17.19)$$

Ezek tehát a perturbált összetett rendszer első közelítésében sajátfüggvényként használhatók (ezek az 5. fejezetben említett „helyes lineáris kombinációk”).

Az  $S^*_{Lm;\mu\nu}$  együtthatók meghatározásához alkalmazzuk a  $\mathbf{P}_R \bar{\mathbf{P}}_R$  operátort (17.18)-ra, legyen  $R$   $\alpha$  szögű forgatás a  $Z$  tengely körül. A bal oldal ennek során  $\exp(+im\alpha)$ -val szorzódik, ennek tehát a jobb oldalra is igaznak kell lennie.

$$\begin{aligned} \sum_{\mu\nu} S^*_{Lm;\mu\nu} e^{im\alpha} \psi_{\mu} \bar{\psi}_{\nu} &= \sum_{\mu\nu} S^*_{Lm;\mu\nu} \mathbf{P}_R \psi_{\mu} \mathbf{P}_R \bar{\psi}_{\nu} = \\ &= \sum_{\mu\nu} S^*_{Lm;\mu\nu} e^{i\mu\alpha} e^{i\nu\alpha} \psi_{\mu} \bar{\psi}_{\nu}. \end{aligned} \quad (17.20)$$

Ezért a  $\psi_{\mu} \bar{\psi}_{\nu}$ -ok lineáris függetlensége miatt

$$S_{Lm;\mu\nu} = 0, \quad \text{ha} \quad m \neq \mu + \nu. \quad (17.20a)$$

(17.16a) ugyanerre az eredményre vezet, ha az ábrázolási együtthatók függését  $\alpha$ -tól és  $\gamma$ -tól (15.8) alapján feltüntetjük, és az  $\alpha$ -tól és  $\gamma$ -tól egyformán függő tagokat egymással egyenlővé tesszük. Legyen<sup>14</sup>

$$S_{L,\mu+\nu;\mu\nu} = S_{L\mu\nu}, \quad (17.20b)$$

ekkor (17.16a) átírható:

$$\mathbf{D}^{(l)}(R)_{\mu'\mu} \mathbf{D}^{(\bar{l})}(R)_{\nu'\nu} = \sum_{L=|\bar{l}-l|}^{l+\bar{l}} S^*_{L\mu'\nu'} \mathbf{D}^{(L)}(R)_{\mu'+\nu';\mu+\nu} S_{L\mu\nu}. \quad (17.16b)$$

(17.16) nem határozza meg az  $S$  mátrixot egyértelműen. Mivel  $\mathbf{M}(R)$  felcserélhető az

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} \omega_{|l-\bar{l}|} \cdot \mathbf{1} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \omega_{|l-\bar{l}|+1} \mathbf{1} & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \omega_{l+\bar{l}-1} \cdot \mathbf{1} & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \omega_{l+\bar{l}} \cdot \mathbf{1} \end{pmatrix}$$

$$u_{L',m';Lm} = \omega_L \delta_{L'L} \delta_{m'm}$$

mátrixszal, (17.16) jobb oldala nem változik meg, ha  $S$  helyébe  $\mathbf{uS}$ -et írunk. Ahhoz, hogy  $\mathbf{uS}$  unitér maradjon  $\mathbf{u}$ -nak is unitérnek kell lennie, ez pedig akkor teljesül, ha valamennyi  $\omega$  abszolútértéke 1. Így az  $S$  helyébe kerülő  $\mathbf{uS}$  elemei

$$(\mathbf{uS})_{Lm;\mu\nu} = \omega_L S_{Lm;\mu\nu}.$$

<sup>14</sup> Az  $S$  mátrix  $S_{L,\mu+\nu;\mu\nu} = S_{L\mu\nu}^{(\bar{l})}$  elemei, amelyekkel a  $\psi^{(l)} \bar{\psi}^{(\bar{l})}$  szorzatokból  $\mathbf{D}^{(L)}$  szerint transzformálódó lineáris kombinációk készíthetők, a „vektorcsatolásai együtthatók” nevet viselik. CONDON és SHORTLEY ezeket így jelöli:  $s_{L\mu\nu}^{(\bar{l})} = (\bar{l}\mu\nu | \bar{l}l m)$ . E. U. CONDON, G. H. SHORTLEY: The Theory of Atomic Spectra. Cambridge Univ. Press, London és New York, 1953.)

Az  $\omega$ -k megfelelő megválasztásával mindig elérhető, hogy

$$S_{L,l-\bar{l};l,-\bar{l}} = s_{L,l-\bar{l}} = |s_{L,l,-\bar{l}}|, \quad (17.21)$$

valós és pozitív legyen. A továbbiakban feltesszük, hogy ez teljesül<sup>15</sup>. Szorozzuk meg most (17.16b)-t  $D^{(L')}(R)_{\mu'+\nu,\mu+\nu}^*$ -vel, és integráljuk a teljes csoportra. Az ábrázolási együtthatók ortogonalitási összefüggései miatt a jobb oldalon csupán egyetlen tag marad; legyen  $L' = L$  (és  $h = fdR$ ), ekkor kapjuk, hogy

$$\int D^{(l)}(R)_{\mu'\mu} D^{(l)}(R)_{\nu'\nu} D^{(L)}(R)_{\mu'+\nu,\mu+\nu} dR = h \frac{s_{L\mu'\nu'}^* s_{L\mu\nu}}{2L+1}. \quad (17.22)$$

Ahhoz, hogy  $s_{L\mu\nu}$ -t meghatározzuk, nem kell a (17.22)-ben az integrált minden lehetséges  $L, \mu', \nu', \mu$  és  $\nu$  értékre kiszámítani; elég, ha azt egyetlen  $\mu', \nu'$  párra és minden  $L, \mu$  és  $\nu$  (és  $l, l$ ) értékre ismerjük. A képleteket úgy tehetjük a legegyszerűbbé, ha a  $\mu' = l$  és  $\nu' = -l$  esetet vesszük; így (15.27a) és (15.27b) szerint kapjuk

$$\begin{aligned} & \sqrt{\binom{2l}{l-\mu} \binom{2l}{l-\nu}} \sum (-1)^{\kappa+l+\nu} \times \\ & \times \frac{\sqrt{(L+\mu+\nu)!(L-\mu-\nu)!(L+l-l)!(L-l+l)!}}{(L-l+l-\kappa)!(L+\mu+\nu-\kappa)!\kappa!(\kappa+l-l-\mu-\nu)!} \times \\ & \times \int \cos^{2L+2\bar{l}+2\mu-2\kappa} \frac{1}{2} \beta \cdot \sin^{2l-2\mu+2\kappa} \frac{1}{2} \beta dR = \\ & = h \frac{s_{L,l,-l}^* s_{L\mu\nu}}{2L+1} \end{aligned} \quad (17.23)$$

( $\alpha$  és  $\gamma$  kiesett, amint azt el is vártuk).

Most az

$$\int \cos^{2a} \frac{1}{2} \beta \sin^{2b} \frac{1}{2} \beta dR$$

alakú integrált kell kiszámítani. Az ábrázolási együtthatók ortogonalitási összefüggései ezeket is szolgáltatják:

$$\begin{aligned} \frac{h}{2j+1} &= \int |D^{(j)}(R)_{j\mu}|^2 dR = \\ &= \binom{2j}{j-\mu} \int \cos^{2j+2\mu} \frac{1}{2} \beta \sin^{2j-2\mu} \frac{1}{2} \beta dR. \end{aligned}$$

<sup>15</sup> E választás olyan vektorcsatolási együtthatókat eredményez, amelyeket E. U. CONDON, G. H. SHORTLEY, M. E. ROSE, valamint G. RACAHA (Phys. Rev. **62**, 438 (1942); Phys. Rev. **63**, 367 (1943) használ. Amint azt később megmutatjuk eme együtthatók valósak, s így  $S$ -et  $S^*$ -tól nem kell megkülönböztetni.

Legyen  $j + \mu = a$  és  $j - \mu = b$ , ekkor

$$\int \cos^{2a} \frac{1}{2} \beta \sin^{2b} \frac{1}{2} \beta \, dR = g \frac{b!a!}{(a+b+1)!} \quad (17.24)$$

Ezt (17.23)-ba helyettesítve kapjuk:

$$\sum_{\kappa} (-1)^{\kappa + \bar{l} + \nu} \frac{\sqrt{(2l)!(2l)!(L + \mu + \nu)!(L - \mu - \nu)!(L + l - l)!(L - l + l)!}}{(L + l + l + 1)! \sqrt{(l - \mu)!(l + \mu)!(l - \nu)!(l + \nu)!}} \times \\ \times \frac{(L + l + \mu - \kappa)!(l - \mu + \kappa)!(2L + 1)!}{(L - l + l - \kappa)!(L + \mu + \nu - \kappa)!(\kappa + l - l - \mu - \nu)! \kappa!} = s_{L,l,-\bar{l}}^* s_{L,\mu\nu} \quad (17.25)$$

$s_{L,l,-\bar{l}}$  adódik, ha  $\mu = l$ ,  $\nu = -l$ :

$$\frac{2L + 1}{(L + l + l + 1)!} \sum_{\kappa} \frac{(-1) (L + l - l)!(L - l + l)!(L + l + l - \kappa)!}{(L - l + l - \kappa)!(L + l - l - \kappa)! \kappa!} = \\ = |s_{L,l,-\bar{l}}|^2 = (s_{L,l,-\bar{l}})^2. \quad (17.25a)$$

Az egyenlőségsor utolsó tagjánál felhasználtuk (17.21)-et. A fejezet függelékében beláthatjuk, hogy

$$\sum_{\kappa} (-1)^{\kappa} \binom{L - l + l}{\kappa} \frac{(L + l + l - \kappa)!}{(L + l - l - \kappa)!} = (2l)! \binom{2l}{L + l - l}. \quad (17.26)$$

Ezt (17.25a)-ban felhasználva végül az

$$s_{L,l,-\bar{l}} = \sqrt{\frac{(2L + 1)(2l)!(2l)!}{(L + l + l + 1)!(l + l - l)!}} \quad (17.27a)$$

egyenlőséget kapjuk, és (17.25) segítségével azt is, hogy

$$s_{L,\mu\nu}^{(\bar{l})} = \frac{\sqrt{(L + l - l)!(L - l + l)!(l + l - L)!(L + \mu + \nu)!(L - \mu - \nu)!}}{\sqrt{(L + l + l + 1)!(l - \mu)!(l + \mu)!(l - \nu)!(l + \nu)!}} \times \\ \times \sum_{\kappa} \frac{(-1)^{\kappa + \bar{l} + \nu} \sqrt{2L + 1} (L + l + \mu - \kappa)!(l - \mu + \kappa)!}{(L - l + l - \kappa)!(L + \mu + \nu - \kappa)! \kappa! (\kappa + l - l - \mu - \nu)!} \quad (17.27)$$

Ez az egyenlet mutatja: a (17.21) megállapodás valóban biztosítja, hogy minden  $s_{L,\mu\nu}$  valós,  $s_{L,\mu\nu}^* = s_{L,\mu\nu}$ .

Eme egyenletben a  $\kappa$ -ra történő összegezés a (15.27)-hez hasonlóan valamennyi egész számra kiterjed; a nevező faktoriálisainak pólusai értékét a 0 és  $l - l + \mu + \nu$  közül a nagyobbik és a  $L + \mu + \nu$  és a  $L - l + l$  közül a kisebbik szám közé korlátozzák, ugyanúgy, ahogy az a 15. fejezetben történt. Az  $s$  mennyiségek az  $L$ ,  $\mu$  és  $\nu$  indexeken kívül még a két  $l$  és  $l$  számtól is függenek, ezek azt jelzik, hogy melyik

$\mathbf{D}^{(l)} \times \mathbf{D}^{(\bar{l})}$  direkt szorzatot lehet az  $s$ -ekkel kiredukálni. Az  $s$  lényegében változatlan marad<sup>16</sup>, ha  $l$ -t  $\bar{l}$ -sal és ugyanakkor  $\mu$ -t  $\nu$ -vel felcseréljük. Ez (17.27)-ből nem látható be azonnal, mert az összegezés  $\kappa$ -ra nem lehet zárt alakban megadni. Ha  $\mu + \nu = L$ , akkor az egész összegnek csupán egyetlen tagja nem tűnik el ( $\kappa = L - l + \bar{l}$ ). Ilyenkor

$$s_{L,\mu,L-\mu}^{(\bar{l})} = (-1)^{l-\mu} \sqrt{\frac{(2L+1)!(l+\bar{l}-L)!(l+\mu)!(L+l-\mu)!}{(L+l+\bar{l}+1)!(L+l-\bar{l})!(L-l+\bar{l})!(l-\mu)!(l-L+\mu)!}}. \quad (17.27b)$$

Megadjuk  $S$  unitaritásából az  $s$ -re vonatkozó részletes egyenletet is. (A (17.27) egyenlet szerint  $S$  valós.)

$$\sum_{\mu} s_{L,\mu,m-\mu}^{(\bar{l})} s_{L',\mu,m-\mu}^{(\bar{l})} = \delta_{LL'}, \quad (17.28)$$

$$\sum_L s_{L,\mu,m-\mu}^{(\bar{l})} s_{L',\mu',m-\mu'}^{(\bar{l})} = \delta_{\mu\mu'}.$$

8. Meghatároztuk a (17.16b)-ben és (17.18)-ban előbukkanó összes együtthatót.

$$\Psi_m^L = \sum_{\mu} s_{L,\mu,m-\mu}^{(\bar{l})} \psi_{\mu} \bar{\psi}_{m-\mu}. \quad (17.18a)$$

Felhívjuk a figyelmet arra, hogy (17.18a)-ban olyan (és valóban az egyik legfontosabb) esettel találkozunk, amikor a perturbációs eljárás első közelítésének helyes lineáris kombinációját kizárólag általános megfontolásokból meg lehet határozni. A (17.18a) egyenlet teljesen általánosan érvényes minden olyan perturbációra, amelynél a térben nincs kitüntetett irány. Ez abból következik, hogy kezdetről fogva tudtuk: a helyes lineáris kombinációk mind „egy irreducibilis ábrázolás egy sorához” tartoznak, és hogy csupán egyetlen olyan lineáris kombináció készíthető a (17.9) függvényből, amely  $\mathbf{D}^{(L)}$ -nek  $m$  sorához tartozik. Ez is csak akkor, ha  $L$   $|l - \bar{l}|$  és  $l + \bar{l}$  közé esik. Másrészt, ha a perturbálatlan problémában ugyanannak a sajátértéknek (17.9)-en kívül más sajátfüggvényei is vannak, akkor előfordulhat, hogy több kívánt tulajdonságú lineáris kombináció lehetséges. A „helyes” csupán ezeknek és nem másoknak a lineáris kombinációja.

A (17.16b) képletnek számos alkalmazása van. Először is nemcsak a valódi ( $l$  egész) ábrázolások esetében, hanem a 15. fejezet kétértékű ábrázolásaira is érvényes. Többek között a multipllett vonalak intenzitásképleteit és Zeeman-komponenseket is (23. fejezet) tartalmazza.

<sup>16</sup>  $l$  és  $\bar{l}$  nem pontosan egyforma módon szerepelnek (17.21)-ben, így  $s_{L,\mu\nu}^{(\bar{l})} = (-1)^{l+l-L} s_{L,\mu\nu}^{(\bar{l})}$

Világos, hogy  $D^{(l)}(R)_{\mu',\mu} D^{(l)}(R)_{\nu',\nu}$  kifejezhető az ábrázolási együtthatók szerint, hiszen ezek teljes függvényrendszert alkotnak. Az is világos, hogy (17.16b) csak valamely ábrázolás  $(\mu' + \nu')$  sorában és  $(\mu + \nu)$  oszlopában elhelyezkedő együtthatókat tartalmazhatja, mert csupán ezeknek van teljes  $\alpha$  és  $\gamma$  függésük. (17.16b) azt is mutatja, hogy  $L$ -nek  $|l - l|$  és  $l + l$  közé kell esnie. Ha  $l$  és  $l$  mindketten egészek, vagy félegeszek, akkor (17.16b)-ben minden  $L$  egész. Ha viszont az egyik egész és a másik félegész, akkor minden  $L$  félegész. Az összegezés mindig egész lépésekben történik az alsótól a felső határig.

$l=0$  esetén (17.16b) trivialis;  $l = \frac{1}{2}$  és  $l=1$ -re az  $s_{L,\mu\nu}^{(l)}$ -ket táblázatokba foglaltuk<sup>17</sup>.

### III. táblázat

Az  $s_{L,\mu\nu}^{(l)}$  vektorcsatolási együtthatók

$L$	$\nu = -\frac{1}{2}$	$\nu = +\frac{1}{2}$
$l - \frac{1}{2}$	$\frac{\sqrt{l+\mu}}{\sqrt{2l+1}}$	$-\frac{\sqrt{l-\mu}}{\sqrt{2l+1}}$
$l + \frac{1}{2}$	$\frac{\sqrt{l-\mu+1}}{\sqrt{2l+1}}$	$\frac{\sqrt{l+\mu+1}}{\sqrt{2l+1}}$

### IV. táblázat

Az  $s_{L,\mu\nu}^{(l)}$  vektorcsatolási együtthatók

$L$	$\nu = -1$	$\nu = 0$	$\nu = +1$
$l - 1$	$\sqrt{\frac{(l+\mu)(l+\mu-1)}{2l(2l+1)}}$	$-\sqrt{\frac{(l-\mu)(l+\mu)}{l(2l+1)}}$	$\sqrt{\frac{(l-\mu-1)(l-\mu)}{2l(2l+1)}}$
$l$	$\sqrt{\frac{(l-\mu+1)(l+\mu)}{2l(2l+1)}}$	$\frac{\mu}{\sqrt{l(l+1)}}$	$-\sqrt{\frac{(l+\mu+1)(l-\mu)}{2l(l+1)}}$
$l + 1$	$\sqrt{\frac{(l-\mu+1)(l-\mu+2)}{(2l+1)(2l+2)}}$	$\sqrt{\frac{(l-\mu+1)(l+\mu+1)}{(2l+1)(l+1)}}$	$\sqrt{\frac{(l+\mu+1)(l+\mu+2)}{(2l+1)(2l+2)}}$

<sup>17</sup>  $s_{L,\mu\nu}^{(l)}$  emlékeztünkbe véshető, ha megjegyezzük, hogy  $|\mu| > l$  vagy  $(\mu + \nu) > L$  esetén eltűnik. Ekkor (17.22)-ben az egyik ábrázolási együttható értelmetlen.

ÖSSZEFÜGGÉS A BINOMIÁLIS EGYÜTTHATÓK KÖZÖTT

(17.26) igazolásához induljunk ki a

$$\sum_{\kappa} \binom{a}{\kappa} \binom{b}{c-\kappa} = \binom{a+b}{c} \quad (17.29)$$

azonosságból. A bal oldalon,  $(1+x)^a$ -ban  $x^\kappa$  együtthatóját szoroztuk meg  $(1+x)^b$ -ből  $x^{c-\kappa}$ -együtthatójával és összegeztük  $\kappa$ -ra; ez nem egyéb, mint  $x^c$  együtthatója  $(1+x)^a(1+x)^b = (1+x)^{a+b}$ -ben. A jobb oldalon éppen ez a kifejezés található. Legyen  $a$  pozitív;  $b$  lehet negatív vagy pozitív. Ha továbbá  $u < 0$ , akkor

$$\begin{aligned} \binom{u}{v} &= \frac{u(u-1)\dots(u-v+2)(u-v+1)}{1 \cdot 2 \dots (v-1)v} = \\ &= (-1)^v \frac{(v-u-1)(v-u-2)\dots(1-u)(-u)}{1 \cdot 2 \dots (v-1)v} = \\ &= (-1)^v \binom{v-u-1}{v}. \end{aligned} \quad (17.30)$$

(17.26)-ban  $(L+l-l-\kappa)$ -t  $v$ -vel azonosítva és (17.30)-at felhasználva kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} &\sum_{\kappa} (-1)^\kappa \binom{L-l+l}{\kappa} \binom{L+l+l-\kappa}{L+l-l-\kappa} (2l)! = \\ &= \sum_{\kappa} (-1)^{L+l-\bar{l}} (2l)! \binom{L-l+l}{\kappa} \binom{-2l-1}{L+l-l-\kappa} = \\ &= (-1)^{L+l-\bar{l}} (2l)! \binom{L-l-l-1}{L+l-l} = (2l)! \binom{2l}{L+l-l}. \end{aligned}$$

Így igazoltuk (17.26)-t. (17.29)-et az utolsó sor első részének lehozásához, (17.30)-at pedig a végeredmény felírásához használtuk fel.



## 18. KIVÁLASZTÁSI SZABÁLYOK ÉS A SZÍNKÉPVONALAK FELHASADÁSA

1. A 6. fejezetben az időfüggő *Schrödinger*-egyenlet segítségével kiszámítottuk, hogy mekkora a  $\psi_F$  stacionárius állapot gerjesztődésének  $|a_F(t)|^2 = |b(t)|^2$  valószínűsége  $X$  irányban polarizált,  $I$  intenzitású fény beesésekor. ( $I$  itt az egységnyi  $d\omega = 2\pi d\nu$  frekvenciaintervallumra jutó energiát jelenti.) Azt az eredményt kaptuk, hogy ha az atom kezdetben teljesen a  $\psi_E$  stacionárius állapotban volt, akkor a gerjesztődés valószínűsége (6.17) és (6.6) szerint

$$|a_F(t)|^2 = B_{EF} I t = \frac{2\pi e^2}{\hbar^2} |X_{FE}|^2 I t, \quad (18.1)$$

ahol a

$$X_{FE} = (\psi_F, (x_1 + x_2 + \dots + x_n) \psi_E) \quad (18.2a)$$

mátrixelem a „dipólusmomentum  $X$  komponense” az  $E \rightarrow F$  átmenetre. Ha a fény  $Y$  vagy  $Z$  irányban lenne polarizálva, akkor (18.1)-ben  $X_{FE}$  helyett

$$Y_{FE} = (\psi_F, (y_1 + y_2 + \dots + y_n) \psi_E), \quad (18.2b)$$

illetőleg

$$Z_{FE} = (\psi_F, (z_1 + z_2 + \dots + z_n) \psi_E) \quad (18.2c)$$

szerepelne, ha pedig az  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$  iránykoszinuszokkal meghatározott irányban volna polarizálva, akkor a megfelelő kifejezés

$$\alpha_1 X_{FE} + \alpha_2 Y_{FE} + \alpha_3 Z_{FE} \quad (18.2)$$

volna.

EINSTEIN jól ismert megfontolásait<sup>1</sup> követve kiszámítható e mátrixelemekből annak  $A_{FE} \cdot dt$  valószínűsége, hogy a  $\psi_F$  gerjesztett állapotú atom  $dt$  idő alatt spon-tán kisugárzással átmenjen a  $\psi_E$  állapotba. Azt a mennyiséget, amelyet az

$$A_{FE} = \frac{4e^2 \omega^3}{3\hbar c^3} (|X_{FE}|^2 + |Y_{FE}|^2 + |Z_{FE}|^2) \quad (18.1a)$$

képlet ad meg, nevezik „átmeneti valószínűség”-nek.

<sup>1</sup> A. EINSTEIN, Verhandl. deut. physik. Ges. 318 o. (1916); Physik. Z. 121 o. (1917).

Ha az  $(F-E)/\hbar$  frekvenciájú színkép-vonal hiányzik a színképből, noha más vonalak előfordulásából megállapítható, hogy a  $\psi_F$  állapotban van az atom, akkor arra következtethetünk, hogy a (18.2a), (18.2b) és (18.2c) kifejezések eltűnnek. Az esetek óriási többségében e „kiválasztási szabályok” a vizsgált sajátfüggvények transzformációs tulajdonságaikból következnek. A kiválasztási szabályok három fajtája a sajátfüggvényeknek a szimmetrikus csoporttal, a háromdimenziós forgáscsoporttal és a tükrözési csoporttal szemben mutatott transzformációs tulajdonságainak felel meg.

Meg kell azonban jegyeznünk, hogy az  $F \rightarrow E$  vonal teljes hiánya nem következik szükségképpen (18.2) eltűnéséből. (18.1) levezetések az a lényeges, de nem szigorúan igaz feltevést tettük, hogy az atom mérete elhanyagolható a fény hullámhosszához képest. A számítást úgy végeztük el, mintha a fény perturbációs potenciálja a fénysugár irányában állandó volna, tehát lényegesen csak a hullámhossz nagyságrendjébe eső távolságon változik meg. Ha figyelembe vesszük, hogy a potenciál a fénysugár irányában valójában szinuszosan változik, akkor az átmeneti valószínűsége (tehát az élettartamra is) kissé más kifejezést kapunk. (18.1)-ben  $B_{EF}$ -hez egy  $B'$  korrekciós tagot kell hozzáadni.

A (18.1)-ben, vagy (18.1a)-ban kiszámolt átmeneti valószínűség a dipólussugárzás esete; a korrekció a kvadrupólus- és magasabb momentumokról ad számot. Ez az atomméret/hullámhossz négyzetének arányában tehát körülbelül  $10^7$ -szer kisebb, mint a dipólussugárzásból adódó  $B_{EF}$ , így elhanyagolható  $B_{EF}$ -hez képest, ha (18.2) nem tűnik el. Az olyan átmenetek, amelyeknél (18.2) zérus, mégsem teljesen tiltottak, hanem csupán a dipólusátmenetknél jóval gyengébbek: A tiszta kvadrupólussugárzás intenzitásának meghatározásakor a lényeges mennyiség az

$$\frac{\omega}{c} (\psi_F, (x_1 y_1 + x_2 y_2 + \dots + x_n y_n) \psi_E) \quad (18.3)$$

kvadrupólus-mátrixelem. (18.1)-ben ezt kell  $X_{FE}$  helyébe írni, ha a kvadrupólusátmenet valószínűségét akarjuk megkapni.<sup>2</sup>

A. Dipólusátmenet nem fordul elő különböző multiplicitású szintek között. Különböző  $(2S+1)$  multiplicitású szintek a szimmetrikus csoportnak különböző ábrázolásaihoz tartoznak. A  $(x_1 + x_2 + \dots + x_n)$ -nel való szorzás az elektronok permutációival szemben szimmetrikus operáció, ezért a 12. fejezet értelmében a (18.2) skalárszorzatnak el kell tűnnie. Ugyanilyen okból a kvadrupólus- és magasabb momentumú sugárzás is eltűnik.

Kísérleti tapasztalat, hogy az úgynevezett *interkombinációs tilalom csak alacsony atomszámú elemekre teljesül jól*. Nehezebb elemeknél viszonylag erős vonalak fordulnak elő különböző multiplicitású szintek közötti átmenetknél is. Az ilyen átmenetek — amelyeknek valószínűsége az elektronok számának növekedtével rohamosan nő — oka az, hogy a *Schrödinger*-egyenlet az elektron mágneses momentumából adódó további tagokat is tartalmaz.

<sup>2</sup> A kvadrupólussugárzást a kvantummechanikában kimerítően először A. RUBINOWICZ tárgyalta. Lásd például Z. Physik. **61**, 338 (1930); **65**, 662 (1930).

**B.** Az  $(x_1 + x_2 + \dots + x_n)$ -nel való szorzás a forgatásokkal szemben nem szimmetriaoperáció, ezért az  $L$  pályakvantumszámra vonatkozó kiválasztási szabály más lesz, mint  $S$  esetében. Ha  $\psi_E$  pályakvantumszáma  $L$ , akkor az  $(x_1 + x_2 + \dots + x_n)\psi_E$  szorzat második tényezője  $\mathbf{D}^{(L)}$ -hez, az első tényező mint vektorkomponens  $\mathbf{D}^{(1)}$ -hez tartozik.

Tartozzanak az  $f_{\lambda}^{(\bar{L})}$  függvények  $\mathbf{D}^{(\bar{L})}$ -nek  $\bar{\lambda}$  sorához és a  $\psi_{\lambda}^{(L)}$  függvények pedig  $\mathbf{D}^{(L)}$ -nek  $\lambda$  sorához. Ekkor az összes párok  $(2\bar{L}+1)(2L+1)$  szorzata  $\mathbf{D}^{(\bar{L})} \times \mathbf{D}^{(L)}$  szerint transzformálódik. (lásd a 17. fejezet hasonló megfontolását).

$$\mathbf{P}_R f_{\lambda}^{(\bar{L})} \psi_{\lambda}^{(L)} = \mathbf{P}_R f_{\lambda}^{(\bar{L})} \cdot \mathbf{P}_R \psi_{\lambda}^{(L)} = \sum_{\lambda\lambda'} \mathbf{D}^{(\bar{L})}(R)_{\lambda\lambda'} \mathbf{D}^{(L)}(R)_{\lambda\lambda'} f_{\lambda}^{(\bar{L})} \psi_{\lambda}^{(L)}.$$

A  $\mathbf{D}^{(\bar{L})} \times \mathbf{D}^{(L)}$  szorzatot redukáló mátrix segítségével az  $f_{\lambda}^{(\bar{L})} \psi_{\lambda}^{(L)}$ -ekből olyan  $F_{\mu}^{(k)}$  lineáris kombinációk készíthetők, amelyek  $\mathbf{D}^{(\bar{L})} \times \mathbf{D}^{(L)}$  irreducibilis  $\mathbf{D}^{(k)}$  komponenséhez tartoznak. Megfordítva, az  $f_{\lambda}^{(\bar{L})} \psi_{\lambda}^{(L)}$  függvények az  $F_{\mu}^{(k)}$ -val a reciprok  $S^{-1}$  mátrix segítségével kifejezhetők.

Esetünkben  $L=1$  és  $\mathbf{D}^{(1)} \times \mathbf{D}^{(L)}$  irreducibilis komponensei  $L \neq 0$  esetre a következők:

$$\mathbf{D}^{(L-1)}, \mathbf{D}^{(L)}, \mathbf{D}^{(L+1)}. \quad (18.E.1)$$

Az  $(x_1 + x_2 + \dots + x_n)\psi_E$  szorzat tehát három olyan függvény összegeként írható fel, hogy a (18.E.1) ábrázolások mindegyikéhez hozzátartozik az egyik. Ha az  $\psi_{\lambda}$  függvény  $L'$  pályakvantumszáma  $L-1$ ,  $L$  és  $L+1$  közül az egyikkel sem egyenlő, akkor a (18.2) skalárszorzat mindhárom része eltűnik. Spontán dipolsugárzásnál az  $L$  pályakvantumszáma csak  $\pm 1$ -gyel vagy 0-sal változhatik meg.

Ha  $L=0$ , akkor  $(x_1 + x_2 + \dots + x_n)\psi_E$  a  $\mathbf{D}^{(1)}$  ábrázoláshoz tartozik, mivel ekkor  $\mathbf{D}^{(1)} \times \mathbf{D}^{(0)}$  azonos  $\mathbf{D}^{(1)}$ -gyel. Ha tehát  $L' \neq 1$ , akkor (18.2) eltűnik; az  $S$  szintek csak a  $P$  szintekkel ( $L'=1$ ) kombinálódnak; az  $S \rightarrow S$  átmenet tehát tiltott.

E szabályok pontosan csak a könnyű elemekre igazak. Nagyszámú elektron ismét nem alkalmazhatók az elektron mágneses momentumának perturbáló hatása miatt. Az e szabályokat megsértő vonalak nem oly feltűnőek, mint amelyek az interkombináció tilalom ellenére jelennek meg, mert e perturbációk ellenére további olyan kiválasztási szabályok léteznek, amelyek maguk is kizárják az  $L$ -re vonatkozó kiválasztási szabályok által tiltott átmeneteket.

A kvadrupólus- és magasabb momentumok nem szükségképpen tűnnek el ugyanazon feltételek mellett. Valóban, amikor kimutattuk, hogy a dipólusátmenet tiltott, akkor kifejezetten felhasználtuk azt, hogy  $(x_1 + x_2 + \dots + x_n)$  a  $\mathbf{D}^{(1)}$  ábrázoláshoz tartozik. A kvadrupólussugárzás megfelelő kifejezése  $(x_1 y_1 + \dots + x_n y_n)$ . Ez nem  $\mathbf{D}^{(1)}$ -hez, hanem  $\mathbf{D}^{(2)}$ -höz tartozik, következésképpen a pályakvantumszám változása kvadrupólussugárzásnál  $\pm 2$ ,  $\pm 1$  vagy 0. Ezen felül kvadrupólusátmenetnél még mind az  $S \rightarrow P$ , mind pedig a  $S \rightarrow S$  tilos.

C. Dipólussugárzásnál a tükrözési szimmetria mindig megváltozik; páros szint páratlannal, páratlan pedig párossal kombinálódik. Ha ugyanis  $(x, y, z)$ -t  $(-x, -y, -z)$ -vel helyettesítve  $\psi_E$  változatlan marad, akkor  $(x_1 + x_2 + \dots + x_n)\psi_E$  vált előjelet; fordítva: az  $(x_1 + x_2 + \dots + x_n)\psi_E$  változatlan marad az inverziókor, ha  $\psi_E$  előjelet vált, e kifejezés tehát  $\psi_E$ -hez képest ellenkező paritású.

E szabályt, mely szerint a megengedett átmenetekenél a paritás megváltozik, először LAPORT és RUSSEL fedezte fel a komplex színeképek analízisének. A levezetés csak dipólussugárzásra érvényes<sup>3</sup>, másrészt az *elektron mágneses momentumának figyelembevételénél is igaz marad*, továbbá mind a könnyű, mind pedig a nehéz elemekre alkalmazható. Az optikai átmenetek bőséges adathalmazában csak alig ismerünk olyat, amely ellentmond neki. A legismertebb eset a „rebulium” színképében fordul elő; ekkor a kezdeti állapot metastabilis. Ekkor rendkívül hosszú bomlási idő, tehát kicsiny átmeneti valószínűség is realizálódhatik. Ez a helyzet különösen az igen ritka csillagatmoszféra körülményei között fordul elő.

A három kiválasztási szabály valójában a legtöbb átmenetet megtiltja: a multipliett rendszer nem változhatik,  $L$  csak  $\pm 1$ -gyel vagy 0-sal változhatik (0-ból 0-ba is tilos az átmenet), a tükrözési tulajdonságnak (paritásnak) meg kell változnia. Így például a  ${}^3S_+$  szint csak a  ${}^3P_-$ -szal<sup>4</sup>, a  ${}^4D_-$  csak a  ${}^4P_+$ ,  ${}^4D_+$  és  ${}^4F_+$  szintekkel kombinálódhatik<sup>5</sup>, s í. t.

Ismételten hangsúlyozzuk, hogy eddig az elektron mágneses momentumát figyelmen kívül hagytuk, a színképvonalak finomszerkezetét nem indokoltuk meg. A fenti szabályok a vonal valamennyi finomszerkezetű komponensére érvényesek. Az első kettő csak akkor marad érvényes, ha a mágneses momentum hatása kicsiny (kicsiny multipliett felhasadás esetén, vagyis a könnyű elemeknél), az utolsó azonban pontosan igaz; ennek okát később tisztázzuk.

2. Még meg kell vizsgálnunk azt az esetet, amikor külső erőter van jelen; ekkor a potenciális energia szimmetriája elvész. Amint ismeretes, a külső erőterek a vonalakat több komponensre hasítják fel. Mágneses térben ezt *Zeeman*-jelenség néven ismerik, és kísérletileg igen nagy pontossággal megvizsgálták. Az elektromos térben analóg jelenség a *Stark*-felhasadás, ez utóbbi a legtöbb esetben a megfigyelés számára nem olyan könnyen hozzáférhető. Előzetes vizsgálatunkban a részleteket nem tárgyaljuk meg alaposan; a *Zeeman*- és a *Stark*-jelenséget olyan formában fogjuk megkapni, mintha az elektronnak nem lenne mágneses momentuma.

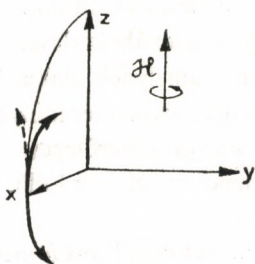
A  $Z$  tengely irányába mutató mágneses tér korlátozza a konfigurációs tér szimmetria csoportját. Minden lehetséges forgatás közül csak a  $Z$  tengely körüli forgatások lesznek szimmetriaoperációk. A  $Z$  és  $-Z$  irány a mágneses térerősség

<sup>3</sup> Kvadrupólusátmenetekre a fordított szabályok érvényesek: a tükrözési jelleg ilyen átmenetekre *nem* változik meg.

<sup>4</sup> Kvadrupólussugárzásra csak a  ${}^3D$  szinttel.

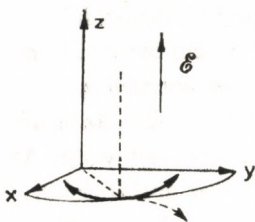
<sup>5</sup> Kvadrupólussugárzásra csak a  ${}^4S_-$ ,  ${}^4P_-$ ,  ${}^4D_-$ ,  ${}^4F_-$ ,  ${}^4G_-$  szintekkel.

vektorának axiális természete miatt egyenértékű marad. Ez biztosítja azt, hogy az  $XY$  sík szimmetriasík. Ugyanezen oknál fogva azonban az  $YZ$  sík például nem szimmetriasík, mert a forgatás értelme ki van tüntetve. Ez a legvilágosabban úgy látható be, hogy az elektron a külső mágneses térben és mag erőterében kialakuló klasszikus pályáját vizsgáljuk meg. Ha a pályát a magon átfektetett és a térre merőleges síkra tükrözzük, akkor klasszikusan megengedett pályát kapunk, viszont a mágneses térrel párhuzamos  $YZ$  síkra végzett tükrözés nem vezet lehetséges pályához (lásd a 10a. ábrát).



10a. ábra

*A mágneses tér a Z irányba mutat, a részecske pályáját az XY síkra tükrözve ismét lehetséges pályát kapunk, az XZ síkra tükrözve azonban nem*



10b. ábra

*Az elektromos tér a Z irányba mutat, a részecskepályát egy Z tengelyen átfektetett síkra tükrözve ismét lehetséges pályát kapunk, az XY síkra tükrözve azonban nem*

Ebből következik, hogy a mágneses tér a probléma inverziós szimmetriáját nem befolyásolja: az inverzió ( $x'_k = -x_k, y'_k = -y_k, z'_k = -z_k$ ) a  $Z$  tengely körül  $\pi$  szögű forgatás ( $x'_k = -x_k, y'_k = -y_k, z'_k = z_k$ ) és az  $XY$  síkra vonatkozó tükrözés ( $x'_k = x_k, y'_k = y_k, z'_k = -z_k$ ) szorzata, így a rendszer szimmetriacsoportjának eleme. A teljes szimmetria a  $Z$  tengely körüli forgatások, a tükrözési csoport (ez csak az inverziót meg az azonosságot tartalmazza) és a szimmetrikus csoport direkt szorzata. Az első két csoport, így a kettő direkt szorzata is *Abel*-csoport.

Még ha a probléma teljes forgásszimmetriáját szét is rombolja a külső tér a sajátértékek és sajátfüggvények közelítőleg ugyanolyan értékűek, illetőleg tulajdonságúak lesznek, mint amilyenek a mágneses tér hiányában voltak, ha a mágneses

tér gyenge, kísérletben megvalósítható erőterében az értelemben mindig gyenge. Az  $L$  pályakvantumszám például határozott marad, rá a szokásos kiválasztási szabályok érvényesek. Ezen felül minden egyes szint természetesen a három szimmetriacsoport egyik irreducibilis ábrázolásához tartozik, még akkor is, ha a külső tér tetszőlegesen erős. Így mindegyik valamilyen  $S$  multipliett szerkezettel rendelkezik és tükrözési tulajdonsággal, éppen úgy, mint az erőtermentes rendszer esetén. Az  $A$  és  $C$  kiválasztási szabály, amely a szimmetrikus és tükrözési csoportnak és a sajátfüggvényeknek a kapcsolatából következik, szigorúan érvényben marad. Új kvantumszám bukkan fel, ez a  $\mu$  mágneses kvantumszám; ez megadja a kétdimenziós valódi forgáscsoport ama  $\exp(+i\mu\varphi)$  ábrázolását, amelyhez a szint tartozik.  $\mu$ -re új kiválasztási szabályt kapunk, amelynek alakja különböző irányban polarizált fényre és más, így számos átmenetet csak a tér irányában polarizált ( $\pi$  komponens), másokat pedig csak az erőter irányára merőlegesen polarizált fény ( $\sigma$  komponens) képes létrehozni. Ez nem meglepő, mivel a tér különböző irányai többé nem egyenértékűek.

A  $Z$  irányban polarizált fényel beindított átmenetek esetében a

$$Z_{FE} = (\psi_F, (z_1 + z_2 + \dots + z_n)\psi_E) \quad (18.2c)$$

kifejezés a jellemző mennyiség. A  $(z_1 + z_2 + \dots + z_n)$ -nel való szorzás a  $Z$  tengely körüli forgatásokra nézve szimmetriaoperáció, így a  $\psi_F$  és  $\psi_E$  állapotoknak ugyanazon  $\exp(+i\mu\varphi)$  ábrázoláshoz kell tartozniuk, mágneses kvantumszámaiknak is meg kell egyezniük, ha (18.2c) nem zérus. *Ha a fény az erőterrel párhuzamosan polarizált, akkor a mágneses kvantumszám nem változik meg.*

Az olyan átmenetnél, amelyben a fény az erőter irányára merőleges ( $\sigma$  komponens),  $X_{FE}$  és  $Y_{FE}$  a meghatározó mennyiség. Az  $(x_1 + x_2 + \dots + x_n) - i(y_1 + y_2 + \dots + y_n)$  mennyiség az  $\exp(-i\varphi)$  ábrázoláshoz, s így az  $[(x_1 + x_2 + \dots + x_n) - i(y_1 + y_2 + \dots + y_n)]\psi_E$  függvény az  $\exp[+i(\mu-1)\varphi]$  ábrázoláshoz tartozik. Ha tehát  $X_{FE} - Y_{FE} = (\psi_F[(x_1 + x_2 + \dots + x_n) - i(y_1 + y_2 + \dots + y_n)]\psi_E)$  nem tűnik el, akkor  $\psi_F$ -nek is az  $\exp[+i(\mu-1)\varphi]$  ábrázoláshoz kell tartoznia. Hasonlóan, ha  $X_{FE} + Y_{FE} = (\psi_F[(x_1 + x_2 + \dots + x_n) + i(y_1 + y_2 + \dots + y_n)]\psi_E)$  nem zérus, akkor  $\psi_F$  szükségképpen az  $\exp[+i(\mu+1)\varphi]$  ábrázoláshoz tartozik, hogy  $X_{FE}$  és  $Y_{FE}$  csak akkor nem zérusok, ha  $\psi_F$  és  $\psi_E$  mágneses kvantumszáma eggyel különbözik. *Az erőter irányára merőlegesen polarizált fény csak olyan átmenetet indukálhat, amelyre  $\Delta\mu = \pm 1$ .*

Vegyük észre, hogy skalárból  $\mu=1$ -es hullámfüggvény lesz, ha egy vektor 1-es komponensének [lásd (15.34)-et] komplex konjugáltjával megszorozzuk. Erre még rendszeres formában a 21. fejezetben visszatérünk.

Emissziós folyamatnál mindez azt jelenti, hogy az erőter irányára merőlegesen kibocsátott fény  $\Delta\mu=0$  átmenet esetén az erőter irányával párhuzamosan,  $\Delta\mu=1$

átmenet esetén pedig arra merőlegesen van polarizálva (transzverzális hatás). Ez egyértelműen lerögzíti a polarizáció irányát, mivel annak még a terjedés irányára is merőlegesnek kell lennie.

Másrészről azonban a mágneses tér irányában kibocsátott fénynek a térre merőlegesen kell polarizálva lennie, ezért csak  $\sigma$  komponens tartalmazhat,  $\pi$ -t nem. Ekkor azonban a  $\sigma$  komponens polarizációját nem határozza meg a „térre merőleges” feltétel. A kísérletből ismert, hogy esetenként jobbra, esetenként pedig balra cirkulárisan polarizált fényt kapunk. Fordítva, ebből arra következtethetünk, hogy egyes átmenetek balra, mások pedig jobbra cirkulárisan polarizált fényvel nem gerjeszthetők<sup>6</sup>. A 6. fejezetben található számoláshoz teljesen hasonlóan belátható, hogy az  $XY$  síkban polarizált fény által gerjesztett átmeneteknél (18.1)-ben  $X_{FE}$  helyett, az  $(1/\sqrt{2})(X_{FE} + iY_{FE})$ , illetőleg az  $(1/\sqrt{2})(X_{FE} - iY_{FE})$  mátrixelemek szerepelnek, attól függően, hogy az elektromos térerősség az  $X$  tengelytől fordul-e át az  $Y$  tengely felé, vagy fordítva. Ha tehát a fény a sztatikus térerősség irányába nézve (vagyis alulról, ha a pozitív  $Z$  tengely felfelé mutat) jobbra cirkulárisan polarizált, akkor olyan átmenetet indukál, amelyben  $\mu$  eggyel nő; ha balra cirkulárisan polarizált, akkor olyat, amelyben  $\mu$  eggyel csökken. Fordítva, ha spontán emisszió során  $\mu$  eggyel csökken, akkor a kibocsátott fény (ugyanabból az irányból nézve) jobbra, ha eggyel nő, akkor balra cirkulárisan polarizált.

3. Szemeljük ki a rendszer valamely szintjét eltűnő térerősség esetén. Vizsgáljuk meg, hogy a mágneses tér bekapcsolásakor az hogyan fog viselkedni. A zérus erőterű rendszer  $E_{SLw}$  szintje a mágneses térben felhasad, az eredeti szintből számos új keletkezik. Ez azonban az  $S$  multiplett rendszert és az  $w$  tükrözési jelleget nem érinti; az adott zérus erőterű szintből származó szintek az eredeti  $S$ -et és  $w$ -t megőrzik. Ez abból következik, hogy minden sajátfüggvény az erőter növekedtével folytonosan változik. Mivel minden sajátfüggvény a szimmetrikus csoport és a tükrözési csoport valamely ábrázolásához tartozik, a térerő bármely értékénél eme ábrázolások megváltozása ugrásszerű volna, ami lehetetlen.

<sup>6</sup> Ahhoz, hogy az átmenet során kibocsátott sugárzás polarizációs állapotát meghatározzuk, csak azokat az állapotokat kell tudnunk, amelyekben a fény a fordított folyamatban nem nyelődik el. Például az olyan átmenet, amelyben a kibocsátott fény a  $Z$  irányban polarizált gerjeszhető (noha gyengébben) a  $Z$  iránnyal szöget bezáró polarizációs irányú fényvel. Alapvető az, hogy az ilyen átmenet nem gerjeszhető a  $Z$ -re merőlegesen polarizált fényvel. Hasonlóképpen jobbra cirkulárisan polarizált fényt kibocsátó átmenet nem gerjeszhető balra cirkulárisan polarizált fényvel és fordítva.

A kibocsátott fény polarizációjának meghatározásakor azért van szükség a fordított, abszorpciós folyamat vizsgálatára, mert az alkalmazott *Schrödinger*-egyenlet egyáltalán nem magyarázza meg az emissziót.

Hátra van még az a kérdés, hogy milyen lesz az  $E_{SLW}$ -ből származó szintek  $\mu$  értéke. Legyen  $R$  egy  $\varphi$  szögű forgatás a  $Z$  tengely körül. Ekkor (15.6) szerint a  $\mathbf{D}^{(L)}(R)$  ábrázolási mátrix a következő:

$$\begin{pmatrix} e^{-iL\varphi} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i(L-1)\varphi} & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & e^{i(L-1)\varphi} & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & e^{iL\varphi} \end{pmatrix}. \quad (18.E.2)$$

Ha  $\psi_{\kappa\mu}$   $E_{SLW}$  sajátfüggvénye, akkor  $\bar{\mathbf{A}}^{(S)}$ -nek  $\kappa$ -adik sorához és  $\mathbf{D}^{(L)}$ -nek  $\mu$ -edik sorához tartozik, vagyis

$$\mathbf{P}_R \psi_{\kappa\mu} = \sum_{\mu'} \mathbf{D}^{(L)}(\{\varphi, 0, 0\})_{\mu'\mu} \psi_{\kappa\mu'} = e^{i\mu\varphi} \psi_{\kappa\mu}. \quad (18.4)$$

Így  $\psi_{\kappa\mu}$  a  $Z$  tengely körüli forgatások csoportjának ( $\exp(+i\mu\varphi)$ ) ábrázolásához tartozik. Ez akkor is igaz marad, ha a térerő növekszik. Mivel  $\mu$  az  $-L$ -től  $+L$ -ig fut a  $\mathbf{D}^{(L)}$  ábrázolásban, azért az  $L$  pályakvantumszámú szint  $2L+1$  számú  $E_{SLW,\mu}$  szintre hasad fel; a  $\mu$  mágneses kvantumszám lehetséges értékei  $-L, -L+1, \dots, L-1, L$ . Az első közelítésben az  $E_{SLW,\mu}$ -höz tartozó sajátfüggvény maga  $\psi_{\kappa\mu}$ , mivel ennek  $\bar{\mathbf{A}}^{(S)}$  egy sorához és az ( $\exp(+i\mu\varphi)$ ) ábrázoláshoz kell tartoznia, és nincs a  $\psi_{\kappa\mu}$ -knek olyan más lineáris kombinációja, amely ilyen tulajdonságú lenne. Az első közelítés „helyes lineáris kombinációit” ismét csoportelméleti megfontolások határozzák meg.

Ebben az esetben a „helyes lineáris kombináció” azért határozható meg könnyen, mert  $\mathbf{D}^{(L)}$ -ben a  $Z$  tengely körüli forgatásoknak megfelelő mátrixok összessége, mint a  $Z$  tengely körüli forgatások csoportjának ábrázolása már a (18.E.2) redukált alakkal rendelkezik. Ha a mágneses tér mondjuk az  $Y$  irányba mutatna, akkor az  $Y$  körüli forgatások  $\mathbf{d}^{(L)}(\varphi)$  mátrixait ki kellene redukálnunk, azaz a (18.E.2) alakra kellene hoznunk. Ekkor e redukció ( $T_{\mu,\mu}$ ) mátrixa szolgáltatná a helyes lineáris kombinációkat:

$$\psi'_{\kappa\mu} = \sum_{\mu'} T_{\mu',\mu} \psi_{\kappa\mu'}.$$

Az  $E_{SLW,\mu}$  sajátértékek az első közelítésben az első közelítés sajátfüggvényeiből kiszámíthatók, ha ismeretes, hogy a  $\mathcal{H}_z$  mágneses tér miatt a rendszer Hamilton-operátora hogyan változik meg. A klasszikus elméletben a zérus térerőnek megfelelő Hamilton-függvényhez az  $\frac{e}{c}(\mathbf{A}, \mathbf{v}) = \frac{e}{mc}(A_x p_x + A_y p_y + A_z p_z)$  tag adódik hozzá. ( $\mathbf{A}$  térerősség magasabb hatványait elhanyagoljuk.)  $\mathbf{A}$  a vektorpotenciál, amelynek rotációja adja a térerősséget. A kvantummechanikában  $p_{x_i}$ -t  $-i\hbar\partial/\partial x_i$ -vel helyet-



tesztjük, így ugyanilyen közelítésben kapjuk a mágneses térből adódó potenciált:

$$\mathbf{V} = -\frac{ie\hbar}{mc} (\mathbf{A}_x \partial / \partial x + \mathbf{A}_y \partial / \partial y + \mathbf{A}_z \partial / \partial z). \quad (18.5)$$

Több elektron esetén —  $\mathbf{V}$  több ilyen tag összege lesz<sup>7</sup>,  $Z$  irányú homogén  $\mathcal{H}_z$  mágneses térre:

$$\mathbf{A}_x = -\frac{1}{2} \mathcal{H}_z y; \quad \mathbf{A}_y = \frac{1}{2} \mathcal{H}_z x; \quad \mathbf{A}_z = 0.$$

(5.22)-ből a mágneses energiátöbblet

$$E_{SLw,\mu} - E_{SLw} = (\psi_{\kappa\mu}, \mathbf{V} \psi_{\kappa\mu}) = \frac{e\mathcal{H}_z}{2mc} (\psi_{\kappa\mu}, \mathbf{L}_z \psi_{\kappa\mu}), \quad (18.6)$$

ahol

$$\mathbf{L}_z = -i\hbar(x_1 \partial / \partial y_1 + \dots + x_n \partial / \partial y_n - y_1 \partial / \partial x_1 - \dots - y_n \partial / \partial x_n). \quad (18.6a)$$

A (18.6)-ban szereplő skalárszorzat pontosan kiszámítható. Megmutatjuk, hogy minden  $f$  függvényre

$$\mathbf{L}_z f = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} (\mathbf{P}_{\{\varphi 00\}} f) \Big|_{\varphi=0}. \quad (18.7)$$

és hogy ez egyenlő az  $f$ -nek az „elforgatott állapotban” és az eredeti állapotban vett érték különbségével, osztva a forgatás szögével. Mivel

$$\{\varphi, 0, 0\} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

azért

$$\mathbf{P}_{\{\varphi 00\}} f(\dots x_k y_k z_k \dots) = f(\dots, x_k \cos \varphi - y_k \sin \varphi, x_k \sin \varphi + y_k \cos \varphi, z_k, \dots)$$

Ezt  $\varphi$  szerint deriválva és  $\varphi=0$ -t betéve kapjuk, hogy

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} (\mathbf{P}_{\{\varphi 00\}} f) \Big|_{\varphi=0} = \sum_k -i\hbar \left( x_k \frac{\partial f}{\partial y_k} - y_k \frac{\partial f}{\partial x_k} \right), \quad (18.7a)$$

amely nem egyéb, mint (18.7). (18.4)-et felhasználva ezt  $\mu$  segítségével is kiszámíthatjuk:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} (\mathbf{P}_{\{\varphi 00\}} \psi_{\kappa\mu}) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} (e^{i\mu\varphi} \psi_{\kappa\mu}) = \mu \hbar (e^{i\mu\varphi} \psi_{\kappa\mu}). \quad (18.7b)$$

A  $(\psi_{\kappa\mu}, \psi_{\kappa\mu}) = 1$  normálás miatt (18.6) ezt adja:

$$E_{SLw,\mu} - E_{SLw} = \frac{e\hbar \mathcal{H}_z \mu}{2mc} \quad (\mu = -L, -L+1, \dots, L-1, L) \quad (18.8)$$

<sup>7</sup> Pontosabb közelítésnél még az  $(\mathbf{A}_x^2 + \mathbf{A}_y^2 + \mathbf{A}_z^2) \frac{e}{2mc^2}$  tagot is hozzá kellene adni (18.5)-höz.

E tag felelős például a diamágnességért.

(18.8) szerint  $L$  pályakvantumszámú szint az első közelítésben (ha  $\mathcal{H}_2$ -t első hatványon tartalmazó tagokra korlátozódunk)  $2L+1$  egyenközű szintre hasad fel. Ezek közül a középső szint ( $\mu=0$ ) energiája megegyezik az eredetiével; adott térerősség mellett a szintek távolsága bármely ily módon felhasadt szintre egyforma, hiszen (18.8)-ban csak egyetemes állandók fordulnak elő.

Az  $F \rightarrow E$  vonal Zeeman-komponenseit vizsgálva azt látjuk, hogy egybeesik az összes olyan vonal, amelyre a  $\mu$  változása ugyanakkora, hiszen az  $F$  szint ugyanolyan mértékben hasad fel, mint az  $E$ .  $\mu$  azonban optikai átmenet során csak  $\pm 1$ -gyel vagy 0-sal változhat meg, ezért összesen három vonalat várunk, a két eltolódott komponens a középsőtől mindentől egyforma távolságra van. Ezt a felhasadási módot *normális Zeeman-jelenségnek* nevezik.

Ez a kép csupán a *szingulett vonalakra* egyezik meg a tapasztalattal. Szingulett állapotokban az elektronok a „normális” módtól való eltérést okozó mágneses momentumai (spinjei) úgy kombinálódnak össze, hogy a hatásuk eltűnik. Ez a magyarázata annak is, hogy a szingulett termeknek nincs finomszerkezetük. Minden más szintnél a felhasadás a fent kiszámítottnál kisebb, vagy nagyobb, és általában szintről szintre változik. Azok a vonalak, amelyeknél  $\mu$  ugyanakkorát változik, többé nem esnek egybe. Így előáll az „anomális Zeeman-jelenség” néven ismert felhasadási mód. Ez az előzőnél jóval bonyolultabb. Az egyes Zeeman-komponensek viszonylagos intenzitását később számítjuk ki.<sup>8</sup>

Megjegyezzük, hogy a mágneses térnél jobban semmilyen más külső tér nem képes a szinteket felhasítani, hiszen a megmaradó elfajulás teljes egészében a szimmetrikus csoporttal kapcsolatos, és az elektronok ekvivalenciáját semmilyen külső erőter sem szüntetheti meg.

4.  $Z$  irányú állandó elektromos térben más a szimmetria, mint mágneses térben, mivel az elektromos térerősség poláris vektor. Ebben az esetben tükrözési középpont nem létezik, azonban a magon átmenő, erőtérrrel *párhuzamos* síkok szimmetriasisíkok maradnak. A helyzet ellentétes a mágneses tér esetével (lásd a 10b. ábrát a 211. oldalon). A szimmetriacsoport most a kétdimenziós forgatás—tükrözés-csoport (ez nem *Abel*-csoport!), míg a mágneses térnél a kétdimenziós valódi forgáscsoport és a háromdimenziós tükrözéscsoport direkt szorzata volt. Az  $S$  multipllett rendszer mellett minden szintnek még egy  $m=0, 0', 1, 2, \dots$  elektromos kvantumszáma is van; ez azt mondja meg, hogy a szint a kétdimenziós forgás—tükrözés-csoport melyik  $\mathbf{Z}^{(m)}$  ábrázolásához tartozik.

<sup>8</sup> Ezt a 23. fejezetben tesszük meg. A tekintett három vonal intenzitása ugyanolyan, amelyet a Zeeman-jelenség klasszikus elmélete jósol; ez a normális Zeeman-jelenséget pontosan szolgáltatja.

A 14. fejezetben meghatároztuk a kétdimenziós forgás—tükrözés-csoport irreducibilis ábrázolásait.  $\mathbf{Z}^{(0)}$ ,  $\mathbf{Z}^{(0')}$ ,  $\mathbf{Z}^{(1)}$ ,  $\mathbf{Z}^{(2)}$ , ...-ban rendre az

$$(1), (1), \begin{pmatrix} e^{-i\varphi} & 0 \\ 0 & e^{i\varphi} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} e^{-2i\varphi} & 0 \\ 0 & e^{2i\varphi} \end{pmatrix}, \dots,$$

mátrixok felelnek meg a  $\varphi$  szögű forgatásoknak, míg az

$$(1), (-1), \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \dots$$

mátrixok az  $X$  tengelyre való tükrözés megfelelői.

Először meg kell határoznunk azt, hogy  $\mathbf{D}^{(L)}(R)$ -ben mely  $\mathbf{Z}^{(m)}$  fordul elő és hányszor; itt  $R$  a  $Z$  körüli forgás—tükrözés. Ily módon meghatározhatjuk ama szintek  $m$  értékeit, amelyekre az  $L$  pályakvantumszámú szint felhasad. (18.E.2)-ből azonnal látható, hogy ha  $R$  valódi forgatás  $Z$  körül, akkor  $\mathbf{Z}^{(1)}$ ,  $\mathbf{Z}^{(2)}$ , ...,  $\mathbf{Z}^{(L)}$  mindegyikét egyszer tartalmazza  $\mathbf{D}^{(L)}$ ; a  $\mathbf{Z}^{(m)}$  első, illetőleg második sorához tartozó sajátfüggvény  $\mathbf{D}^{(L)}$ -nek  $m$ , illetőleg  $-m$  sorához tartozik. Másrészt a  $\mathbf{D}^{(L)}$ -nek 0 sorához tartozó sajátfüggvények  $\mathbf{Z}^{(0)}$ -hoz és  $\mathbf{Z}^{(0')}$ -höz is tartozhatnak. Azt, hogy melyik eset valósul meg, például az  $y' = -y$  tükrözés vizsgálatával dönthetjük el. ( $\mathbf{Z}^{(0)}$  és  $\mathbf{Z}^{(0')}$  tiszta forgatásokra azonos.)

$\mathbf{D}^{(L)}$ -ben az  $e$  transzformációnak — amely tükrözés és  $Y$  tengely körüli  $\pi$  szögű forgatás szorzata — megfelelő mátrix átlója

$$w(1 + 2 \cos \pi + 2 \cos \pi + \dots + 2 \cos L\pi) = w(1 - 2 + 2 - \dots + 2(-1)^L) = w(-1)^L, \quad (18.9)$$

ahol  $w + 1$  páros és  $-1$  páratlan szintre. Mivel a tükrözések átlójához  $\mathbf{Z}^{(1)}$ ,  $\mathbf{Z}^{(2)}$ , ...,  $\mathbf{Z}^{(L)}$  komponensei nem adnak járulékot, azért a szint 0 szint, ha  $w(-1)^L = +1$ ; és 0' szint, ha  $w(-1)^L = -1$ .

Látható, hogy az elektromos térben a szintfelhasadás nem olyan teljes, mint a mágneses térnél; egy  $L$  pályakvantumszámú szintből csupán  $L + 1$  szint keletkezik.

Erős elektromos tér esetén a mágneses tér esetéhez hasonló kiválasztási szabályok érvényesek. Az  $m$  elektromos kvantumszám  $Z$  tengely mentén polarizált fény esetében nem változik meg, mert a  $(z_1 + z_2 + \dots + z_n)$ -nel való szorzás a kétdimenziós forgás—tükrözés-csoporttal szemben szimmetriaoperáció, ha a forgástengely a  $Z$  tengely. Ezért a 0 és 0' szintek között minden átmenet tilos.  $m$  ezzel szemben  $\pm 1$ -gyel változik meg, ha a kibocsátott fény a térerősségre merőlegesen van polarizálva.

A pályakvantumszámra vonatkozó kiválasztási szabály erős elektromos tér esetén megsérül, mert a teljes forgásszimmetria többé nem érvényes, tehát a sajátfüggvények nem tartoznak a háromdimenziós forgáscsoport ábrázolásaihoz. A Laporte-szabály sem marad érvényes (noha ezt a mágneses tér nem érinthette); csupán a 0' és 0' szintek közötti átmenetek maradnak tiltottak.

Az elektromos tér által perturbált sajátértékek szintén kiszámíthatók formálisan a *Rayleigh—Schrödinger*-eljárás segítségével. Az eredmények érvényessége korlátozott, hiszen a

$$V = e\mathcal{L}_z(z_1 + z_2 + \dots + z_n) \quad (18.10)$$

perturbációs tag alakja miatt az eljárás divergens<sup>9</sup>.

A potenciált például a H-atom esetében a magtól mért távolság függvényében grafikusán ábrázolva azt látjuk, hogy a mag közelében mély potenciálminimum van, de az elektronnak mindig van elég energiája ahhoz, hogy a tér irányában a végtelenbe szökjék.

Ebből arra következtethetnénk, hogy elektromos tér esetében szigorúan véve nem létezik diszkrét spektrum, nincsenek valódi kötött állapotok. Ennek ellenére a *Schrödinger*-eljárással kiszámított első és második közelítés nem teljesen értelmetlen. Olyan állapotok adódnak ugyanis, amelyek ha valójában nem is stacionáriusak, de igen hosszú időn át stacionárius állapotokként viselkednek, mert a mag közeléből az elektron a potenciálvölgyből a magot csak nagyon sokszor megkerülve szabadul ki.

Az első közelítésben az elektromos tér okozta energiaperturbáció egyáltalán nem hasítja fel a sajátértékeket. Az (5.18) szekuláris egyenlet

$$v_{\kappa'\mu';\mu\mu} = e\mathcal{L}_z(\psi_{\kappa'\mu'}, (z_1 + z_2 + \dots + z_n)\psi_{\mu\mu}) = 0 \quad (18.11)$$

együtthatói mind zérusok, hiszen  $(z_1 + z_2 + \dots + z_n)\psi_{\mu\mu}$  és  $\psi_{\kappa'\mu'}$  paritása különböző. Ha véletlen degeneráció nincs, akkor az ugyanezen  $E$  sajátértékhez tartozó összes sajátfüggvény paritása megegyezik. Ezt a sajátságot tapasztaltuk már a 209., 210. oldalon található átmeneti operátornál is; (18.11) állandó tényezőtől eltekintve megegyezik (18.2c)-vel. A  $(v_{\kappa'\mu';\mu\mu}) = 0$  sajátértékek mind zérusok. Az első közelítésben valamennyi szint egybeesik a nem perturbált szinttel. Ha az energiaperturbációt a térerősség hatványai szerint sorba fejtjük, akkor az első hatvány együtthatója eltűnik, tehát a szintek között a távolság a térerősség négyzetével tart zérushoz. Elsősorban csak a hidrogénatomnál van szintfelhasadás, mert itt a különböző paritású szintek véletlen degeneráció folytán egybeesnek.

A *Stark*-jelenségre most levezetett törvények kísérleti igazolásának útjában a *Zeeman*-jelenség esetéhez hasonlóan ismét főleg a mágneses momentumokból adódó bonyodalmak állnak. Az egyetlen általános érvényű eredmény az, hogy nincs térerősség első hatványával arányos szinttávolság; ez ugyanis csupán tükrözési sajátságokra vonatkozó megfontolások következménye.

5. Szabad atomok számára az állandó elektromos és mágneses terek a leggyakoribb külső perturbációk. Kristályok atomjainál azonban más fontos esetek is

<sup>9</sup> Lásd J. R. OPPENHEIMER, Phys. Rev. **31**, 66 (1928).

fellépnek. Itt a környező atomok keltette „külső erőter” szimmetriáját<sup>10</sup> a kristály szimmetriája szolgáltatja és ez érdekes felhasadásokat eredményezhet. Ezt a legtöbb szimmetriaosztály esetére H. A. BETHE vizsgálta meg részletesen. Példái közül csak a viszonylag egyszerű rombos esetet, a rombos piramis szimmetriáját tekintjük át.<sup>11</sup>

A rombos piramisnak három szimmetriaeleme van: a  $Z$  tengely körül  $\pi$  szögű forgatás és tükrözés a  $XZ$  és  $YZ$  síkra,  $C_{2v}$  szimmetriacsoportja e három elemből és az egységelemből áll. Ez izomorf a négyescsoporttal (lásd a 71. oldalt), mivel mindegyik elemének rendje 2. Lévéen *Abel*-csoport, négy irreducibilis egydimenziós ábrázolása van; ezeket az *V. táblázat* adja meg.

*V. táblázat*  
A rombos piramis csoportjának ábrázolásai

Ábrázolás	$E$	$\pi$ szögű forgás $Z$ körül	Tükrözés a $ZX$ síkra	Tükrözés a $ZY$ síkra
I	(1)	(1)	(1)	(1)
II	(1)	(-1)	(-1)	(1)
III	(1)	(-1)	(1)	(-1)
IV	(1)	(1)	(-1)	(-1)

Az első azonos ábrázolás, a második és a harmadik hasonlítanak egymáshoz, bennük csak az  $X$  és  $Y$  tengely szerepe cserélődik fel; a negyedik azonban különleges szerepet játszik.

Ha egy atomot a kristályban a helyére viszünk, akkor arra olyan erők lépnek fel, amelyek a tér teljes szimmetriáját megbontják, és csupán a rombos szimmetriát hagyják meg. Mivel e csoport irreducibilis ábrázolásai egydimenziósak, az  $L$  pályakvantumszámú szint  $2L+1$  szintre hasad fel.

Arra a kérdésre kívánunk most választ adni, hogy az eredeti  $L$  azimutális kvantumszámú és  $w$  paritású atomszintből a kristályban keletkező szintek közül hány rendelkezik az I, II, III, illetve IV ábrázolások tulajdonságaival. Erre a kérdésre az általános elmélet ad választ. Meg kell határozni, hogy a forgás—tükrözés-csoport  $\mathbf{D}^{(L,w)}$  ábrázolása hányszor tartalmazza az I, II, III és IV ábrázolásokat, ha azt  $c_{2v}$  rombos alcsoportja ábrázolásaként fogjuk fel. Eme  $\alpha_I$ ,  $\alpha_{II}$ ,  $\alpha_{III}$  és  $\alpha_{IV}$  szá-

<sup>10</sup> Ez az állítás azt a feltevést tartalmazza, hogy a környező atomokat a vizsgált rendszerből kizártuk; hatásukat a „külső” erőter képviseli. Világos, hogy ez nem egészen pontos, tehát az eme feltevésen alapuló tárgyalás nem teljes. Nevezetesen a „kicserélődési” erőket itt nem vesszük figyelembe.

<sup>11</sup> A rombos piramis alapja rombusz. Lásd H. A. BETHE, Ann. d. Phys. 3, 133 (1929).

mokat a legegyszerűbben úgy határozhatjuk meg, hogy kiszámítjuk  $\mathbf{D}^{(L,w)}$  karaktereit a  $C_{2v}$  operációira. Az egységelemre

$$2L+1 = \alpha_I + \alpha_{II} + \alpha_{III} + \alpha_{IV}. \quad (18.12a)$$

A  $Z$  tengely körül  $\pi$  forgatásra, illetőleg a  $ZX$  és  $ZY$  síkokra való tükrözésekre (18.9) alapján

$$(-1)^L = \alpha_I - \alpha_{II} - \alpha_{III} + \alpha_{IV} \quad (18.12b)$$

$$w(-1)^L = \alpha_I - \alpha_{II} + \alpha_{III} - \alpha_{IV} = \alpha_I + \alpha_{II} - \alpha_{III} - \alpha_{IV}. \quad (18.12c)$$

(18.12c)-ből következik, hogy  $\alpha_{II} = \alpha_{III}$  és  $w(-1)^L = \alpha_I - \alpha_{IV}$ . (18.12a)-ból és (18.12b)-ből következik, hogy  $2L+1(-1)^L = 2\alpha_I + 2\alpha_{IV}$ . Így megkapjuk az  $\alpha$  számokat, amelyeket a *VI. táblázatban* foglaltunk össze.

*VI. táblázat*

A rombos piramis csoport ábrázolásainak multiplicitása a forgás—tükrözés-csoport néhány ábrázolásában

Szintek	$\alpha_I$	$\alpha_{II}, \alpha_{III}$	$\alpha_{IV}$
$S_+$	1	0	0
$S_-$	0	0	1
$P_+$	0	1	1
$P_-$	1	1	0
$D_+$	2	1	1

A fent említett munkában H. A. BETHE majd az összes 32-féle kristályszimmetriára meghatározta a felhasadást. Mindebből további következtetéseket is levont. Így például az I, II, III és IV típusú szintekre a kiválasztási szabályokat igen egyszerűen megkaphatjuk, mondjuk a  $Z$  irányban polarizált sugárzás esetére, ha észrevesszük, hogy a  $(z_1 + z_2 + \dots + z_n)$ -nel való szorzás a rombos csoportra vonatkozólag szimmetriaoperáció, tehát csak ugyanazon ábrázolás szintjei között megengedett az átmenet.

## 19. A SAJÁTFÜGGVÉNYEK RÉSZLEGES MEGHATÁROZÁSA TRANSZFORMÁCIÓS TULAJDONSÁGAIK ALAPJÁN

1. A sajátfüggvényeknek az előző fejezetben megvitatott transzformációs sajátosságai azokból az összefüggésekből következnek, amelyek a sajátfüggvényeknek a csoport transzformációival egymásba átvihető változóinál felvett értékeire állnak fenn. Ha például a csoport az  $x' = -x$  tükrözésből és az azonos transzformációból áll, akkor az azonos ábrázoláshoz tartozó (páros) függvényekre

$$g(-x) = g(x), \quad (19.1)$$

a negatív ábrázoláshoz tartozó (páratlan) függvényekre pedig

$$f(-x) = -f(x). \quad (19.1a)$$

Általában a

$$P_R \psi_\lambda(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_\lambda D(R)_{\lambda\lambda} \psi_\lambda(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (19.2)$$

összefüggésből (11.26a) segítségével következik, hogy

$$\psi_\lambda(x'_1, x'_2, \dots, x'_n) = \sum_\lambda D(R)_{\lambda\lambda}^* \psi_\lambda(x_1, x_2, \dots, x_n), \quad (19.3)$$

ahol  $x'_1, x'_2, \dots, x'_n$ , az  $x_1, x_2, \dots, x_n$ -ből az  $R$  transzformációval adódik. Ha a hullámfüggvény argumentumainak teljes tartománya (vagyis a teljes konfigurációs tér) olyan részekre osztható fel, amelyek mindegyike az egyik részből — a fundamentális tartományból — a csoport valamely transzformációjával állítható elő, akkor  $\psi_\lambda$  (19.3) segítségével mindenütt kiszámítható, feltéve, hogy a fundamentális tartományban ismerjük. A (19.3) egyenlet az  $x_1, x_2, \dots, x_n$  argumentumok sokaságának redukciójaként tekinthető; e redukció mértéke attól függ, hogy milyen hatású az a csoport, amellyel szemben a sajátérték-probléma invariáns. Ez az összefüggés explicit formában mutatja  $\psi_\lambda$  transzformációs tulajdonságait is. Így  $\psi_\lambda$  invarianciatulajdonságaiból következő valamennyi állításnak (19.3)-ból levezethetőnek kell lennie.

Tekintsük például egy páratlan és egy páros függvény skaláris szorzatát:

$$\int_{-\infty}^{\infty} g(x) * f(x) dx. \quad (19.4)$$

Az integrációs tartományt a  $-\infty$ -tól 0-ig és a 0-tól  $+\infty$ -ig terjedő részre osztva (ezeket az  $x' = x$  transzformáció viszi át egymásba) kapjuk, hogy

$$\int_{-\infty}^{\infty} g(x) * f(x) dx = \int_{-\infty}^0 g(x) * f(x) dx + \int_0^{\infty} g(x) * f(x) dx.$$

Ha most az első integrálban  $-x$ -et az  $y$  változóval helyettesítjük és  $g(-y)$ -t és  $f(-y)$ -t, (19.1), valamint (19.1a) segítségével kifejezzük, akkor

$$-\int_0^{\infty} g(y) * f(y) dy + \int_0^{\infty} g(x) * f(x) dx = 0, \quad (19.5)$$

tehát a (19.4) integrál két tagja kiejt egymást.

Az az okoskodás, hogy  $f$  és  $g$  különböző irreducibilis ábrázoláshoz tartoznak, s így skalárszorzatuknak el kell tűnnie, voltaképpen egyszerűbb, mint az itt bemutatott számítás. Ezzel szemben azonban a nagyobb áttekinthetőség mellett (19.3)-ból kiindulni még azért is előnyös, mert így a sajátfüggvényeket részlegesen ki lehet számolni. Ez az eljárás igen hatékony olyan egyszerűbb esetekben, amelyek a forgáscsoporttal szemben invariánsak.

2. A (19.3) egyenlet szolgáltatja a  $\psi_{\kappa}$  hullámfüggvényt mindazon helyeken, amelyek a  $P = (x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_n, y_n, z_n)$  pontból a csoporttranszformációk által adódnak.  $\psi_{\kappa}$  értéke e helyeken  $\psi_{\kappa}$ -nak és a többi  $\psi_{\lambda}$  partnerfüggvénynek a  $P$  pontban felvett értékével fejeződik ki. A forgáscsoportra a konfigurációs tér ama pontjai ezek, amelyekben a részecskék relatív helyzete, vagyis az *atom geometriai alakja* megegyezik. A konfigurációs tér pontjait a háromdimenziós tér középpontjából kiindulva  $n$ -lábbal ábrázolhatjuk. Az egyes lábak vége a háromdimenziós térben oda mutat, ahol az illető elektron elhelyezkedik a vizsgált elrendezésben. Ha minden lehetséges  $n$ -lábra ismeretes a hullámfüggvény, akkor a konfigurációs tér minden pontjában is ismerjük azt.

A 189. oldalon a „tömegközéppont leválasztására” vonatkozóan található megfontolásainkból következik, hogy a hullámfüggvény változóként a mag koordinátáit is tartalmazni fogja. Ezért a hullámfüggvény nemcsak olyan esetben van definiálva, amikor az  $n$ -láb kiindulópontja a háromdimenziós tér centrumában van, hanem — ha az  $n$ -láb a mag helyéről indul ki — annak tetszőleges térbeli elhelyezkedésére is. A hullámfüggvény értékei megegyeznek azonban az  $n$ -láb olyan helyzeteire, amelyek egymásból párhuzamos eltolással adódnak. Ezért elegendő azt csupán a középpontból kiinduló  $n$ -lábba megadni. A hullámfüggvény nem változik, ha minden  $x$  vagy  $y$  vagy  $z$  koordinátát (beleértve a mag koordinátáit is) ugyanazzal a számmal csökkentjük vagy növeljük.

Az egymásból *elforgatással* adódó helyzetek az  $n$ -láb *ugyanolyan alakjának, de különböző orientációinak* felelnek meg. A fundamentális tartományt úgy választjuk meg, hogy az olyan helyzetű legyen, amelyben az  $n$ -láb első szára (amelyik az első



elektronnak felel meg) a  $Z$  tengelyben, a második pedig az  $XZ$  síkban fekszik. E tartomány a konfigurációs tér ama pontjaiból áll, amelyekre  $x_1=y_1=y_2=0$ . Ha a  $\mathbf{D}^{(L)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})$  ábrázoláshoz tartozó  $2L+1$  számú  $\psi_{-L}, \psi_{-L+1}, \dots, \psi_L$  hullámfüggvény értéke  $G_{-L}, G_{-L+1}, \dots, G_L$ , a fundamentális tartományban [vagyis  $G_\lambda = \psi_\lambda(0, 0, z_1, x_2, 0, z_2, \dots, x_n, y_n, z_n)$  és  $G_\lambda$  csak] a részecskék elrendeződésének geometriai alakjától függ, akkor az olyan  $x'_1, y'_1, z'_1, \dots, x'_n, y'_n, z'_n$  pontokban, amelyek a  $0, 0, z_1, x_2, 0, z_2, \dots, x_n, y_n, z_n$  pontból a  $(\pi - \alpha, \beta, -\pi - \gamma)$  forgatással adódnak,<sup>1</sup> (19.3) szerint

$$\begin{aligned} \psi_{\mu}(x'_1, y'_1, z'_1, \dots, x'_n, y'_n, z'_n) &= \\ &= \sum_{\lambda=-L}^L \mathbf{D}^{(L)}(\{\pi - \alpha, \beta, -\pi - \gamma\})_{\mu\lambda}^* G_\lambda(g) = \quad (19.6) \\ &= \sum_{\lambda=-L}^L (-1)^{\mu-\lambda} \mathbf{D}^{(L)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu\lambda} G_\lambda(g). \end{aligned}$$

E kifejezésben<sup>2</sup>  $\alpha$  és  $\beta$  definíció szerint az első elektron azimut- és polárszöge,  $\gamma$  pedig a  $Z$  tengely és az első elektron által meghatározott síknak az origó és az első két elektron síkjával bezárt szöge.  $G_\lambda$  csak az  $n$ -láb  $g$  geometriai alakjától függ.

$L=0$  esetén ( $S$  szintek) (19.6) szerint

$$\psi(x'_1, y'_1, z'_1, \dots, x'_n, y'_n, z'_n) = G_0(g). \quad (19.7)$$

Ebben az esetben a hullámfüggvény *csak* az  $n$ -láb alakjától függ, annak térbeli orientációjától nem; az  $S$  állapotok gömbszimmetrikusak<sup>3</sup>. Ez teljesen érthető, hiszen  $S$  állapotban egyetlen hullámfüggvény van, s ez nem elegendő irány kijelöléséhez. Magasabb azimutális kvantumszám esetén a sajátfüggvények teljes rendszerére ugyan minden irány egyenértékű, azonban egyetlen sajátfüggvény sem választható ki úgy, hogy valamilyen irányt ki ne tüntetnének, így az egyes sajátfüggvények külön-külön már nem gömbszimmetrikusak.

<sup>1</sup> A

$$\mathbf{D}^{(L)}(\{\pi - \alpha, \beta, -\pi - \gamma\})_{\mu\lambda}^* = (-1)^{\mu-\lambda} \mathbf{D}^{(L)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu\lambda}$$

összefüggés a

$$\mathbf{D}^{(L)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu\lambda} = e^{i\mu\alpha} d^{(L)}(\beta)_{\mu\lambda} e^{i\lambda\gamma}$$

(15.8) összefüggésnek és annak a következménye, hogy  $d^{(L)}(\beta)_{\mu\lambda}$  valós.

<sup>2</sup> A forgatást úgy választottuk meg, hogy  $\alpha$  és  $\beta$  az első elektron pozitív poláris, illetőleg azimutális szöge legyen. Lásd a könyv végén az A. függelék második szakaszát.

<sup>3</sup> A. UNSÖLD, Ann. Physik 4 **82**, 355 (1927).

(19.6)-ból kiválasztási szabályok is levezethetők. Itt azonban főleg azzal foglalkozunk, hogy ebből az egyenletből a *sajátfüggvények* mennyire határozhatók meg explicit módon.

3. Merev testre a  $g$  geometriai alak rögzített, tehát a  $G_\lambda$ -k állandók. Ebben az esetben a sajátfüggvények csak  $\alpha$ ,  $\beta$  és  $\gamma$  függvényei és (19.6) teljesen meghatározza őket. A legegyszerűbb merev test a vékony rúd, amely középpontja körül foroghat (merev rotátor).

A merev rotátor *Schrödinger*-egyenlete a következő:

$$-\frac{\hbar}{2\mathcal{I}} \left[ \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial \psi_\mu^{NL}(\vartheta, \varphi)}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial \psi_\mu^{NL}(\vartheta, \varphi)}{\partial \varphi^2} \right] = E_L^N \psi_\mu^{NL}(\vartheta, \varphi), \quad (19.8)$$

itt  $\mathcal{I}$  a tehetetlenségi nyomaték,  $\vartheta$  és  $\varphi$  pedig a rotátor polár- és azimuttszöge. A fundamentális tartomány most egyetlen pont:  $\vartheta=0$ , ez a rotátor „normális helyzete”. A sajátfüggvények értékeit e pontban  $G_\lambda^{NL}$ -val jelöljük, ekkor a (15.8) és (19.6) egyenletek alapján

$$\psi_\mu^{NL}(\vartheta, \varphi) = \sum_\lambda (-1)^{\mu-\lambda} D^{L}(\{\alpha\beta\gamma\})_{\mu\lambda} G_\lambda^{NL}. \quad (19.8a)$$

$\psi_\mu^{NL}$ -nek azonban nem szabad  $\gamma$ -tól függnie, mivel e változó tetszőleges értéke mellett a rotátor mindig ugyanabban a helyzetben van. Így  $G_\lambda^{NL}=0$  ha  $\lambda \neq 0$ , s így (19.8a) így alakul:<sup>4</sup>

$$\begin{aligned} \psi_\mu^{NL}(\vartheta, \varphi) &= (-1)^\mu e^{i\mu\varphi} d^{(L)}(\vartheta)_{\mu 0} G_0^{NL} = \\ &= (-1)^\mu D^{(L)}(\{\varphi, \vartheta, 0\})_{\mu 0} G_0^{NL}. \end{aligned} \quad (19.8b)$$

Ez az egyenlet az ábrázolási együtthatók segítségével kimerítően jellemzi a sajátfüggvényeket. A (19.8b) egyenletből az is látszik, hogy megegyező  $L$  és  $\mu$  mellett,  $N$ -ben különböző  $\psi_\mu^{NL}$  sajátfüggvények egymástól legfeljebb állandó tényezőben térhetnek el. Mivel különböző sajátértékek sajátfüggvényeire ez nem lehetséges, azért minden egyes  $L$ -hez csak egyetlen sajátérték tartozhat. Így az  $N$  index a (19.8), (19.8a) és (19.8b) egyenletben elhagyható.

A (19.8) megfontolások szolgáltatják az  $L$ -edfokú gömbharmonikusokat; (19.8b) szerint  $D^{(L)}(\{\varphi, \vartheta, \gamma\})_{\mu 0}$  az  $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$  gömbharmonikussal egyezik meg, eltekintve a normálástól és a  $(-1)^m$  tényezőtől.

Ne lepődjünk meg túlságosan azon, hogy (19.8) számolás nélkül teljesen megoldható. Valójában az ábrázolások meghatározásának egyik módszere a (19.8)-cal

<sup>4</sup> Lásd e fejezet 2. lábjegyzetét és az A. függelékét.

lényegében egyenértékű *Laplace*-egyenlet megoldásán alapul (15. fejezet, 1. szakasz). Mondhatjuk tehát, hogy most e megoldást visszahelyettesítjük (19.8)-ba.

Rámutatunk arra, hogy a (19.8) egyenlet minden gömbszimmetrikus problémában fontos szerepet játszik. Tekintsük a *H*-atomot; ezt a

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi_\mu^{Nl} - \frac{e^2}{r} \psi_\mu^{Nl} = E_{Nl} \psi_\mu^{Nl} \quad (19.9)$$

egyenlet írja le. A (19.6) egyenlet azt állítja, hogy a megoldások alakja a következő:

$$\psi_\mu^{Nl} = \sum_\lambda (-1)^{\mu-\lambda} D^L(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu\lambda} G_\lambda^{Nl}(r), \quad (19.9a)$$

$G_\lambda^{Nl}$  most csak *r* függvénye, mivel most az *n*-láb egyetlen pálcává fajul el, melynek geometriai alakját *r* hossza teljesen meghatározza (ez az elektron távolsága a protontól). Ebben az esetben  $\alpha$  és  $\beta$  az elektron azimut- és polárszöge,  $\gamma$ -nak pedig nincs jelentősége, ez okból a (19.9a) egyenletnek  $\gamma$ -tól függetlennek kell lennie. Ebből következik, akárcsak (19.8b)-ben, hogy  $G_\lambda^{Nl}$ -nak  $\lambda \neq 0$ -ra el kell tűnnie:

$$\begin{aligned} \psi_\mu^{Nl}(r, \vartheta, \varphi) &= (-1)^\mu D^{(l)}(\{\varphi, \vartheta, 0\})_{\mu 0} G_0^{Nl}(r) \propto \\ &\propto Y_{l\mu}(\vartheta, \varphi) G_0^{Nl}(r). \end{aligned} \quad (19.9b)$$

(17.3) szerint a *H*-atom sajátfüggvényei valóban ilyen alakúak. Az is látható, hogy  $\psi_\mu^{Nl}$  valóban  $D^{(l)}$   $\mu$ -edik sorához tartozik, ahogy annak a  $\mu$  mágneses és az *l* pályakvantumszámú sajátfüggvény esetében lennie is kell.

E módszer teljesítőképességére legegyszerűbben a kvantummechanikai merev test (pörgettyű) esetében világíthatunk rá. Tekintsük először az aszimmetrikus pörgettyűt. Ennek helyzetét ama forgatás három  $\alpha$ ,  $\beta$  és  $\gamma$  *Euler*-szöge jellemzi, amelyik a normálisból a kérdéses helyzetbe hozza a pörgettyűt (ez utóbbiban a legnagyobb tehetetlenségi nyomaték iránya a *Z*, a következő legnagyobb iránya az *Y*, míg a legkisebb iránya az *X* tengely). A hullámfüggvény csak e három szögtől függ; (19.6) szerint

$$\begin{aligned} \psi_\mu^{Nl}(\alpha, \beta, \gamma) &= \sum_\lambda (-1)^{\mu-\lambda} D^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu\lambda} G_\lambda^{Nl} = \\ &= \sum_\lambda (-1)^{\mu-\lambda} e^{i\mu\alpha} d^{(l)}(\beta)_{\mu\lambda} e^{i\lambda\gamma} G_\lambda^{Nl}. \end{aligned} \quad (19.10)$$

A  $G_\lambda^{Nl}$ -k ismét állandók, mert a merev test geometriai alakja rögzített. Ezek csakúgy, mint az  $E_{Nl}$  sajátértékek meghatározhatók, ha (19.10)-et a *Schrödinger*-egyenletbe helyettesítjük. Így  $2l+1$  lineáris homogén egyenletet kapunk a  $G_\lambda^{Nl}$ , ...,  $G_l^{Nl}$  számokra. Az a követelmény, hogy ezen egyenletrendszer determinánsa tűnjék el, az  $E_{Nl}$  energiára  $(2l+1)$ -edfokú algebrai egyenlet szolgáltat, így az *l* pályakvantumszámhoz  $2l+1$  sajátérték tartozik.

Tekintsünk most olyan pörgettyűt, amelynek a két kisebbik tehetetlenségi nyomatéka egyenlő. Ekkor a pörgettyű „normális helyzete” nincs egyértelműen meghatározva, mivel egy forgatás a  $Z$  tengely körül tetszőleges lehet. Ennek az a következménye, hogy ha  $\gamma$ -t  $(\gamma + \gamma_0)$ -val helyettesítjük, akkor a sajátfüggvény sajátfüggvény marad.

Ezenfelül az ilyen függvényeknek az

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} \psi_{\mu}^{NI}(\alpha, \beta, \gamma + \gamma_0) e^{-i\gamma_0} d\gamma_0 = \\ & = \sum_{\lambda} (-1)^{\mu-\lambda} G_{\lambda}^{NI} e^{+i\mu\lambda} d^{(l)}(\beta)_{\mu\lambda} e^{+i\lambda\gamma} \int e^{i\gamma_0(\lambda-\nu)} d\gamma_0 = \\ & = (\text{állandó}) \cdot (-1)^{\mu-\nu} G_{\nu}^{NI} D^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu\nu} \end{aligned} \quad (19.11)$$

lineáris kombinációja is sajátfüggvény. Ha  $G_{\nu}^{NI}$  nem zérus, akkor (19.11)-ből látszik, hogy a sajátfüggvények így írhatók<sup>5</sup>:

$$\psi_{\mu}^{\nu l}(\alpha, \beta, \gamma) = (-1)^{\mu-\nu} D^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu\nu} \quad (19.11a)$$

$$(\nu = -l, -l+1, \dots, l-1, l).$$

Később, amikor a tükrözési szimmetriát is figyelembe vesszük, kitűnik majd, hogy a sajátértékek páronként egyenlők:  $E_{\nu l} = E_{-\nu l}$ , tehát  $l+1$  különböző sajátértéknek egyforma pályakvantumszáma van.

Ha mindhárom tehetetlenségi nyomaték egyenlő, akkor a normális helyzet teljesen határozatlan. A (19.11a) sajátfüggvények maradnak, ha  $\{\alpha, \beta, \gamma\}$  helyére  $\{\alpha, \beta, \gamma\}R$  kerül, ahol  $R$  tetszőleges forgatás. Így

$$(-1)^{\mu-\nu} D^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu\nu} = \sum_{\kappa} (-1)^{\mu-\nu} D^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu\kappa} D^{(l)}(R)_{\kappa\nu},$$

továbbá

$$\begin{aligned} & \int \sum (-1)^{\mu-\nu} D^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu\kappa} D^{(l)}(R)_{\kappa\nu} D^{(l)}(R)_{\lambda\nu}^* dR = \\ & = (\text{állandó}) \cdot (-1)^{\mu-\lambda} D^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu\lambda} \end{aligned} \quad (19.12)$$

mindketten ugyanahhoz a sajátértékhez tartoznak, mint  $(-1)^{\mu-\lambda} D^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu\lambda}$ . Ezért ebben az esetben az összes  $E_{-l, l}, E_{-l+1, l}, \dots, E_{l, l}$  sajátérték egybeesik, minden pályakvantumszámhoz egyetlen  $(2l+1)^2$ -szeresen elfajult sajátérték tartozik.

<sup>5</sup> Az állapotot az  $l, \mu$  és  $N$  kvantumszám jellemzi, ez utóbbi különbözteti meg egymástól az azonos  $l$ -ű és  $\mu$ -jű állapotokat. Esetünkben  $N$  éppen  $\nu$ .

Ha tehát legalább két tehetetlenségi nyomaték egyenlő, akkor (19.11a) szolgáltatja a sajátfüggvényeket. A megfelelő sajátértékeket kiszámíthatjuk, ha minden sajátértékre a sajátfüggvényt (például  $D^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\nu\nu}$ -t) behelyettesítjük a *Schrödinger*-egyenletbe, majd  $\alpha$ ,  $\beta$  és  $\gamma$  értéket választunk, amelyre  $\psi_{\mu}^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma)$  nem tűnik el (ilyen esetünkben  $\alpha = \beta = \gamma = 0$ ) és osztunk  $\psi_{\mu}^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma)$ -val.

A szimmetrikus pörgettyű<sup>6</sup> *Schrödinger*-egyenletét hipergeometrikus függvények segítségével közvetlenül is megoldhatjuk.<sup>7</sup> Az összefüggés az ábrázolási együtthatók és a hipergeometrikus függvények között a következő:

$$d^{(l)}(\beta)_{\mu\nu} = \sqrt{\frac{(l-\nu)!(l+\mu)!}{(l+\nu)!(l-\mu)!}} \cdot \frac{\cos^{2l+\nu-\mu} \frac{1}{2} \beta \sin^{\mu-\nu} \frac{1}{2} \beta}{(\mu-\nu)!} \times \\ \times F(\mu-l, -\nu-l, \mu-\nu+1, -\tan^2 \frac{1}{2} \beta). \quad (19.13)$$

4. Mielőtt áttérnénk a paritás tárgyalására, még levezetjük a

$$d^{(l)}(\pi-\beta)_{\mu\nu} = (-1)^{l-\mu} d^{(l)}(\beta)_{\mu, -\nu} \quad (19.14)$$

összefüggést. A 15. fejezetben az ábrázolás együtthatóit teljesen meghatároztuk;  $d^{(l)}(\beta)_{\mu\nu}$ -t (15.27)-ből vesszük:

$$d^{(l)}(\beta)_{\mu\nu} = \sum_{\kappa} (-1)^{\kappa} \frac{\sqrt{(l+\mu)!(l-\mu)!(l+\nu)!(l-\nu)!}}{(l-\mu-\kappa)!(l+\nu-\kappa)!\kappa!(\kappa+\mu-\nu)!} \times \\ \times \cos^{2l-\mu+\nu-2\kappa} \frac{1}{2} \beta \sin^{2\kappa+\mu-\nu} \frac{1}{2} \beta. \quad (19.15)$$

E kifejezésben  $\beta$  helyébe  $\pi-\beta$ -t írva a  $\cos$   $\sin$ -ba, a  $\sin$  pedig  $\cos$ -ba megy át (mivel  $\cos(\frac{1}{2}\pi-x) = \sin x$ ). Ha ugyanekkor a  $\kappa$  összegezési index helyett a  $\kappa' = l-\mu-\kappa$

<sup>6</sup> A szimmetrikus pörgettyű kvantummechanikájával a következők foglalkoztak:

H. RADEMACHER, F. REICHE, Z. Physik **39**, 444 (1926); **41**, 453 (1927).

R. DE L. KRONIG, I. I. RABI PR **29**, 262 (1927).

C. MANEBACK, Zeitschr. f. Phys. **28**, 76 (1927).

J. H. van VLECK, PR **33**, 476 (1929).

Az aszimmetrikus pörgettyűvel kapcsolatosak a következő munkák:

E. E. WITMER, Proc. Nat. Acad. **13**, 60 (1927).

S. C. WANG, PR **34**, 243 (1929).

H. A. KRAMERS, G. P. ITTMANN, Zeitschr. f. Phys. **53**, 553 (1929); **58**, 217 (1929); **60**, 663 (1930).

O. KLEIN, Zeitschr. f. Phys. **58**, 730 (1929).

H. CASIMIR, Zeitschr. f. Phys. **59**, 623 (1930).

<sup>7</sup> Lásd például P. M. MORSE, H. FESHACH: Methods of Theoretical Physics. (McGraw-Hill, New York, 1953) I. rész 388. és 542. o.

jelölést vezetünk be, akkor (19.15) így alakul át:

$$d^{(l)}(\pi-\beta)_{\mu\nu} = \sum_{\kappa'} (-1)^{l-\mu-\kappa'} \frac{\sqrt{(l+\mu)!(l-\mu)!(l+\nu)!(l-\nu)!}}{\kappa'!(\mu+\nu+\kappa')!(l-\mu-\kappa')!(l-\nu-\kappa')!} \times \\ \times \sin^{2\kappa'+\mu+\nu} \frac{1}{2} \beta \cos^{2l-\mu-\nu-2\kappa'} \frac{1}{2} \beta. \quad (19.16)$$

Tekintve, hogy  $\kappa'$  egész, azért  $(-1)^{\kappa'} = (-1)^{-\kappa'}$ , tehát (19.16) bal oldala éppen  $(-1)^{l-\mu} d(\beta)_{\mu-\nu}$ , s így (19.14)-re jutottunk.

Egytest-problémában a hullámfüggvény tükrözési jellegét annak szögfüggése határozza meg. „Egyláb” esetén a  $\mathbf{P}_I$  tükrözés abból áll, hogy  $\varphi$ -t ( $\varphi+\pi$ )-vel,  $\theta$ -t pedig  $(\pi-\theta)$ -val helyettesítjük, a „láb”  $r$  hossza eközben változatlan marad. E helyettesítéskor (19.9b) így alakul át:

$$\mathbf{P}_I \psi_{\mu}^{Nl}(r, \vartheta, \varphi) = (-1)^{\mu} e^{+i\mu(\varphi \pm \pi)} d^{(l)}(\pi-\vartheta)_{\mu 0} G^{Nl}(r) = \\ = e^{+i\mu\pi} (-1)^{l-\mu} d^{(l)}(\vartheta)_{\mu 0} G^{Nl}(r) = (-1)^l \psi_{\mu}^{Nl}(r, \vartheta, \varphi) \quad (19.17)$$

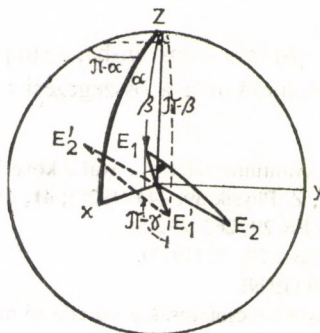
*Páros l-re a paritás páros, páratlanra pedig páratlan*<sup>8</sup>.

Két független részecskénél — ez a héliumatom esete — (19.6) szerint

$$\psi_{\mu}^L = \sum_{\lambda} (-1)^{\mu-\lambda} D^{(L)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu\lambda} G_{\lambda}(r_1, r_2, \varepsilon), \quad (19.18)$$

mert az elrendezést a kétláb geometriája szabja meg, ez viszont a kétláb  $r_1, r_2$  hosszával és az általuk bezárt  $\varepsilon$  szöggel jellemezhető. Tükrözéskor csupán a kétláb helyzete változik meg, geometriai alakja azonban nem.

Ha tükrözést hajtunk végre,  $\alpha, \beta$  és  $\gamma$  átmeny  $\alpha \pm \pi$ -be,  $\pi - \beta$ -ba illetőleg  $\pi - \gamma$ -ba (lásd a 11. ábrát).<sup>9</sup>



11. ábra

*A kétláb viselkedése tükrözéskor*

<sup>8</sup> Így a  $\Delta l=0$  optikai átmenet tiltott egy elektronos rendszernél, tekintve, hogy így a paritásnak nem szabadna megváltoznia.

<sup>9</sup> A 11. ábrán az egyszerűség kedvéért feltettük, hogy  $r_1=r_2=1$ . Az  $E_1$  és  $E_2$  pont a két elektron helyzete az inverzió előtt,  $E_1'$  és  $E_2'$  pedig utána.

Ezért

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_I \psi_\mu^L &= \sum_\lambda (-1)^{\mu-\lambda} \mathbf{D}^{(L)}(\{\alpha \pm \pi, \pi - \beta, \pi - \gamma\})_{\mu\lambda} G_\lambda = \\ &= \sum_\lambda (-1)^{\mu-\lambda} \mathbf{D}^{(L)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu, -\lambda} (-1)^{L+\lambda} G_\lambda, \end{aligned} \quad (19.18a)$$

hiszen (19.14) miatt

$$\begin{aligned} \mathbf{D}^{(L)}(\{\alpha \pm \pi, \pi - \beta, \pi - \gamma\})_{\mu\lambda} &= e^{i\mu(\alpha \pm \pi)} d^{(L)}(\beta)_{\mu, -\lambda} (-1)^{L-\mu} \times \\ &\times e^{i\lambda(\pi - \gamma)} = (-1)^{L+\lambda} \mathbf{D}^{(L)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu, -\lambda}. \end{aligned} \quad (19.14a)$$

Így tehát a páros szintekre érvényes  $\mathbf{P}_I \psi_\mu = \psi_\mu$ -ből következik, hogy

$$G_{-\lambda}(r_1, r_2, \varepsilon) = (-1)^{L+\lambda} G_\lambda(r_1, r_2, \varepsilon), \quad (19.19)$$

míg páratlan szinteknél,<sup>10</sup> amikor  $\mathbf{P}_I \psi_\mu = -\psi_\mu$ ,

$$G_{-\lambda}(r_1, r_2, \varepsilon) = (-1)^{L+\lambda} G_\lambda(r_1, r_2, \varepsilon). \quad (19.19a)$$

A  $G_0$  függvény csak akkor nem zérus, ha  $w = (-1)^L$  (ilyenek az  $S_+$ ,  $P_-$ ,  $D_+$  stb.). Ebből következik, hogy a héliumnak nincs  $S_-$  szintje: az  $S$  szint hullámfüggvényeinek értéke egyforma a kétláb minden helyzetére, az  $S$  szinteknek tehát szükségképp pozitív a paritása.

(19.6)-ot a *Schrödinger*-egyenletbe helyettesítve és  $\alpha$ ,  $\beta$ , valamint  $\gamma$  hasonló függvényeinek együtthatóit egyenlővé téve  $2L+1$  egyenlet adódik az  $n$ -láb alakját leíró változók ( $2L+1$ ) számú  $G_{-L}$ ,  $G_{-L+1}$ , ...,  $G_{L-1}$ ,  $G_L$  függvényére. *He* esetében a független függvények száma (19.19) és (19.19a) segítségével lényegesen csökkenthető; az  $S_+$ ,  $P_+$  szintekre egy,  $P_-$  és  $D_-$  esetén kettő,  $D_+$  és  $F_+$  esetén három ismeretlen függvény marad.<sup>11</sup>

Több elektron esetében az  $n$ -láb inverziója nem helyettesíthető tiszta forgatással. A tükrözés az  $n$ -lábát annak „optikai izomerjébe”, vagyis tükörképébe transzformálja. Ennek csak akkor van az eredetitől különböző geometriai alakja, ha  $n \geq 3$ .  $n=2$  esetén ez nem igaz; a kétláb geometriai alakja mindig megegyezik izomerjének, vagyis tükörképének az alakjával.

Ha a  $g$ -vel izomer  $n$ -láb alakját jellemző koordinátákat  $\bar{g}$ -vel jelöljük, akkor (19.6) és (19.14a), valamint a *II. ábra* szerint

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_I \psi_\mu^L &= \sum_\lambda (-1)^{\mu-\lambda} \mathbf{D}^{(L)}(\{\alpha \pm \pi, \pi - \beta, \pi - \gamma\})_{\mu\lambda} G_\lambda(\bar{g}) = \\ &= \sum_\lambda (-1)^{\mu-\lambda} \mathbf{D}^{(L)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu, -\lambda} (-1)^{L+\lambda} G_\lambda(\bar{g}). \end{aligned}$$

<sup>10</sup> Az is igaz az aszimmetrikus pörgettyűnél, hogy az  $l$  pályakvantumszámú sajátértékre  $l+1$  számú  $G_\lambda$ -ra  $G_{-\lambda} = G_\lambda$  és  $l$  számára pedig  $G_{-\lambda} = G_\lambda$ . Így a  $(2l+1)$ -edfokú szekuláris egyenlet egy  $(l+1)$ -edfokú és egy  $l$ -edfokú egyenletre esik szét. Tekintve, hogy (19.14) miatt  $\psi_\mu^{-nl}$  és  $\psi_\mu^{nl}$  inverziókor egymásba transzformálódnak át mindketten, ugyanahhoz a sajátértékhez tartoznak.

<sup>11</sup> Lásd G. BREIT, Phys. Rev. 35, 369 (1930).

Másrészt

$$\mathbf{P}_\gamma \psi_\mu^L = w \psi_\mu = \sum_\lambda w (-1)^{\mu-\lambda} \mathbf{D}^L(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu\lambda} G_\lambda(g).$$

Itt páratlan szintre  $w = +1$ , párosra pedig  $w = -1$ .

Ebből következik, hogy

$$(-1)^{L+\lambda} G_\lambda(\bar{g}) = w G_{-\lambda}(g). \quad (19.20)$$

(19.20) nem használható fel a sajátfüggvények explicit kiszámítására, azt azonban megmutatja, hogy a sajátfüggvényeknek a tükrözési csoporttal szemben mutatott szimmetriája segítségével hogyan kapható a sajátfüggvények alakjára vonatkozó és a (19.6) egyenleten túlmenő ismeret. Azonban nem reménykedhetünk abban, hogy e csoport vizsgálatával túlságosan sok új információt nyerünk. Az inverzió csak annyit enged meg, hogy a konfigurációs tér két pontjában hasonlítsuk össze a hullámfüggvényt, míg a forgáscsoportnál arra nyílik lehetőség, hogy e függvény értékeit a pontok egy folytonos, három paraméteres sokaságán viszonyítsuk egymáshoz. Ennek megfelelően három változót a forgáscsoport segítségével kiküszöbölhetünk, noha ennek ellenében a  $G_{-L}, \dots, G_L$  ismeretlen függvények száma megnő. Ez a  $2L+1$  szám a tükrözési csoport segítségével esetleg kissé csökkenthető, de az így elért egyszerűsödés viszonylag nem nagy.

Természetes arra törekedni, hogy az elektronok permutációival szemben mutatott szimmetriát felhasználjuk az ismeretlen függvények számának további csökkentésére. Ez bizonyos mértékig lehetséges is, ám az eme eljárás során felbukkanó megfontolások nem olyan egyszerűek, mint az előzőek, amikor az első és a második elektron a többitől eltérő szerepet játszott ( $\alpha$  és  $\beta$  az első elektron azimut- és polárszöge). Így az elektronok felcserélhetőségének figyelembevételéből adódó képletek meglehetősen bonyolultak. Ezeket itt nem adjuk meg.



## 20. AZ ELEKTRONSPIN

### PAULI ELMÉLETÉNEK FIZIKAI ALAPJAI

1. Az előző fejezetben megvizsgáltuk az atomszínképek ama legfontosabb tulajdonságait, amelyek az elektronspin levezetése nélkül is értelmezhetők. A kevésbé szembeötlő jellegzetességek közül azonban jónéhányat — ezek közt talán a finomszerkezet a legfontosabb — nem írhattuk le, mert ezek az elektron egy további sajátságával, mégpedig saját mágneses momentumával kapcsolatosak.

Azt a feltételezést, hogy az elektron mágneses momentummal és impulzusmomentummal, vagy röviden „spinnel” rendelkezik, GOUDSMIT és UHLENBECK vették fel. Még a kvantummechanika felfedezése előtt vették észre, hogy a színképek kimerítő leírása nem lehetséges, hacsak az elektron nem rendelkezik mágneses és mechanikai momentummal; a csupán ponttöltést takaró elektronfogalom nem volt kielégítő. Amint az a klasszikus elektrodinamikából jól ismert, a mágnes a mágneses momentum tengelye körül keringő ponttöltéssel egyenértékű. Ekkor a mágneses momentum  $\mathbf{M}$  vektorát az  $\mathbf{L}$  impulzusmomentumból a következőképpen lehet kiszámítani:

$$\mathbf{M} = \frac{e}{2mc} \mathbf{L} = \eta \mathbf{L}, \quad (20.E1)$$

ahol  $e$  a keringő részecske töltése,  $m$  pedig a tömege. GOUDSMIT és UHLENBECK szerint azonban (20.E.1) nem érvényes a spinből származó mágneses momentumra, ha az elektron normális töltését és tömegét használjuk. Ehelyett fel kell tennünk hogy az impulzusmomentum nagysága

$$|\mathbf{S}| = \frac{1}{2} \hbar, \quad (20.1)$$

és hogy a mágneses momentum egy *Bohr*-magneton:

$$|\mathbf{M}| = e\hbar/2mc = (e/mc)|\mathbf{S}| = 2\eta|\mathbf{S}|. \quad (20.1a)$$

Az elektron kvantummechanikája azonban azt mutatja, hogy ezeket az állításokat nem lehet betű szerint elfogadni. Még a *Pauli*-elméletből is következik, hogy nem hajtható végre olyan kísérlet, amelyikkel meghatározható volna a mechanikai vagy mágneses momentum iránya (tehát mondjuk az iránykoszinuszok). Csak

valamely irány és annak ellentettje között lehet különbséget tenni. A különböző térbeli spinirányokra vonatkozó kérdésnek tehát nincs értelme, vagyis kísérlettel nem adható rá válasz, és csak a spinnek egyetlen irányra vetett vetületét lehet megmérni. E mérések — ezekre példa a *Stern—Gerlach*-kísérlet — csak két választ adhatnak: a spin vagy a kérdéses irányba mutat, vagy azzal ellentétesen áll. A kísérlet eredménye csak az lehet, hogy az impulzusmomentum kérdéses irányú komponense vagy  $+\frac{\hbar}{2}$  vagy  $-\frac{\hbar}{2}$ . Ha az előző eredmény adódik a spin  $Z$  irányú komponensének mérésekor, akkor egy a  $Z$  komponensnek ezt azonnal követő második mérésekor az eredmény *biztosan*  $+\frac{\hbar}{2}$  és *biztosan nem*  $-\frac{\hbar}{2}$  lesz. Az  $Y$  komponens mérésének lehetséges eredménye azonban  $+\frac{\hbar}{2}$  és  $-\frac{\hbar}{2}$  lesz egyforma valószínűséggel. Ezért lényeges, hogy a spin minden irányához független valószínűségeket rendeljünk hozzá; még akkor is, ha a spin biztosan a  $Z$  irányba mutat (tehát az impulzusmomentum  $Z$  komponense biztosan  $+\frac{\hbar}{2}$ ), a  $+Y$  irány valószínűsége  $\frac{1}{2}$  és minden irány valószínűsége különbözik zérustól, kivéve a  $-Z$ -t.

A spin a *Dirac*-féle relativisztikus elektronelméletben még szimbolikusabb jellegűt kap, amint azt különösen N. BOHR hangsúlyozta. Eme elmélet (amelyet itt nem tárgyalunk) szerint a mágneses momentum léte teljes mértékben relativisztikus effektus, amely automatikusan fellép, ha a teret és az időt egyenértékűen kezeljük.

2. A *Pauli*-elméletben a mágneses momentumot egy új  $s$  koordináta írja le; a hullámfüggvény alakja így a következő:  $\Phi(x, y, z, s)$ . Míg  $x, y$  és  $z$  tartománya  $-\infty$ -tól  $+\infty$ -ig terjed,  $s$  csak két értéket vehet fel:  $-1$ -et és  $+1$ -et. Az elektron hullámfüggvénye ezért tulajdonképpen két függvényből áll; ezek  $\Phi(x, y, z, -1)$  és  $\Phi(x, y, z, +1)$ . Az, hogy az  $s$  változó  $(x, y, z)$ -vel ellentétben csak két értéket vehet fel, azt tükrözi, hogy a spinnek mondjuk a  $Z$  irányú komponense csak kétféle lehet  $\left(+\frac{\hbar}{2} \text{ és } -\frac{\hbar}{2}\right)$ , míg a helykoordináták  $+\infty$  és  $-\infty$  között minden értéket befuthatnak.

Az  $x, y, z$  és  $s$  két függvényének skalárszorzatát a már szóba került skalárszorzatok közvetlen általánosításával definiáljuk. Két függvénynek,  $\varphi(x, y, z)$ -nek és  $g(x, y, z)$ -nek skalárszorzatát úgy kapjuk, hogy a

$$\sum_{x, y, z} \varphi(x, y, z)^* g(x, y, z)$$

határértéket vesszük; itt az összegezést az egész  $-\infty, +\infty$  tartományra ki kell terjeszteni. Hasonló módon  $\Phi(x, y, z, s)$ -nek és  $G(x, y, z, s)$ -nek a skalárszorzata

$$\sum_{s=\pm 1} \sum_{x, y, z} \Phi(x, y, z, s) * G(x, y, z, s). \quad (20.2)$$

Itt az összegezést ismét a változók teljes tartományára kell elvégezni. A határértékre áttérve kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} (\Phi, G) &= \sum_{s=\pm 1} \int \int \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi(x, y, z, s) * G(x, y, z, s) dx dy dz = \\ &= \int \int \int_{-\infty}^{+\infty} [\Phi(x, y, z, -1) * G(x, y, z, -1) + \\ &\quad + \Phi(x, y, z, +1) * G(x, y, z, +1)] dx dy dz. \end{aligned} \quad (20.3)$$

3. Azok a mennyiségek, amelyekben csupán a *Descartes*-féle koordináták fordulnak elő, továbbra is a fizikai mennyiségek fontos osztályát alkotják. Ezek — mint például az  $x$  koordináta vagy a sebesség — olyan elméletben is jelentéssel bírnak, amelyben a spint egyáltalán nem veszik figyelembe. Azokat a kísérleteket, amelyek az ilyen mennyiségek mérésére szolgálnak, „spinmentes” kísérleteknek fogjuk nevezni. Maguk e mennyiségek a *Pauli*-elméletben olyan operátoroknak felelnek meg, amelyek csupán az  $x, y, z$  *Descartes* koordinátákra hatnak, ilyenkor tehát az  $s$  spinkoordinátát paraméterként lehet kezelni.

Élesítsük az olyan operátorok fogalmát, amelyek csupán koordinátákra hatnak. Minden olyan  $\mathbf{X}$  operátor, amely egy  $\xi$  változó valamilyen  $f(\xi)$  függvényére alkalmazható (ilyen például a differenciálás  $\xi$  szerint), alkalmazható kétváltozós függvényre is, hiszen két változónak bármely  $F(\xi, \sigma)$  függvénye felfogható, mint a  $\xi$  változó függvényeinek egy családja, hiszen  $\sigma$  bármilyen kiszemelt rögzített értékére  $F(\xi, \sigma)$  csupán  $\xi$  függvénye<sup>1</sup>. Ha az  $\mathbf{X}$  operátort ilyen függvényre alkalmazzuk, akkor  $\xi$ -nek egy másik függvénycsaládját kapjuk; egyet-egy  $\sigma$  minden egyes értékére. Ez a család alkotja tehát az  $\mathbf{X} F(\xi, \sigma)$  függvényt. Ily módon az az állítás, hogy  $\mathbf{X}$  csupán  $\xi$ -re hat, azt jelenti, hogy  $\mathbf{X} F$  értéke a  $\xi, \sigma$  helyen csupán  $F(\xi', \sigma')$ -nak  $\sigma' = \sigma$  helyen felvett értékeitől függ.

Legyen most  $\Psi_k(x, y, z, s)$  olyan  $\mathbf{H}$  operátor sajátfüggvénye, amely csak  $x, y, z$ -re hat. Ha  $\lambda_k$  a megfelelő sajátérték, akkor az  $x, y, z, s$ -től függő

$$\mathbf{H} \Psi_k(x, y, z, s) - \lambda_k \Psi_k(x, y, z, s) \quad (20.4)$$

<sup>1</sup>  $\xi$  az  $x, y, z$  koordinátahármas  $\sigma$  pedig az  $s$  spinkoordinátát jelöli.

kifejezésnek el kell tűnnie, vagyis e család mindkét tagjának ( $s = +1$  és  $s = -1$ ) zérusnak kell lennie:

$$\mathbf{H} \Psi_k(x, y, z, -1) - \lambda_k \Psi_k(x, y, z, -1) = 0,$$

$$\mathbf{H} \Psi_k(x, y, z, +1) + \lambda_k \Psi_k(x, y, z, +1) = 0.$$

Ha adott  $\lambda_k$ -ra a

$$\mathbf{H} \Psi_k(x, y, z) = \lambda_k \Psi_k(x, y, z)$$

egyenletnek csak egy megoldása van, akkor mind  $\Psi_k(x, y, z, +1)$ , mind pedig  $\Psi_k(x, y, z, -1)$  szükségképpen  $\psi_k(x, y, z)$ -nek állandószorosa:<sup>2</sup>

$$\begin{aligned} \Psi_k(x, y, z, -1) &= u_{-1} \psi_k(x, y, z); \\ \Psi_k(x, y, z, +1) &= u_1 \psi_k(x, y, z); \\ \Psi_k(x, y, z, s) &= u_s \psi_k(x, y, z). \end{aligned} \quad (20.5)$$

Akárhogyan választjuk is meg  $u_{-1}$ -et és  $u_1$ -et,  $u_s \psi_k(x, y, z)$  a  $\mathbf{H}$ -nak  $\lambda_k$  sajátértékhez tartozó sajátfüggvénye marad. Ebből látszik, hogy az  $s$  spinkoordináta bevezetésével  $\lambda_k$  kétszeres sajátérték lett, és két lineárisan független egymásra ortogonális sajátfüggvény tartozik hozzá:

$$\Psi_{k-} = \delta_{s,-1} \psi_k(x, y, z), \quad (20.5a)$$

$$\Psi_{k+} = \delta_{s,+1} \psi_k(x, y, z). \quad (20.5b)$$

$\Psi_{k-}$  és  $\Psi_{k+}$  skalárszorzata valóban eltűnik, mivel (20.3) integrandusának mindkét tagjában az egyik tényező zérus.

A

$$\delta_{s,-1} \psi_1; \quad \delta_{s,+1} \psi_1; \quad \delta_{s,-1} \psi_2; \quad \delta_{s,+1} \psi_2; \quad \delta_{s,-1} \psi_3$$

sajátfüggvények egyidőben végrehajtott két mérés lehetséges eredményeinek felelnek meg: az egyik a  $\mathbf{H}$ -nak megfelelő mennyiség, a másik a spin  $Z$  komponensének a mérése.  $\Psi_{k-}$  esetében az első mennyiség értéke biztosan  $\lambda_k$  és a spin biztosan a  $-Z$  irányba mutat,  $\Psi_{k+}$  esetében viszont az első mennyiség továbbra is biztosan  $\lambda_k$ , de a spin a  $+Z$  irányban áll, vagyis zérus annak valószínűsége, hogy a  $-Z$  irányba mutat. Általában ha a hullámfüggvény

$$\Phi = a_1 \Psi_{1-} + a_2 \Psi_{2-} + a_3 \Psi_{3-} + \dots + b_1 \Psi_{1+} + b_2 \Psi_{2+} + b_3 \Psi_{3+} + \dots \quad (20.6)$$

alakú, akkor annak vakószínűsége, hogy  $\mathbf{H}$  értéke  $\lambda_k$  és ugyanakkor a spin  $-Z$  irányú,  $|a_k|^2$ -tel egyenlő; annak valószínűsége pedig, hogy  $\mathbf{H}$  értéke  $\lambda_k$  és a spin  $+Z$  irányú,  $|b_k|^2$ .

<sup>2</sup> Talán zavarólag hat, hogy  $s$  az egyenlet bal oldalán mint változó, a jobb oldalán mint index szerepel. Azonban ezzel ismét azt hangsúlyozzuk, hogy  $x, y, z$  és  $s$  minden függvénye felfogható, mint  $x, y, z$ -nek valamely függvénye valamelyik  $s$  érték mellett.

## A LEÍRÁS INVARIANCIÁJA TÉRBELI FORGATÁSOKKAL SZEMBEN

Ha egy elektront olyan hullámfüggvénnyel írjuk le, amely  $s$ -től függ, akkor a  $Z$  tengelyt minden más iránnyal szemben, még a két másik koordinátatengellyel szemben is kitüntettük. Helyénvaló tehát megvizsgálni azt, hogy a tér izotrópiája e leírásban miként őrződik meg, vagyis hogy egy másik megfigyelő a  $\Phi$  állapot helyett milyen  $\mathbf{O}_R\Phi$  hullámfüggvényt használ, ha a fizikai rendszereket és az összes mennyiséget *pontosan ugyanúgy írja le, mint az első megfigyelő, csak koordináta-rendszere van az előzőéhez képest elforgatva. A két koordináta-rendszer olyan helyzetű, hogy az  $(x, y, z)$  pont koordinátái a második tengelyrendszerben a következők:*

$$x' = R_{xx}x + R_{xy}y + R_{xz}z,$$

$$y' = R_{yx}x + R_{yy}y + R_{yz}z,$$

$$z' = R_{zx}x + R_{zy}y + R_{zz}z.$$

( $\mathbf{R}$  valós ortogonális, háromdimenziós mátrix, melynek determinánsa 1.)  $\mathbf{O}_R\Phi$  vagy úgy definiálható, mint a  $\Phi$  állapot hullámfüggvénye, amelyet a második megfigyelő észlel, vagy mint az  $R$ -rel elforgatott eredeti állapot hullámfüggvénye, amelyet az eredeti megfigyelő észlel.

Amikor a hullámfüggvények csupán a *Descartes*-koordinátáktól függnek, akkor az  $\mathbf{O}_R$  operáció csupán ponttranszformáció (lásd a 11. fejezetet):

$$\mathbf{P}_R \varphi(x', y', z') = \varphi(x, y, z). \quad (20.7)$$

A (20.7) egyenlet egyszerűen azt mondja ki, hogy a második megfigyelő  $\mathbf{P}_R\varphi$  hullámfüggvénye ugyanolyan értéket vesz fel az  $(x', y', z)$  pontban, mint az elsőé az  $(x, y, z)$  pontban. Ennek igaznak kell lennie, hiszen az  $(x, y, z)$  pontot a második megfigyelő  $(x', y', z')$ -nek nevezi.

Ha a *Descartes*-koordináták mellett a spinkoordinátákat is figyelembe vesszük, akkor az  $\mathbf{O}_R$  transzformáció nem lehet egyszerű ponttranszformáció, hiszen  $s$  nem vehető alá ponttranszformációnak. Ezért  $\mathbf{O}_R$  általánosabb operátor lesz, mint  $\mathbf{P}_R$ . Feltesszük, hogy  $\mathbf{O}_R$  operátorok rendszere létezik (minden  $R$  forgatásnak megfelel egy  $\mathbf{O}_R$  operátor). Törekedjünk azt a *Pauli*-elmélet alapfeltevéseiből és abból kiindulva meghatározni, hogy különböző koordinátatengely-rendszereket használó megfigyelők egyenértékűek. Azt találjuk majd, hogy *lényegében egyetlen olyan operátorrendszer létezik, amely e feltételeket kielégíti.* Ennek meghatározásával a spines elektron tulajdonságaira vonatkozóan fontos következtetéseket vonhatunk majd le.

5. Annak a leírásnak, hogy a második megfigyelő a  $\Phi$  állapotot az  $\mathbf{O}_R\Phi$  saját-függvénnyel jellemzi, az eredetivel teljesen egyenértékűnek kell lennie. Nevezetesen

két tetszőleges  $\Psi$  és  $\Phi$  állapot között ugyanolyan átmeneti valószínűségeket kell adnia, mint az elsőnek:

$$|(\Psi, \Phi)|^2 = |(\mathbf{O}_R \Psi, \mathbf{O}_R \Phi)|^2. \quad (20.8)$$

Itt azonban fontos észrevennünk azt, hogy noha a  $\Phi$  állapotot (amelyet az elforgatott koordináta-rendszerű megfigyelő  $\mathbf{O}_R \Phi$  állapotnak lát) teljesen meghatározza a hullámfüggvénye, a második megfigyelő hullámfüggvénye erre az állapotról nincs egyértelműen rögzítve; ugyanis megszorozható tetszőleges olyan  $c$  állandóval, amelynek abszolútértéke 1, mert az  $\mathbf{O}_R \Phi$  és a  $c \mathbf{O}_R \Phi$  hullámfüggvények ugyanazt a fizikai helyzetet írják le. Ez azt jelenti, hogy az  $\mathbf{O}_R$  operátor sok értékű; minden  $\Phi$  függvényre még egy tetszőleges tényezőt tartalmaz. Megmutatjuk majd (lásd a fejezet végén a függelék), hogy e szabadsággal élve  $\mathbf{O}_R$  úgy választható meg, hogy tetszőleges  $\Psi$  és  $\Phi$  esetén teljesüljön a

$$(\Psi, \Phi) = (\mathbf{O}_R \Psi, \mathbf{O}_R \Phi)$$

és az

$$\mathbf{O}_R(a\Psi + b\Phi) = a\mathbf{O}_R\Psi + b\mathbf{O}_R\Phi \quad (20.8a)$$

összefüggés (itt  $a$  és  $b$  állandó); vagyis ily módon  $\mathbf{O}_R$  lineáris unitér operátorrá válik. Ekkor azonban az eredeti rendszer megfigyelőjének és az elforgatott tengelyrendszer megfigyelőjének kétféle leírása egymástól csupán egy kanonikus transzformáció erejéig különbözik, ami biztosítja azok teljes fizikai egyenértékűségét. A második megfigyelő a  $\Phi$  hullámfüggvényű állapotot  $\mathbf{O}_R \Phi$ -nek látja; az első megfigyelő  $\mathbf{H}$  operátorának megfelelő mennyiség az ő számára  $\mathbf{O}_R \mathbf{H} \mathbf{O}_R^{-1}$  lesz.

Fordítva a (20.8) kikötés, mely szerint  $\mathbf{O}_R$  lineáris unitér operátor, a  $c_\Phi$  állandókat egy kivételével az összes hullámfüggvényre rögzíti. Ha az  $\mathbf{O}_R \Phi$  hullámfüggvény helyébe  $c \mathbf{O}_R \Phi$ -t írunk, akkor (20.8)-at csak úgy tarthatjuk érvényben, ha az összes hullámfüggvényt  $c$ -vel megszorozzuk. Ezt úgy láthatjuk be, hogy  $\mathbf{O}_R \Phi$ -t  $c \mathbf{O}_R \Phi$ -vel helyettesítjük, míg mondjuk  $\mathbf{O}_R \Psi$ -t változatlanul hagyjuk. Ha (20.8) erre az új rendszerre is igaz, akkor

$$(\Psi, \Phi) = (\mathbf{O}_R \Psi, c \mathbf{O}_R \Phi) = c(\mathbf{O}_R \Psi, \mathbf{O}_R \Phi).$$

Ez pedig (20.8a)-val együtt azt adja, hogy  $c = 1$ . A következőkben  $\mathbf{O}_R \Phi$ -t mindig úgy választjuk, hogy (20.8a) teljesüljön; ekkor valamennyi  $\mathbf{O}_R \Phi$ -ben (itt  $R$  adott forgatás) csak egyetlen állandó marad szabadon. Ez az állandó viszont függhet  $R$ -től.

6. Tekintsük most a  $\Psi_- = \psi(x, y, z) \delta_{s,-1}$  és a  $\Psi_+ = \psi(x, y, z) \delta_{s,1}$  állapotokat Spinmentes kísérletben mindkettő úgy viselkedik, mintha hullámfüggvényük  $\psi(x, y, z)$  lenne. Ezért az elforgatott rendszer megfigyelője számára (legalábbis spinmentes kísérletek esetében) eme állapotok hullámfüggvénye  $\mathbf{P}_R \psi(x, y, z)$  lesz.

Ezért (20.5) miatt az  $\mathbf{O}_R \Psi_-$  és  $\mathbf{O}_R \Psi_+$  hullámfüggvényeknek szükségképpen

$$\mathbf{O}_R \delta_{s,1} \psi(x, y, z) = u_{s,-1} \mathbf{P}_R \psi(x, y, z) \quad (20.9)$$

$$\mathbf{O}_R \delta_{s,1} \psi(x, y, z) = u_{s,1} \mathbf{P}_R \psi(x, y, z)$$

alakúaknak kell lenniük; itt  $u_{s,-1}$  és  $u_{s,1}$   $x, y, z$ -től független, de egyelőre különbözőeknek más és más  $\psi$ -re. Ha azonban  $\varphi$  olyan  $\psi$ -től különböző állapot, amelyre

$$\mathbf{O}_R \delta_{s,-1} \varphi(x, y, z) = \bar{u}_{s,-1} \mathbf{P}_R \varphi(x, y, z)$$

érvényes, akkor  $\mathbf{O}_R$  lineáris voltából következik, hogy

$$\begin{aligned} \mathbf{O}_R \delta_{s,-1} (\varphi + \psi) &= \bar{u}_{s,-1} \mathbf{P}_R (\varphi + \psi) = \bar{u}_{s,-1} \mathbf{P}_R \varphi + \bar{u}_{s,-1} \mathbf{P}_R \psi = \\ &= \mathbf{O}_R \delta_{s,-1} \varphi + \mathbf{O}_R \delta_{s,-1} \psi = \bar{u}_{s,-1} \mathbf{P}_R \varphi + u_{s,-1} \mathbf{P}_R \psi. \end{aligned}$$

$\mathbf{P}_R \varphi$  és  $\mathbf{P}_R \psi$  lineáris függetlensége miatt tehát

$$\bar{u}_{s,-1} = \bar{u}_{s,-1} = u_{s,-1}.$$

Ugyanígy

$$\bar{u}_{s,1} = u_{s,1}.$$

Az  $u_{st}$ -k tehát az összes hullámfüggvényre egyfomák és az  $\mathbf{u} = \mathbf{u}(R)$  mátrix csak az  $R$  forgatástól függhet. Ha  $\Phi(x, y, z, s)$  tetszőleges hullámfüggvény,

$$\Phi(x, y, z, s) = \delta_{s,-1} \Phi(x, y, z, -1) + \delta_{s,1} \Phi(x, y, z, +1), \quad (20.10)$$

akkor  $\mathbf{O}_R$  lineáris voltából és (20.9)-ből következik, hogy

$$\begin{aligned} \mathbf{O}_R \Phi(x, y, z, s) &= \mathbf{O}_R \delta_{s,-1} \Phi(x, y, z, -1) + \mathbf{O}_R \delta_{s,1} \Phi(x, y, z, +1) = \\ &= u_{s,-1} \mathbf{P}_R \Phi(x, y, z, -1) + u_{s,1} \mathbf{P}_R \Phi(x, y, z, +1) \end{aligned} \quad (20.11)$$

$$\mathbf{O}_R \Phi(x, y, z, s) = \sum_{t=\pm 1} u_{ts} \mathbf{P}_R \Phi(x, y, z, t).$$

Az  $\mathbf{O}_R$  operátor tehát két tényező szorzatára bontható fel:

$$\mathbf{O}_R = \mathbf{Q}_R \mathbf{P}_R. \quad (20.12)$$

$\mathbf{P}_R$  a (20.7)-ben definiált ismerős operátor, amely a hullámfüggvénynek csupán a helykoordinátáira hat;  $\mathbf{Q}_R$  definíciója pedig a következő:

$$\mathbf{Q}_R \Phi(x, y, z, s) = \sum_{t=\pm 1} u(R)_{st} \Phi(x, y, z, t), \quad (20.12a)$$

tehát csupán az  $s$  spinkoordinátákat érinti. Az  $s$  változó tartománya csupán két pont:  $+1$  és  $-1$ ; (20.12a) tehát azt mutatja, hogy  $\mathbf{Q}_R$  kétdimenziós mátrixszal egyenértékű:

$$\mathbf{u}(R) = \begin{pmatrix} u(R)_{-1,-1} & u(R)_{-1,1} \\ u(R)_{1,-1} & u(R)_{1,1} \end{pmatrix}. \quad (20.13)$$

A  $\mathbf{P}$  és  $\mathbf{Q}$  operátor egymással felcserélhető, ezért két tetszőleges  $R$  és  $S$  forgatásra

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_S \mathbf{Q}_R &= \mathbf{Q}_R \mathbf{P}_S, \\ \mathbf{P}_R \mathbf{Q}_R &= \mathbf{Q}_R \mathbf{P}_R. \end{aligned} \quad (20.14)$$

Az, hogy  $\mathbf{Q}_R$  két tényezőnek,  $\mathbf{P}_R$ -nek és  $\mathbf{Q}_R$ -nek a szorzatára bontható fel, azért lehetséges, mert feltettük, hogy léteznek „spinmentes” kísérletek, amelyek csupán  $x$ -től,  $y$ -től és  $z$ -től függő hullámfüggvénnyel írhatók le. A *Dirac*-elméletben e feltevés eszik, ezért ott  $\mathbf{O}_R$  nem is bontható fel két (20.14)-et kielégítő tényezőre, ha  $R$  valamilyen mozgó koordináta-rendszerre való áttérést jelöl.

## KAPCSOLAT AZ ÁBRÁZOLÁSELMÉLETTEL

7.  $\mathbf{O}_R$  és  $\mathbf{P}_R$  (valamint  $\mathbf{P}_R^{-1}$ ) unitér voltából következik, hogy  $\mathbf{Q}_R = \mathbf{O}_R \mathbf{P}_R^{-1}$  is szükségképpen unitér. Ezért minden  $\Phi$  és  $\Psi$  függvényre

$$(\mathbf{Q}_R \Phi, \mathbf{Q}_R \Psi) = (\Phi, \Psi). \quad (20.15)$$

Ebből következik, hogy  $\mathbf{u}(R)$  szintén unitér. Legyen  $\Phi = \delta_{s\sigma} \psi$  és  $\Psi = \delta_{s'\sigma'} \psi$ ; ekkor (20.3) miatt (normált  $\psi$  esetén)  $(\Phi, \Psi) = \delta_{\sigma\sigma'}$ . Így (20.15) és (20.12a) segítségével kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} \delta_{\sigma\sigma'} &= (\mathbf{Q}_R \delta_{s\sigma} \psi, \mathbf{Q}_R \delta_{s'\sigma'} \psi) = (u_{s\sigma} \psi, u_{s'\sigma'} \psi) = \\ &= \sum_{s=\pm 1} \int \int \int_{-\infty}^{\infty} u_{s\sigma}^* \psi^* u_{s'\sigma'} \psi \, dx \, dy \, dz = \sum_{s=\pm 1} u_{s\sigma}^* u_{s'\sigma'}. \end{aligned}$$

Ez azonban éppen annak a feltétele, hogy  $\mathbf{u}$  unitér legyen.

Továbbá abból kifolyólag, hogy  $\mathbf{O}_R$ -et a fizikai körülmények és (20.8a) csupán egy  $R$ -től függő egységnyi abszolútértékű állandó erejéig határozzák meg,  $\mathbf{O}_R$ -et  $c_R \mathbf{O}_R$ -rel helyettesíthetjük ( $|c_R| = 1$ ) anélkül, hogy az elmélet fizikai tartalmát vagy (20.8a)-t megváltoztatnánk. E  $c_R$  tényezőt  $\mathbf{Q}_R$ -hez, vagyis  $\mathbf{u}(R)$ -hez csatoljuk hozzá és úgy választjuk meg, hogy  $\mathbf{u}(R)$  determinánsa  $+1$  legyen.

Végül, hogy az  $\mathbf{u}(R)$  mátrixot kimerítően meghatározzuk, vegyük figyelembe, hogy  $\mathbf{O}_R \Phi$  az  $R$ -rel elforgatott  $\Phi$  állapot hullámfüggvénye, és hogy  $\mathbf{O}_S \mathbf{O}_R \Phi$  az először  $R$ -rel, majd utána  $S$ -sel, vagyis összességében az  $SR$ -rel elforgatott állapot hullámfüggvénye.  $\mathbf{O}_S \mathbf{O}_R$  tehát fizikai szempontból teljesen egyenértékű az  $\mathbf{O}_{SR}$  operátorral. Mivel (20.8a)-t is kielégíti (két lineáris és unitér operátor szorzata szintén lineáris és unitér), azért  $\mathbf{O}_{SR}$ -től csupán állandó tényezőben különbözhet:

$$\mathbf{O}_{SR} = c_{S,R} \mathbf{O}_S \mathbf{O}_R. \quad (20.16)$$



Mivel azonban  $\mathbf{P}_{SR} = \mathbf{P}_S \mathbf{P}_R$ , (20.14) és (20.12) következtében

$$\mathbf{Q}_{SR} \mathbf{P}_{SR} = c_{SR} \mathbf{Q}_S \mathbf{P}_S \mathbf{Q}_R \mathbf{P}_R; \quad \mathbf{Q}_{SR} = c_{S,R} \mathbf{Q}_S \mathbf{Q}_R,$$

vagyis (20.12a) segítségével

$$\sum_{t=\pm 1} u(SR)_{st} \Phi(x, y, z, t) = c_{S,R} \sum_{t=\pm 1} \sum_{l=\pm 1} u(S)_{st} u(R)_{tl} \Phi(x, y, z, t), \quad (20.17)$$

$$\mathbf{u}(SR) = c_{S,R} \mathbf{1} \cdot \mathbf{u}(S) \cdot \mathbf{u}(R).$$

Viszont valamennyi  $\mathbf{u}$  determinánsát 1-re normáltuk, így (20.17)-ből következik, hogy  $(c_{S,R} \cdot \mathbf{1})$  determinánsa  $c_{S,R}^2 = 1$ , tehát  $c_{S,R} = \pm 1$ . Ily módon előjeltől eltekintve az  $\mathbf{u}(R)$  mátrixok a háromdimenziós forgáscsoport ábrázolását alkotják:

$$\mathbf{u}(SR) = \pm \mathbf{u}(S) \mathbf{u}(R). \quad (20.17a)$$

Ez azt sugallja, hogy  $\mathbf{u}(R)$ -k, vagy a 15. fejezetben megtárgyalt mátrixokkal azonosak:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(\{\alpha, \beta, \gamma\}) &= \mathbf{D}^{(1)}(\{\alpha, \beta, \gamma\}) = \\ &= \begin{pmatrix} e^{-\frac{1}{2}i\alpha} \cos \frac{1}{2}\beta e^{-\frac{1}{2}i\gamma} & -e^{-\frac{1}{2}i\alpha} \sin \frac{1}{2}\beta e^{\frac{1}{2}i\gamma} \\ e^{\frac{1}{2}i\alpha} \sin \frac{1}{2}\beta e^{-\frac{1}{2}i\gamma} & -e^{\frac{1}{2}i\alpha} \cos \frac{1}{2}\beta e^{\frac{1}{2}i\gamma} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (20.18)$$

vagy legalábbis hasonlósági transzformációval adódnak belőlük. Ez valóban így is van. A következő fejezetben megmutatjuk, hogy a kétdimenziós mátrixok minden (20.17a)-nak elegendő rendszere vagy egységmátrixokból áll, vagy pedig  $\mathbf{D}^{(1/2)}$ -ből hasonlósági transzformációval kapható. Az első lehetőség nem valósulhat meg, mert ez például azt jelentené, hogy olyan állapot, amelyben a spin biztosan a  $Z$  irányban áll tetszőleges forgatás után, megőrizné ezt a tulajdonságát is.

Az  $\mathbf{u}$  mátrix csak olyan forgatásokra lehet diagonális, amelyekre  $\beta = 0$  (amelyek a  $Z$  tengelyt nem változtatják meg), ezekre viszont szükségképpen az. Ha ugyanis a spin az első koordináta-rendszerben a  $-Z$  irányba mutat, vagyis  $\Phi(x, y, z, 1) = 0$ , akkor ennek a másodikban is igaznak kell maradnia. Ebből azonban (20.11) alapján következik, hogy  $u_{1,-1} = 0$  és  $u_{-1,1} = 0$ , tehát  $\mathbf{u}(\{\alpha, 0, 0\})$  diagonális mátrix. Mivel ez  $\mathbf{D}^{(1/2)}(\{\alpha, 0, 0\})$ -val ekvivalens, azért vagy

$$\mathbf{u}(\{\alpha, 0, 0\}) = \begin{pmatrix} e^{-\frac{1}{2}i\alpha} & 0 \\ 0 & e^{\frac{1}{2}i\alpha} \end{pmatrix}, \quad (20.E.2)$$

vagy pedig

$$\mathbf{u}(\{\alpha, 0, 0\}) = \begin{pmatrix} e^{\frac{1}{2}i\alpha} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{1}{2}i\alpha} \end{pmatrix}.$$

A második esetben azonban a  $\psi\delta_{s,-1}$  állapotú elektron impulzuszmomentuma a  $+Z$  irányba, a  $\psi\delta_{s,1}$  állapotúé pedig a  $-Z$  irányba mutatna. Ez utóbbi lehetőségét kizárjuk, mivel ez a  $\Phi(x, y, z, -s)$  hullámfüggvénnyel jellemezné azt a fizikai állapotot, amelyet mi  $\Phi(x, y, z, s)$ -sel kívánunk leírni.

Tehát  $\mathbf{u}(\{\alpha, 0, 0\}) = \mathbf{D}^{(1/2)}(\{\alpha, 0, 0\})$ . Ama  $\mathbf{S}$  unitér mátrixnak, amely  $\mathbf{D}^{(1/2)}$ -et  $\mathbf{u}$ -ba transzformálja,  $\mathbf{D}(\{\alpha, 0, 0\})$ -val felcserélhetőnek kell lennie, ezért szükségképpen diagonális is. Legyen két diagonális eleme  $a$  és  $a'$  ( $|a| = |a'| = 1$ ). Ekkor megváltoztathatjuk jelölésünket: ahhoz az állapothoz, amelynek előbb  $\Phi(x, y, z, s)$  volt a hullámfüggvénye, most az  $\mathbf{S}\Phi(x, y, z, s)$  hullámfüggvényt rendeljük hozzá, itt

$$\mathbf{S}\Phi(x, y, z, -1) = a\Phi(x, y, z, -1),$$

$$\mathbf{S}\Phi(x, y, z, 1) = a'\Phi(x, y, z, 1).$$

Ez megengedhető, mivel ez idáig nem tulajdonítottunk jelentőséget a  $\Phi(x, y, z, -1)/\Phi(x, y, z, 1)$  arány fázisának. Az eredetiből ilyen módon adódó, azzal teljesen egyenértékű leírásban minden esetben

$$\mathbf{u}(\{\alpha, \beta, \gamma\}) = \mathbf{D}^{(1/2)}(\{\alpha, \beta, \gamma\}). \quad (20.18a)$$

Így arra az eredményre jutottunk, hogy *a spinnek minden olyan leírása, amely az 1, 2 és 3 szakaszokban részletezett gondolatmeneten alapszik, fizikailag teljesen egyenértékű azzal a leírással, amelyben az  $R$ -rel<sup>3</sup> elforgatott  $\Phi$  állapot hullámfüggvényét  $\mathbf{O}_R\Phi$  adja meg.* Itt az  $\mathbf{O}_R = \mathbf{P}_R\mathbf{Q}_R$  operátort

$$\begin{aligned} \mathbf{O}_R\Phi(x, y, z, s) &= \sum_{t=\pm 1} \mathbf{D}^{(1/2)}(R)_{\frac{1}{2}s, \frac{1}{2}t} \mathbf{P}_R\Phi(x, y, z, t) = \\ &= \sum_{t=\pm 1} \mathbf{D}^{(1/2)}(R)_{\frac{1}{2}s, \frac{1}{2}t} \Phi(x'', y'', z'', t) \end{aligned} \quad (20.19)$$

definiálja, ahol  $(x'' y'' z'')$   $(x, y, z)$ -ből az  $R^{-1}$  forgatással adódik.  $\mathbf{D}^{(1/2)}$ -ben az  $\frac{1}{2}s, \frac{1}{2}t$  index szerepel, mert  $\mathbf{D}^{(1/2)}$  oszlopait és sorait  $-\frac{1}{2}$  és  $+\frac{1}{2}$  jelöli az  $\mathbf{u}$ -ban fellépő  $-1$  és  $+1$  helyett.

Legyen például

$$\Phi(x, y, z, s) = (x + iy) \exp(-r/2r_0) \quad (s = \pm 1). \quad (20.E.3)$$

Az  $(x + iy)\exp(-r/2r_0)$  függvény normálástól eltekintve a  $H$  atom hullámfüggvénye az  $N=2, l=1$  és  $\mu=+1$  esetre (lásd (17.3)-at). Tekintsük a (20.E.3) állapotot olyan koordináta-rendszerben amelynek  $Y$  tengelye a régi  $Y$  tengely,  $Z$  tengelye pedig a régi  $X$  tengely. Az  $R$  forgatás ekkor  $\{0, \pi/2, 0\}$ ,

$$x' = -z, \quad y' = y, \quad z' = x,$$

a forgatás inverze pedig

$$x'' = z, \quad y'' = y, \quad z'' = -x.$$

<sup>3</sup>  $R$  itt valódi forgatás.

A  $\mathbf{D}^{(1/2)}(\{0, \pi/2, 0\})$  mátrix a következő:

$$\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

Az új koordináta-rendszerben a (20.E.3) állapot hullámfüggvénye (20.19) szerint

$$\mathbf{O}_R \Phi(x, y, z, s) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}(z+iy)e^{-r/2r_0} - \frac{1}{\sqrt{2}}(z+iy)e^{-r/2r_0}, & \text{ha } s = -1, \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(z+iy)e^{-r/2r_0} + \frac{1}{\sqrt{2}}(z+iy)e^{-r/2r_0}, & \text{ha } s = +1, \end{cases}$$

$$= \delta_{s1} \sqrt{2}(z+iy)e^{-r/2r_0}.$$

Az új koordináta-rendszerben tehát a spin biztosan a  $+Z$  irányban áll, következésképpen a régi-ben biztosan a  $+X$  irányba mutatott.

8. Most a (20.19) transzformációs képleteknek bizonyos fizikai következményeit vezetjük le. (20.19) segítségével választ adhatunk a következő igen fontos kérdésre: mi annak a valószínűsége, hogy a spin  $Z'$  komponensének mérési eredménye  $+\hbar/2$ , illetőleg  $-\hbar/2$ , ha ismeretes, hogy a  $Z$  komponens értéke  $+\hbar/2$ ? Más szóval két különböző, egymással  $\beta$  szöget bezáró  $Z'$  és  $Z$  irányú spinkomponensek között milyen a valószínűségi összefüggés? Ha a spin a  $Z$  irányba mutat, akkor a hullámfüggvény alakja  $\Phi(x, y, z, s) = \delta_{s1} \varphi(x, y, z)$ . Tekintsük ezt az állapotot egy  $\{0\beta 0\}$ -val elforgatott koordináta-rendszerből. Mivel  $\mathbf{P}_{\{0\beta 0\}} \Phi(x, y, z, s) = \delta_{s1} \mathbf{P}_{\{0\beta 0\}} \varphi(x, y, z)$ , most azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} \mathbf{O}_{\{0\beta 0\}} \Phi(x, y, z, -1) &= \cos \frac{1}{2} \beta \mathbf{P}_{\{0\beta 0\}} \Phi(x, y, z, -1) - \\ &- \sin \frac{1}{2} \beta \mathbf{P}_{\{0\beta 0\}} \Phi(x, y, z, 1) = \sin \frac{1}{2} \beta \mathbf{P}_{\{0\beta 0\}} \varphi(x, y, z) \\ \mathbf{O}_{\{0\beta 0\}} \Phi(x, y, z, 1) &= \sin \frac{1}{2} \beta \mathbf{P}_{\{0\beta 0\}} \Phi(x, y, z, -1) + \\ &+ \cos \frac{1}{2} \beta \mathbf{P}_{\{0\beta 0\}} \Phi(x, y, z, 1) = \cos \frac{1}{2} \beta \mathbf{P}_{\{0\beta 0\}} \varphi(x, y, z), \end{aligned} \tag{20.20}$$

hiszen  $\Phi(x, y, z, -1) = 0$ . ( $\mathbf{D}^{(1/2)}(\{0\beta 0\})_{st}$ -t (15.16)-ból vettük.)

A második megfigyelő viszont közvetlenül az  $\mathbf{O}_{\{0\beta 0\}} \Phi$  hullámfüggvényből kiszámíthatja, hogy a spin milyen valószínűséggel párhuzamos vagy ellentett a  $Z$  tengellyel  $\beta$  szöget bezáró  $Z'$  tengellyel. A  $+Z$  irányra a (20.20) egyenlet  $|\cos \frac{1}{2} \beta|^2$ , a  $-Z'$ -re pedig  $|\sin \frac{1}{2} \beta|^2$  valószínűséget szolgáltat. Ha a spin valamely irányának valószínűsége 1, akkor ezzel  $\beta$  szöget bezáró irányra a valószínűség  $|\cos \frac{1}{2} \beta|^2$ .  $\beta = 0$ -ra ez 1, ahogy annak lennie is kell, ha a két irány egybeesik.  $\beta = \frac{1}{2}\pi$ -re, amikor a két irány egymásra merőleges, akkor  $\frac{1}{2}$ . Ha pedig  $\beta = \pi$ , tehát a két irány egymással ellentett, akkor a valószínűség zérus.

Tegyük fel most azt a kérdést, hogy milyen feltételek mellett létezik olyan irány, amellyel a spin biztosan nem párhuzamos. Legyen ez mondjuk a  $Z'$  irány, tehát olyan koordináta-rendszerben, amelynek  $Z$  tengelye éppen a  $Z'$  irányba mutat, az  $\mathbf{O}_{\{\alpha\beta\gamma\}}\Phi$  hullámfüggvény alakja a következő:

$$\mathbf{O}_{\{\alpha\beta\gamma\}}\Phi(x, y, z, s) = \delta_{s, -1} \varphi(x, y, z).$$

Legyen  $R = \{\alpha\beta\gamma\}$  a rövidség kedvéért. Ekkor maga a  $\Phi$  hullámfüggvény

$$\begin{aligned} \Phi(x, y, z, s) &= \mathbf{O}_{R-L}\mathbf{O}_R\Phi = \mathbf{O}_{R-1}\delta_{s, -1} \varphi(x, y, z) = \\ &= D^{(1/2)}(R)_{\frac{1}{2}s, -\frac{1}{2}} \mathbf{P}_{R-1} \varphi(x, y, z). \end{aligned}$$

Ilyen irány tehát csak akkor létezik, ha  $\Phi(x, y, z, -1)$  és  $\Phi(x, y, z, 1)$  egymástól egy  $x, y, z$ -től független állandó tényezőben különbözik:

$$\Phi(x, y, z, -1)/\Phi(x, y, z, 1) = D^{(1/2)}(R)_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}/D^{(1/2)}(R)_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} = e^{-i\alpha} \operatorname{ctg} \frac{1}{2}\beta. \quad (20.E.4)$$

E tényező abszolút értéke és fázisa tetszőleges lehet, amint a (20.E.4)-ből látható. Az a tény, hogy  $\Phi(x, y, z, -1)$  és  $\Phi(x, y, z, 1)$  csak egy tényezőben különbözik egymástól, azt mutatja, hogy a spin  $Z$  komponensének és tetszőleges spinmentes mennyiségnek az együttes mérésekor az utóbbi valószínűsége a 3. szakasz értelmében a spin irányától statisztikusan független. Ebben az esetben mindig létezik olyan irány (ennek  $\alpha$  azimut- és  $\beta$  polárszögét (20.E.4) adja meg), amellyel a spin biztosan nem párhuzamos; különben ilyen irány nincs.

9. Érdemes felhívni a figyelmet arra, hogy a spines elektron viselkedésére vonatkozóan messzevezető konkrét megállapításokat szerezhetünk kizárólag az invarianciakövetelmények, a kvantummechanika általános elvei és bizonyos meg lehetőségen kvalitatív feltevések alapján. A most levezetett két eredmény, különösen az, amely a különböző spinirányok valószínűségeinek összefüggésére vonatkozik, a kísérleti igazolás számára legalábbis elvileg hozzáférhető.

Az  $\mathbf{O}_R$  operátort ama feltevés mellett határoztuk meg, hogy a különböző koordináta-rendszerek egymással egynértékűek. A tér izotrópiáját megbontó külső erő-tér jelenléte az  $\mathbf{O}_R$  operátorok módosításához vezethet. Természetesen, ha a külső erő-tér gyenge, akkor az elforgatott tengelyekre történő áttérést végrehajtó operátorokat közelítőleg továbbra is (20.19) adja meg. (20.19)-et azonban a következőkben erős erőterekben is érvényesnek tételezzük fel.

Végül felhívjuk egy olyan, eléggé meghatározó jelentőségű pontra a figyelmet, amely (20.19) levezetésekor esetleg a matematikai formalizmus mellett elsikkadhat. Ez pedig az a tény, hogy két koordináta-rendszer egyenértékűségéből a hasonlóan elforgatott koordináta-rendszerekbe történő áttranszformálást végrehajtó  $\mathbf{O}_R$  operátorok egyenértékűsége is következik.

Az  $\mathbf{O}_R$  operátorok lineárisak és unitérek, de nem ponttranszformációk, szemben a  $\mathbf{P}_R$ -ekkel. Ezért a (11.22) egyenlet nem érvényes rájuk. Vagyis

$$\mathbf{O}_R \Phi \Psi \neq \mathbf{O}_R \Phi \mathbf{O}_R \Psi.$$

Mi több, vegyük észre, hogy az  $R$  forgatásnak nem egy, hanem két,  $\mathbf{O}_R$  és  $-\mathbf{O}_R$  operátor felel meg, mivel (20.19)-ben megjelenő  $D^{(1/2)}(\{\alpha\beta\gamma\})$ -t a forgatás csupán előjel erejéig határozza meg. Az sem igaz, hogy  $\mathbf{O}_{SR} = \mathbf{O}_S \mathbf{O}_R$ , hanem csupán hogy

$$\mathbf{O}_{SR} = \pm \mathbf{O}_S \mathbf{O}_R. \quad (20.16a)$$

Nem lehetséges továbbá a  $+\mathbf{O}_R$  vagy  $-\mathbf{O}_R$  operátorok közül valamely képletben az egyiket úgy elhagyni, hogy a megmaradókra (20.16a) éppen a felső előjellel legyen érvényes.

10. A spin  $Z$  komponense fizikai mennyiség, akárcsak a hely vagy az impulzusmomentum. Ily módon a kvantummechanika statisztikus értelmezése szerint neki hermitikus operátornak kell megfelelnie. Ezt az operátort  $\mathbf{S}_z = \frac{\hbar}{2} \mathbf{s}_z$  fogja jelölni.  $\mathbf{s}_z$  sajátértéke  $-1$  és  $+1$  annak megfelelően, hogy a spin  $Z$  komponensének lehetséges értéke  $-\frac{\hbar}{2}$  és  $+\frac{\hbar}{2}$ . Az első sajátérték sajátfüggvényei a  $\Psi(x, y, z, s) = \delta_{s,-1} \psi(x, y, z)$  függvények; ezek csak akkor különböznek zérustól, ha  $s = -1$ . A második sajátérték sajátfüggvényei  $\Psi(x, y, z, s) = \delta_{s,1} \psi'(x, y, z)$  függvények, amelyek csak akkor különböznek zérustól, ha  $s = +1$ . Tehát

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_z \delta_{s,-1} \psi(x, y, z) &= -\delta_{s,-1} \psi(x, y, z), \\ \mathbf{s}_z \delta_{s,1} \psi(x, y, z) &= \delta_{s,1} \psi(x, y, z); \end{aligned}$$

vagyis, ha általában

$$\Phi(x, y, z, s) = \delta_{s,-1} \Phi(x, y, z, -1) + \delta_{s,1} \Phi(x, y, z, 1),$$

akkor

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_z \Phi(x, y, z, s) &= \mathbf{s}_z (\delta_{s,-1} \Phi(x, y, z, -1) + \delta_{s,1} \Phi(x, y, z, 1)) = \\ &= -\delta_{s,-1} \Phi(x, y, z, -1) + \delta_{s,1} \Phi(x, y, z, 1). \end{aligned} \quad (20.21)$$

$$\mathbf{s}_z \Phi(x, y, z, s) = \sum_{t=\pm 1} \delta_{st} \Phi(x, y, z, t) = s \Phi(x, y, z, s).$$

Tekintve, hogy  $\mathbf{s}_z$  csupán a spinkoordinátákra hat,  $\mathbf{Q}_R$ -hez hasonlóan mátrix alakkal bír:

$$\mathbf{s}_z = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (20.21a)$$

Meghatározzuk most a spin  $Z'$  komponensének megfelelő  $\mathbf{h}$  operátort. Az olyan megfigyelő számára, akinek tengelyrendszerében a  $Z$  tengely  $Z'$ -vel esik egybe, ez az operátor egyszerűen  $\mathbf{s}_z$ , hiszen az ilyen megfigyelőnek minden operátort definíció szerint ugyanúgy kell felírnia, mint az első megfigyelőnek, csupán saját tengelyrendszerére kell azokat vonatkoztatnia. Másrészt ez az operátor  $\mathbf{h}$ -ból adódik, ha azt  $\mathbf{O}_R$ -el transzformáljuk:

$$\mathbf{s}_z = \mathbf{O}_R \mathbf{h} \mathbf{O}_R^{-1}; \quad \mathbf{h} = \mathbf{O}_R^{-1} \mathbf{s}_z \mathbf{O}_R.$$

Ekkor (20.12)-ből következik (mivel  $\mathbf{P}_R$  felcserélhető  $\mathbf{s}_z$ -vel), hogy

$$\mathbf{h} = \mathbf{Q}_{R^{-1}} \mathbf{P}_{R^{-1}} \mathbf{s}_z \mathbf{P}_R \mathbf{Q}_R = \mathbf{Q}_{R^{-1}} \mathbf{s}_z \mathbf{Q}_R. \quad (20.22)$$

Ha (20.22)-ben szereplő operátorok mátrixalakját használjuk (ezek csupán az  $s$ -ekre hatnak),

$$\mathbf{h} = \mathbf{u}(R)^\dagger \mathbf{s}_z \mathbf{u}(R).$$

(15.11)-ből következik, hogy  $\mathbf{h}$  azonos az ott használt mátrixszal, ha  $\mathbf{h} = \mathbf{s}_z$  (vagyis  $x' = y' = 0$ ;  $z' = 1$ ). (15.11)-ben  $\mathbf{r} = (x, y, z)$  az a vektor, amelynek komponensei  $\mathbf{r}'$ -ből (amelyre  $x' = y' = 0$ ,  $z' = 1$ ) az  $R^{-1}$  transzformációval adódnak, s így  $\mathbf{r}$  a  $Z$  irányú egységvektor. Ezért a  $\mathbf{h}$ -t meghatározó (15.10a) szerint

$$\mathbf{h} = \alpha_1 \mathbf{s}_x + \alpha_2 \mathbf{s}_y + \alpha_3 \mathbf{s}_z, \quad (20.22a)$$

ahol  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$   $Z'$  iránykoszinuszai. (20.22a)-ból látható, hogy a spin  $Z'$  irányú komponense (15.10)-ben megadott

$$\mathbf{s}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{s}_y = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{s}_z = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$X, Y, Z$  komponensekből ugyanúgy képezhető, mint ahogy a koordináta  $Z'$  komponense az  $X, Y, Z$  koordináták operátoraiból (vagyis az  $\alpha_1 x + \alpha_2 y + \alpha_3 z$  alakban). Az ilyen operátorokat vektoroperátoroknak nevezzük.

A (15.11) egyenlet leszögezi, hogy a spin  $\mathbf{Rr}$  komponensének  $[\mathbf{Rr}, \mathbf{s}] = [\mathbf{r}, \mathbf{s}]$  operátora a spin  $\mathbf{r}$  komponensének  $[\mathbf{r}, \mathbf{s}]$  operátorából az  $\mathbf{u}(R)^{-1}$  (vagyis az  $\mathbf{Q}_R^{-1}$ ) transzformációval kapható.

A spin elméletében gyakran (20.22a)-ból szokás kiindulni, ilyenkor erre az egyenletre alapozzák az egész elméletet.

### Függelék a 20. fejezethez

## A FORGÁSOPERÁTOROK LINEARITÁSA ÉS UNITERITÁSA

Jelölje  $\bar{\Phi}$  azt a hullámfüggvényt, amellyel a második megfigyelő írja le azt az állapotot, amelyet az első megfigyelő  $\Phi$ -vel jellemez, s használjuk ugyanezt a jelölést valamennyi állapotra. Ekkor (20.8) szerint az összes  $\Psi$  és  $\Phi$  függvényekre

$$|(\Psi, \Phi)| = |(\bar{\Psi}, \bar{\Phi})|. \quad (20.8)$$

Valójában (20.8) csak akkor igaz, ha  $\Psi$  és  $\Phi$  fizikai állapotoknak felelnek meg s így normáltak. Különben nem vizsgálhatjuk meg a  $\Phi$  állapot „második leírását”, hiszen csak normált  $\Phi$ -k képviselnek állapotokat. Ennek ellenére kényelmesebb, ha nem normált  $\Phi$ -re is definiáljuk  $\bar{\Phi}$ -t. Pontosabban legyen  $\bar{\Phi}' = a\bar{\Phi}$ , ha  $\bar{\Phi}' = a\Phi$  és  $\Phi$  normált. Ekkor (20.8) minden függvényre érvényes lesz.

(20.8) továbbá nem változik meg, ha  $\Psi$ -t és  $\Phi$ -t egységnyi abszolút értékű állandókkal szorozzuk meg. Megmutatjuk most, hogy  $c_\Psi$  és  $c_\Phi$  állandókat úgy választhatjuk meg, hogy nemcsak

$$|(\mathbf{O}_R \Psi, \mathbf{O}_R \Phi)| = |(\Psi, \Phi)|, \quad (20.8)$$

hanem még az

$$(\mathbf{O}_R \Psi, \mathbf{O}_R \Phi) = (\Psi, \Phi), \quad (20.8a)$$

$$\mathbf{O}_R(a\Psi + b\Phi) = a\mathbf{O}_R\Psi + b\mathbf{O}_R\Phi$$

egyenletek is teljesülni fognak minden  $c_{\Psi}\bar{\Psi} = \mathbf{O}_R\Psi$  és  $c_{\Phi}\bar{\Phi} = \mathbf{O}_R\Phi$  esetén; itt  $a$  és  $b$  tetszőleges állandók. A nehézség a (20.8)-ról (20.8a)-ra történő átmenetben abban rejlik, hogy (20.8) csupán  $(\mathbf{O}_R\Psi, \mathbf{O}_R\Phi)$  és  $(\Psi, \Phi)$  abszolútértékének egyenlőségét jelenti, míg (20.8a) a fázisok egyenlőségét is megköveteli, mégpedig minden függvényre egyidejűleg.

Ha a  $\Psi_1, \Psi_2, \dots$  függvények teljes ortogonális rendszert alkotnak, akkor ugyanaz igaz a  $\bar{\Psi}_1, \bar{\Psi}_2, \dots$  függvényekre is.  $(\Psi_i, \Psi_k) = \delta_{ik}$  (20.8) segítségével a  $(\bar{\Psi}_i, \bar{\Psi}_k) = \delta_{ik}$  egyenletre vezet. Ha nincs olyan függvény, amely valamennyi  $\Psi_i$ -re ortogonális, akkor olyan sincs, amely valamennyi  $\bar{\Psi}_i$ -re merőleges lenne.

Tekintsük most azon  $\bar{F}_\kappa$  függvényeket, amelyek az  $F_\kappa = \Psi_1 + \Psi_\kappa$  ( $\kappa = 1, 2, 3, \dots$ ) függvényeknek felelnek meg. Fejtsük ki  $\bar{F}_\kappa$ -t a teljes ortogonális  $\bar{\Psi}_1, \bar{\Psi}_2, \dots$  rendszer szerint. Ekkor valamennyi  $(\bar{\Psi}_\lambda, \bar{F}_\kappa)$  kifejtési együttható zérus, kivéve ha  $\lambda = 1$  vagy  $\lambda = \kappa$ . Ez utóbbiaknak viszont az abszolútértéke 1, hiszen  $(\Psi_\lambda, F_\kappa)$  is csak akkor nem tűnik el, ha  $\lambda = 1$  vagy  $\lambda = \kappa$ , s ekkor ennek értéke 1. Ezért

$$\bar{F}_\kappa = y_\kappa(\bar{\Psi}_1 + x_\kappa\bar{\Psi}_\kappa); \quad |y_\kappa| = |x_\kappa| = 1 \quad (\kappa = 2, 3, \dots) \quad (20.23)$$

Válasszuk most már a  $c_{\Psi_1}$  állandót meg a következőképpen:  $c_{\Psi_1} = 1$ . Legyen továbbá  $c_{\Psi_\kappa} = x_\kappa$  és  $c_{F_\kappa} = \frac{1}{y_\kappa}$ . Ekkor

$$\begin{aligned} \mathbf{O}_R\Psi_1 &= \bar{\Psi}_1; & \mathbf{O}_R\Psi_\kappa &= c_{\Psi_\kappa}\bar{\Psi}_\kappa = x_\kappa\bar{\Psi}_\kappa, \\ \mathbf{O}_R(\Psi_1 + \Psi_\kappa) &= \mathbf{O}_R F_\kappa = c_{F_\kappa}\bar{F}_\kappa = \bar{F}_\kappa/y_\kappa = \mathbf{O}_R\Psi_1 + \mathbf{O}_R\Psi_\kappa. \end{aligned} \quad (20.24)$$

Legyen  $\Phi$  tetszőleges függvény, amelyet sorba fejtünk a  $\Psi_\kappa$ -k szerint:

$$\Phi = a_1\Psi_1 + a_2\Psi_2 + a_3\Psi_3 + \dots \quad (20.25)$$

Fejtsük  $\bar{\Phi}$ -t sorba a teljes ortogonális  $\mathbf{O}_R\Psi_1, \mathbf{O}_R\Psi_2$  stb. függvények szerint:

Így

$$\bar{\Phi} = \bar{a}_1\mathbf{O}_R\Psi_1 + \bar{a}_2\mathbf{O}_R\Psi_2 + \bar{a}_3\mathbf{O}_R\Psi_3 + \dots$$

$$|\bar{a}_\kappa| = |(\mathbf{O}_R\Psi_\kappa, \bar{\Phi})| = |(x_\kappa\bar{\Psi}_\kappa, \bar{\Phi})| = |(\Psi_\kappa, \Phi)| = |a_\kappa|, \quad (20.26)$$

tehát  $|\bar{a}_1| = |a_1|$ . Ezért a  $c_\Phi = a_1/\bar{a}_1$  választással élve

$$\mathbf{O}_R\Phi = c_\Phi\bar{\Phi} = a_1\mathbf{O}_R\Psi_1 + a'_2\mathbf{O}_R\Psi_2 + a'_3\mathbf{O}_R\Psi_3. \quad (20.27)$$

Igaz továbbá, hogy  $|a'_\kappa| = |a_\kappa|$ . Valóban kitűnik majd, hogy  $a'_\kappa = a_\kappa$ . Ezt bebizonyítandó alkalmazzuk (20.8)-at az  $F_\kappa = \Psi_1 + \Psi_\kappa$  és a  $\Phi$  függvényekre. Először is

$$|(F_\kappa, \Phi)| = |(\Psi_1 + \Psi_\kappa, \Phi)| = |a_1 + a_\kappa|.$$

Ugyanígy, mivel  $\bar{F}_\kappa$  és  $\bar{\Phi}$   $\mathbf{O}_R F_\kappa$ -tól és  $\mathbf{O}_R \bar{\Phi}$ -től egységnyi abszolútértékű állandóban különbözik,

$$\begin{aligned} |(\bar{F}_\kappa, \bar{\Phi})| &= |(\mathbf{O}_R F_\kappa, \mathbf{O}_R \bar{\Phi})| = \\ &= |(\mathbf{O}_R \Psi_1 + \mathbf{O}_R \Psi_\kappa, a_1 \mathbf{O}_R \Psi_1 + a'_2 \mathbf{O}_R \Psi_2 + \dots)| = \\ &= |a_1 + a'_\kappa|. \end{aligned}$$

Innen

$$|a_1 + a'_\kappa|^2 = |a_1 + a'_\kappa|^2,$$

vagy másként

$$|a_1|^2 + a_1^* a'_\kappa + a_1 a'_\kappa^* + |a'_\kappa|^2 = |a_1|^2 + a_1^* a_\kappa + a_1 a_\kappa^* + |a_\kappa|^2.$$

$a'_\kappa^*$  ebből az egyenletből kiküszöbölhető  $a'_\kappa a_\kappa^* = a_\kappa a_\kappa^*$  segítségével, s így  $a'_\kappa$ -re másodfokú egyenletet kapunk:

$$a_1^* a'^2_\kappa - (a_1^* a_\kappa + a_1 a_\kappa^*) a'_\kappa + a_1 |a_\kappa|^2 = 0. \quad (20.28)$$

(20.28)-ből következik, hogy vagy  $a'_\kappa = a_\kappa$ , vagy pedig

$$a'_\kappa = a_\kappa^* a_1 / a_1^*. \quad (20.29)$$

Az első esetben tetszőleges

$$\Phi = \sum_\kappa a_\kappa \Psi_\kappa \quad \text{és} \quad \Psi = \sum_\kappa b_\kappa \Psi_\kappa$$

esetén

$$\mathbf{O}_R \Phi = \sum_\kappa a_\kappa \mathbf{O}_R \Psi_\kappa; \quad \mathbf{O}_R \Psi = \sum_\kappa b_\kappa \mathbf{O}_R \Psi_\kappa, \quad (20.30)$$

tehát

$$\begin{aligned} \mathbf{O}_R(a\Phi + b\Psi) &= \mathbf{O}_R \sum_\kappa (aa_\kappa + bb_\kappa) \Psi_\kappa = \\ &= \sum_\kappa (aa_\kappa + bb_\kappa) \mathbf{O}_R \Psi_\kappa = a \mathbf{O}_R \Phi + b \mathbf{O}_R \Psi \end{aligned}$$

is érvényes, vagyis  $\mathbf{O}_R$  valóban lineáris. Továbbá

$$\begin{aligned} (\mathbf{O}_R \Psi, \mathbf{O}_R \Phi) &= \left( \sum_\kappa b_\kappa \mathbf{O}_R \Psi_\kappa, \sum_\lambda a_\lambda \mathbf{O}_R \Psi_\lambda \right) = \\ &= \sum_{\kappa\lambda} b_\kappa^* a_\lambda \delta_{\kappa\lambda} = \sum_\kappa b_\kappa^* a_\kappa, \end{aligned}$$

másrészt

$$\begin{aligned} (\Psi, \Phi) &= \left( \sum_\kappa b_\kappa \Psi_\kappa, \sum_\lambda a_\lambda \Psi_\lambda \right) = \\ &= \sum_{\kappa\lambda} b_\kappa^* a_\lambda \delta_{\kappa\lambda} = \sum_\kappa b_\kappa^* a_\kappa. \end{aligned}$$

Tehát az  $\mathbf{O}_R$  operátor egyúttal unitér is, s így (20.8a) bizonyítása befejeződött.



Meg kell mutatnunk, hogy (20.29)-ben a második lehetőség nem valósulhat meg. Ezért

$$\mathbf{O}_R \Phi = \mathbf{O}_R \sum_{\kappa} a_{\kappa} \Psi_{\kappa} = \frac{a_1}{a_1^*} \sum_{\kappa} a_{\kappa}^* \mathbf{O}_R \Psi_{\kappa} \quad (20.31)$$

helyébe az

$$\mathbf{O}_R \Phi = \mathbf{O}_R \sum_{\kappa} a_{\kappa} \Psi_{\kappa} = \sum_{\kappa} a_{\kappa}^* \mathbf{O}_R \Psi_{\kappa}$$

kifejezést írjuk, vagyis megszorozzuk  $\mathbf{O}_R \Phi$ -t  $a_1^*/a_1$ -gyel. Ez a leírás tartalmi részét biztosan nem változtathatja meg.

Tekintsük most a *Hamilton*-operátor két sajátfüggvényét, tehát két stacionárius állapotot; legyenek ezek a

$$\chi = \sum_{\kappa} u_{\kappa} \Psi_{\kappa} \quad \text{és a} \quad \chi' = \sum_{\kappa} u'_{\kappa} \Psi_{\kappa}$$

különböző,  $E$  illetőleg  $E'$  energiájú állapotok. Ekkor

$$\chi e^{-i(E/\hbar)t} + \chi' e^{-i(E'/\hbar)t} = \sum_{\kappa} (u_{\kappa} e^{-i(E/\hbar)t} + u'_{\kappa} e^{-i(E'/\hbar)t}) \Psi_{\kappa} \quad (20.32)$$

megoldása az időfüggő *Schrödinger*-egyenletnek. A második leírásban (20.31) miatt

$$\mathbf{O}_R \chi = \sum_{\kappa} u_{\kappa}^* \mathbf{O}_R \Psi_{\kappa}$$

felel meg a  $\kappa$  állapotnak és

$$\mathbf{O}_R \chi' = \sum_{\kappa} u'_{\kappa}{}^* \mathbf{O}_R \Psi_{\kappa}$$

a  $\chi'$  állapotnak. A második leírásban az energia változatlanul  $E$ , illetőleg  $E'$ . Ezért az

$$\begin{aligned} e^{-i(E/\hbar)t} \mathbf{O}_R \chi + e^{-i(E'/\hbar)t} \mathbf{O}_R \chi' &= \\ &= \sum_{\kappa} (u_{\kappa}^* e^{-i(E/\hbar)t} + u'_{\kappa}{}^* e^{-i(E'/\hbar)t}) \mathbf{O}_R \Psi_{\kappa} \end{aligned} \quad (20.33)$$

függvénynek a *Schrödinger*-egyenlet megoldásának kell lennie. E megoldás  $t=0$ -ban s így minden későbbi időben is ugyanazt az állapotot reprezentálja, mint (20.32). Ez azonban lehetetlen, mivel (20.31) szerint

$$\sum_{\kappa} (u_{\kappa} e^{-i(E/\hbar)t} + u'_{\kappa} e^{-i(E'/\hbar)t})^* \mathbf{O}_R \Psi_{\kappa}$$

felel meg (20.32)-nek, amely csak akkor azonos (20.33)-mal  $t \neq 0$  esetén, ha  $E = E'$  (20.29)-ben a második megoldás, tehát ellentmondásra vezet, így a  $c$  állandóknak

(20.24)-ben és (20.27)-ben alkalmazott megválasztása (20.29)-ben az első lehetőséghez vezet. Ebből  $\mathbf{O}_R$  lineáris és unitér jellege következik.

Ily módon azt a fontos eredményt kaptuk, hogy két fizikai szempontból egyenértékű leírás — a hullámfüggvények szabad állandóinak megfelelő megválasztása után — egymásba *kanonikus transzformáció* segítségével átvihető. Meg kell jegeznünk azonban, hogy a második lehetőségnek, a (20.31) „antiunitaritásnak” a kizárása érdekében a hullámfüggvények időfüggését is mérlegelnünk kellett. Pontosabban feltettük, hogy ha a  $t$  időtartam folyamán a  $\Phi$  állapot átmegy a  $\Phi'$  állapotba, akkor  $\Phi$  is  $\Phi'$ -be megy át ugyanezen időtartam alatt. Ez jogos és valóban fontos feltétel a jelen meg gondolás keretei között, azonban a 26. fejezetben megvizsgált „időtükrozés” operációjának esetén majd érvényét veszti.

## 21. A TELJES IMPULZUSMOMENTUM KVANTUMSZÁMA

1. Az előző fejezet (20.19) transzformációs képletében, mely szerint

$$\begin{aligned} \mathbf{O}_R \Phi(x, y, z, s) &= \sum_{t=\pm 1} D^{(1/2)}(R)_{\pm s, \pm t} \mathbf{P}_R \Phi(x, y, z, t) = \\ &= \sum_{t=\pm 1} D^{(1/2)}(R)_{\pm s, \pm t} \Phi(x'', y'', z'', t), \end{aligned} \quad (21.1)$$

$R$  valódi forgatás volt. Ha olyan koordináta-rendszerben kívánjuk felírni a hullámfüggvényt, amely az eredetiből nem valódi forgatás segítségével áll elő, akkor először inverziót hajtunk végre a koordináta-rendszeren:

$$x' = -x, y' = -y, z' = -z, \quad (21.2)$$

majd ezt valódi forgatás követi. A lényeges kérdés ezek után, hogy a  $\Phi$  állapot  $\mathbf{O}_I \Phi$  hullámfüggvénye hogyan fest olyan megfigyelő számára, akinek koordináta-tengelyei az eredeti rendszer tengelyeihez képest ellentétes irányításúak.

Tekintsük először az  $u_s \psi(x, y, z)$  állapotot. Spinmentes kísérletekben ez az első megfigyelő számára úgy viselkedik, mintha hullámfüggvénye  $\psi$  volna, tehát a tükrözött koordináta-rendszer megfigyelője számára a hullámfüggvény  $\mathbf{P}_I \psi$ -nek látszik;

$$\mathbf{P}_I \psi(x, y, z) = \psi(-x, -y, -z). \quad (21.3)$$

Ezért  $\mathbf{O}_I u_s \psi(x, y, z) = u'_s \cdot \mathbf{P}_I \psi(x, y, z)$ . A mágneses momentum iránya adott  $u_s \psi(x, y, z)$ -re. A koordináták tükrözésekor ez az irány az ellentettjébe megy át, mert a mágneses momentum axiális vektor. Az új koordináta-rendszerben azonban az ellentétes irány ugyanolyannak látszik, mint az eredeti a régi rendszerben. A második megfigyelő számára a spin iránya ugyanolyan, mint az első számára; az  $u'_s$  tényező  $\mathbf{P}_I \psi$  előtt  $\mathbf{O}_I u_s(x, y, z)$ -ben egyenlő  $u_s$ -sel.

Tudjuk, hogy a mágneses dipólus mindig körárammal helyettesíthető. Ha e köráram mondjuk az  $XY$  síkban fekszik és  $X$ -től  $Y$  felé folyik, akkor az  $X'Y'$  síkban is benne fekszik és  $X'$ -től  $Y'$  felé fog folyni.

Következésképpen minden  $u_s$ -re és  $\psi(x, y, z)$ -re érvényes, hogy

$$\mathbf{O}_I u_s \psi(x, y, z) = u_s \mathbf{P}_I \psi(x, y, z) = \mathbf{P}_I u_s \psi(x, y, z), \quad (21.4)$$

eltekintve egy állandótól, amely függhet  $u$ -tól és  $\psi$ -től. Azonban ugyanolyan módon, ahogy azt (20.8a)-t követően tettük, most is bebizonyítható, hogy eme állandónak minden  $u$ -ra és  $\psi$ -re egyformának kell lennie, ha megköveteljük  $\mathbf{O}_I$  lineáris voltát. Mivel  $\mathbf{O}_I$ -ban egy tényező egyébként is teljesen tetszőleges, ezt az állandót elhagyhatjuk. Mivel minden  $\Phi(x, y, z, s)$  függvény  $u_s \psi(x, y, z)$  alakú függvények lineáris kombinációjaként írható, ezért (21.4)-ből  $\mathbf{O}_I$  és  $\mathbf{P}_I$  lineáris volta miatt következik, hogy  $\mathbf{O}_I \equiv \mathbf{P}_I$ :

$$\mathbf{O}_I \Phi(x, y, z, s) = \mathbf{P}_I \Phi(x, y, z, s) = \Phi(-x, -y, -z, s). \quad (21.5)$$

Az  $\mathbf{O}_I$  operátort, amely a koordináta-rendszer (21.2) tükrözését fogantatosítja, és amely egyáltalán nem hat a spinkoordinátákra, (21.5) adja meg. Világos, hogy  $\mathbf{O}_I^2 = 1$ , vagyis  $\mathbf{O}_I \mathbf{O}_I \Phi = \Phi$ , így az egységoperátor és  $\mathbf{O}_I$  a tükrözéscsoporttal izomorf csoportot alkot.

(21.1) és (21.5) megadja a hullámfüggvény transzformációs képleteit a tengelyek tetszőleges megváltoztatására. (21.1) és (21.5) továbbá nemcsak elektronokra, hanem protonokra is igaz. A proton mágneses momentuma azonban sokkal kisebb, mint az elektroné (a proton tömege körülbelül 1840-szer nagyobb), ezért a megfigyelés számára nem oly könnyen hozzáférhető, mint az elektron spinjéből adódó mágneses momentum. A következőkben a „magspint” nem tárgyaljuk.

(21.1) és (21.5) az elektron *Dirac*-féle relativisztikus elméletében is lényeges változtatás nélkül érvényben marad.<sup>1</sup> DIRAC szerint a hullámfüggvény nem a két  $\Phi(x, y, z, -1)$  és  $\Phi(x, y, z, 1)$  helyfüggvényből áll, hanem négyből.  $s$  mellett még egy ötödik  $s'$  koordinátát is bevezethetünk, amely ugyancsak két értéket vehet fel. Ekkor (21.1) valódi forgatásokra változatlan marad;  $s$  egyáltalán nem vesz részt az ilyen transzformációkban, tükrözéskor azonban a két  $s'$  érték felcserélődik.

2. (21.1) és (21.5) olyan rendszerre vonatkozik, amely csupán egy elektront tartalmaz. Több elektron esetén a  $\Phi(x_1, y_1, z_1, s_1, \dots, x_n, y_n, z_n, s_n)$  hullámfüggvény a *Descartes*-koordinátákkal együtt valamennyi részecske spinkoordinátáit is tartalmazza. A  $\Phi$  és  $G$  függvények skaláris szorzata ilyenkor a következő:

$$\begin{aligned} (\Phi, G) = & \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \dots \sum_{s_n=\pm 1} \int \int \dots \int \Phi(x_1, \dots, s_n)^* \times \\ & \times G(x_1, \dots, s_n) dx_1 \dots dz_n. \end{aligned} \quad (21.6)$$

<sup>1</sup> J. A. GAUNT, Proc. Roy. Soc. A **124**, 163 (1929).

A spinnélküli elméletben a  $\mathbf{P}_R$  operátor az összes koordinátahármasra egyformán hatott. Hasonlóképpen az  $\mathbf{O}_R$  operátor, amely a *Pauli*-elméletben transzformál át új tengelyrendszerbe, ugyanúgy hat az  $x_k, y_k, z_k, s_k$  koordinátanégyesre, mint ahogy (21.1)-ben és (21.5)-ben  $x, y, z, s$ -re tette. Ezért

$$\begin{aligned} \mathbf{O}_R \Phi(x_1, y_1, z_1, s_1, \dots, x_n, y_n, z_n, s_n) &= \\ &= \sum_{t_1, \dots, t_n} \mathbf{D}^{(1/2)}(R)_{\frac{1}{2}s_1, \frac{1}{2}t_1} \dots \mathbf{D}^{(1/2)}(R)_{\frac{1}{2}s_n, \frac{1}{2}t_n} \times \\ &\times \mathbf{P}_R \Phi(x_1, y_1, z_1, t_1, \dots, x_n, y_n, z_n, t_n), \end{aligned} \quad (21.7)$$

és

$$\begin{aligned} \mathbf{O}_I \Phi(x_1, y_1, z_1, s_1, \dots, x_n, y_n, z_n, s_n) &= \\ &= \mathbf{P}_I \Phi(x_1, y_1, z_1, s_1, \dots, x_n, y_n, z_n, s_n) = \\ &= \Phi(-x_1, -y_1, -z_1, -s_1, \dots, -x_n, -y_n, -z_n, -s_n). \end{aligned} \quad (21.8)$$

$\mathbf{O}_R$  két operátornak,  $\mathbf{P}_R$ -nek és  $\mathbf{Q}_R$ -nek a szorzata, az első csak a *Descartes*-koordinátákra hat:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_R(x'_1, y'_1, z'_1, s_1, \dots, x'_n, y'_n, z'_n, s_n) &= \\ &= \Phi(x_1, y_1, z_1, s_1, \dots, x_n, y_n, z_n, s_n). \end{aligned} \quad (21.7a)$$

Itt  $x'_k, y'_k, z'_k$  az  $R$  forgatással adódik  $x_k, y_k, z_k$ -ből. A második operátor csak a spinkoordinátákat érinti:

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_R \Phi(x_1, y_1, z_1, s_1, \dots, x_n, y_n, z_n, s_n) &= \\ &= \sum_{t_1 = \pm 1} \dots \sum_{t_n = \pm 1} \mathbf{D}^{(1/2)}(R)_{\frac{1}{2}s_1, \frac{1}{2}t_1} \dots \mathbf{D}^{(1/2)}(R)_{\frac{1}{2}s_n, \frac{1}{2}t_n} \times \\ &\times \Phi(x_1, y_1, z_1, t_1, \dots, x_n, y_n, z_n, t_n). \end{aligned} \quad (21.7b)$$

Mivel a spinkoordináták  $2^n$  különböző értékrendszert vehetnek fel,  $\mathbf{Q}_R$  egy  $2^n$  dimenziós mátrixszal egyenértékű; ennek sorait és oszlopait  $n$  index számozza meg, és mindegyik index a  $\pm 1$  értéket veheti fel, a spinkoordináták lehetséges értékeinek megfelelően.  $\mathbf{Q}_R$  mátrixalakja a következő:

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_R &= \mathbf{D}^{(1/2)}(R) \times \mathbf{D}^{(1/2)}(R) \times \dots \times \mathbf{D}^{(1/2)}(R), \\ (\mathbf{Q}_R)_{s_1 s_2, \dots, s_n; t_1 t_2, \dots, t_n} &= \mathbf{D}^{(1/2)}(R)_{\frac{1}{2}s_1, \frac{1}{2}t_1} \dots \mathbf{D}^{(1/2)}(R)_{\frac{1}{2}s_n, \frac{1}{2}t_n}. \end{aligned} \quad (21.7c)$$

Valamennyi  $\mathbf{P}$  operátor felcserélhető a  $\mathbf{Q}_R$  operátorokkal.

$$\mathbf{P}_S \mathbf{Q}_R = \Phi_R \mathbf{Q}_S. \quad (21.9)$$

Nevezetesen

$$\mathbf{O}_R = \mathbf{P}_R \mathbf{Q}_R = \mathbf{Q}_R \mathbf{P}_R.$$

Az  $\mathbf{O}_I = \mathbf{P}_I$  operátor is felcserélhető valamennyi  $\mathbf{P}_R$ -rel, ezért (21.9) miatt valamennyi  $\mathbf{O}_R$ -rel is, ha  $R$  valódi forgatás.

$\mathbf{Q}_R$ -et a forgatás csak előjel erejéig határozza meg, mivel  $\mathbf{D}^{(1/2)}(R)$ -ben az előjel határozatlan. Páros számú elektron esetén ettől az önkénytől megszabadulhatunk ama megegyezés segítségével, hogy (21.7)-ben és (21.7c)-ben valamennyi  $\mathbf{D}^{(1/2)}(R)$ -et ugyanolyan előjellel kell vennünk. Páratlan számú elektronnál azonban  $\mathbf{Q}_R$ -et nem tehetjük egyenértékűvé.

3. Ha először  $R$ -rel, majd ezt követően  $S$ -sel elforgatott koordináta-rendszerbe transzformálunk át, akkor a hullámfüggvény először  $\mathbf{O}_R\Phi$ -be, majd  $\mathbf{O}_S\mathbf{O}_R\Phi$ -be megy át. Ugyanezen koordináta-rendszer azonban egyetlen  $SR$  forgatással is előállítható. Ebben az esetben a hullámfüggvény  $\mathbf{O}_{SR}\Phi$  lesz, ami  $\mathbf{O}_S\mathbf{O}_R\Phi$ -től csak állandóan különbözik. Továbbá, mivel mind  $\mathbf{O}_S\mathbf{O}_R$ , mind pedig  $\mathbf{O}_{SR}$  lineáris és unitér, ez az állandó az összes hullámfüggvényre egyforma és csak az  $S$ ,  $R$  forgatásoktól függhet,

$$\mathbf{O}_{SR} = c_{S,R} \mathbf{O}_S \mathbf{O}_R. \quad (21.10)$$

Mivel új koordináta-rendszerbe történő transzformáció mindig végrehajtható lineáris unitér operátorral, azért (21.10) a *Pauli*-elmélet speciális feltevéseit nem tartalmazza, hanem az egyenletrendszerek térbeli forgatásokkal szemben mutatott invarianciájából szükségszerűen következik. Ezt az egyenletet a fejezet végkövetkeztetési során még tovább taglaljuk, és néhány olyan eredményt vezetünk majd le, amelynek minden kvantummechanikai elméletben érvényesnek kell lennie.

A (21.10) egyenlet természetesen számolással igazolható. Először is (21.9) miatt

$$\mathbf{O}_S \mathbf{O}_R = \mathbf{P}_S \mathbf{Q}_S \mathbf{P}_R \mathbf{Q}_R = \mathbf{P}_S \mathbf{P}_R \mathbf{Q}_S \mathbf{Q}_R = \mathbf{P}_{SR} \mathbf{Q}_{SR}.$$

*Páros számú elektronra* a (21.7c) mátrixok, amelyek a  $\Phi$  operátor mátrixalakjai, a forgáscsoport egyértékű ábrázolását alkotják, ezért  $\mathbf{Q}_S \mathbf{Q}_R = \mathbf{Q}_{SR}$ , tehát

$$\mathbf{O}_S \mathbf{O}_R = \mathbf{P}_{SR} \mathbf{Q}_S \mathbf{Q}_R = \mathbf{P}_{SR} \mathbf{Q}_{SR} = \mathbf{O}_{SR}. \quad (21.11a)$$

Ebben az esetben (21.10)-ben  $c_{S,R} = 1$ , és az  $\mathbf{O}_R$  operátorok a valódi forgáscsoporttal izomorf csoportot alkotnak. Ezért ebben az esetben definiálhatók olyan függvények, amelyek az  $\mathbf{O}_R$  operátorokra nézve valamely irreducibilis ábrázolás egy sorához tartoznak, vagy egyszerűen a forgáscsoport egy irreducibilis ábrázolásához tartoznak.

*Páratlan számú elektronra* a (21.7c) mátrixok a forgáscsoportnak csupán kétértékű ábrázolását alkotják, mivel  $\mathbf{Q}_S \mathbf{Q}_R = \pm \mathbf{Q}_{SR}$ ,

$$\mathbf{O}_S \mathbf{O}_R = \mathbf{P}_{SR} \mathbf{Q}_S \mathbf{Q}_R = \pm \mathbf{P}_{SR} \mathbf{Q}_{SR} = \mathbf{O}_{SR}. \quad (21.11b)$$

(21.10)-ben tehát  $c_{S,R} = \pm 1$ , és az  $\mathbf{O}_R$  operátorok nem izomorfak többé a forgáscsoporttal.  $\mathbf{Q}_R$  kétértékűsége miatt mindegyik forgatáshoz két  $+\mathbf{O}_R$  és  $-\mathbf{O}_R$  operátor tartozik.

Mivel az unitér csoport<sup>2</sup> és a forgáscsoport homomorfizmusában két unitér mátrix,  $\mathbf{u} = \mathbf{D}^{(1/2)}(R)$  és  $\mathbf{u} = -\mathbf{D}^{(1/2)}(R)$  felel meg minden forgatásnak, megkísérelhetjük, hogy egy-egyértelmű megfeleltetést találjunk az  $\mathbf{O}$ -k és az  $\mathbf{u}$ -k között. Ez véghezvihető, ha  $\mathbf{u}$ -nak az  $\mathbf{O}_u = \mathbf{Q}_u \cdot \mathbf{P}_{R_u}$  elemet feleltetjük meg, és feltesszük, hogy  $\mathbf{Q}_u$  mátrixának alakja (21.7c)-vel összhangban  $\mathbf{u} \times \mathbf{u} \times \dots \times \mathbf{u}$ .  $R_u$  itt az  $\mathbf{u}$ -nak a homomorfizmusban megfelelő forgatás. Ilyen módon minden  $\mathbf{u}$ -nak egyetlen  $\mathbf{Q}_u$  felel meg. Mivel  $R_u$  is egyértelmű megfelelője  $\mathbf{u}$ -nak, ezért ugyanez igaz  $\mathbf{P}_R$ -re is. Továbbá

$$(\mathbf{u} \times \mathbf{u} \times \dots \times \mathbf{u})(\mathbf{v} \times \mathbf{v} \times \dots \times \mathbf{v}) = \mathbf{uv} \times \mathbf{uv} \times \dots \times \mathbf{uv},$$

és  $R_u R_v = R_{uv}$  következménye  $\mathbf{P}_{R_u} \mathbf{P}_{R_v} = \mathbf{P}_{R_{uv}}$ , tehát

$$\mathbf{O}_u \mathbf{O}_v = \mathbf{O}_{uv}.$$

Ezért páratlan számú elektronra ama  $f_{-j}, f_{-j+1}, \dots, f_{j-1}, f_j$  függvények, amelyekre

$$\mathbf{O}_u f_\mu^{(j)} = \sum_{\mu'=-j}^j \mathbf{U}^{(j)}(\mathbf{u})_{\mu'\mu} f_{\mu'}^{(j)} \quad (21.12)$$

érvényes, az unitércsoport  $\mathbf{U}^{(j)}$  ábrázolásának a különböző soraihoz tartoznak. Ezért kielégítik a 12. fejezetben levezetett és bármely csoport irreducibilis ábrázolásához tartozó függvényekre érvényes összefüggéseket.

A következő oldalakon (21.12) helyett mindig az

$$\mathbf{O}_R f_\mu^{(j)} = \pm \sum_{\mu'=-j}^j \mathbf{D}^{(j)}(R)_{\mu'\mu} f_{\mu'}^{(j)} \quad (21.12a)$$

egyenlet szerepel majd. Látható, hogy a (21.12a) a  $\pm$  előjeltől eltekintve tartalmazza (21.12)-t.

$$\mathbf{O}_u f_\mu^{(j)} = \pm \sum_{\mu'} \mathbf{U}^{(j)}(\mathbf{u})_{\mu'\mu} f_{\mu'}^{(j)}. \quad (21.12b)$$

Valójában mindig (21.12)-t vezetjük le. Továbbá (21.12a) valóban magát (21.12)-t tartalmazza és nem (21.12b)-t. (21.12b)-ben az alsó előjel nem fordulhat elő. Ezt úgy láthatjuk be, hogy feltesszük a mínusz előjel érvényességét. Ekkor azonban  $\mathbf{u}$ -t folytonosan átvihetjük az egységmátrixba. Eközben (21.12b) mindkét oldala folytonosan változik, tehát az alsó előjel végig változatlan marad. De  $\mathbf{u} = \mathbf{1}$  esetén (21.12b) ezt adná:

$$\mathbf{O}_1 f_\mu^{(j)} = - \sum_{\mu'} \delta_{\mu'\mu} f_{\mu'}^{(j)} = -f_\mu^{(j)},$$

<sup>2</sup> Pontosabban a kétdimenziós egységnyi determinánsú unitér mátrixok csoportja.

ami biztosan nem helyes, hiszen  $\mathbf{O}_1$  az identitás operátora és így minden függvényt változatlanul hagy. (21.12b)-ben tehát csak a felső előjel lehet érvényes. Ily módon (21.12a) valóban azonos (21.12)-vel; azért részessítjük (21.12a)-t előnyben, mert az  $\mathbf{O}$ -nak, mint térbeli forgatásnak a szerepét hangsúlyozza.

Legyen most  $\mathbf{u} = -*$  (21.12)-ben. Ekkor  $\mathbf{O}_{-1}$  az egységoperátor mínusz egyszerűsége, mivel  $\mathbf{P} = \mathbf{P}_E$  a pozitív és  $-1 \times -1 \times \dots \times -1$  a negatív egységoperátor (21.7c)-ben. (Páratlan számú elektronról van szó.) (21.12)-ből következik, hogy  $\mathbf{U}^{(j)}(-1) = -1$ ; ebből viszont a 15. fejezet értelmében, hogy  $j$ -nek félegésznek kell lennie. *Páratlan számú elektron esetében a hullámfüggvény az uniter csoportnak, vagy az  $\mathbf{O}_u$ -k csoportjának csak páratlan ábrázolásához, vagyis a forgáscsoport kétértékű ábrázolásához tartozhat.* Természetesen páros számú elektron esetében a forgáscsoportnak csak reguláris (az uniter csoportnak csak páros) ábrázolása fordulhat elő.

A kétértékű ábrázolásokkal kapcsolatos bonyodalom onnan ered, hogy (21.10)-ben  $c_{S,R}$  éppúgy lehet  $-1$  mint  $+1$ . Az  $\mathbf{O}$  operátorok, amelyek a leírás invarianciáját fejezik ki a térbeli forgatásokkal szemben, nem a forgáscsoporttal, hanem az uniter csoporttal izomorf csoportot alkotnak.

4. A spin figyelembevételkor az  $E$  energiára vonatkozó  $\mathbf{H}\Psi = E\Psi$  Schrödinger-egyenlet  $\mathbf{H}$  Hamilton-operátora többé nem olyan egyszerű operátor, mint amilyen a korábbi megfontolásaink alapjául szolgált, amely csak a Descartes-koordinátákra hat. Az elektron mágneses momentumából eredő erők miatt további tagok jelennek meg, ezek jelentőségét később tárgyaljuk. Noha e tagok pontos alakja némileg még kétséges, annak azonban igaznak kell lennie, hogy a térben addig nem létezhet kitüntetett irány, amíg külső mágneses vagy elektromos erőtér nem hat. Ha  $\Psi_\mu$  stacionárius állapot, akkor az  $\mathbf{O}_R\Psi_\mu$  vagy  $\mathbf{O}_u\Psi_\mu$  is stacionárius, és ugyanaz mindegyiknek az energiája. Ebből következik, hogy  $\mathbf{O}_R\Psi_\mu$  vagy  $\mathbf{O}_u\Psi_\mu$  kifejezhető a sajátérték összes sajátfüggvényének lineáris kombinációjaként:

$$\mathbf{O}_R\Psi_\mu = \sum_\nu D(R)_{\nu\mu} \Psi_\nu, \quad (21.13)$$

vagy

$$\mathbf{O}_u\Psi_\mu = \sum_\nu D(\mathbf{u})_{\nu\mu} \Psi_\nu.$$

$\mathbf{O}_S\mathbf{O}_R = \mathbf{O}_{SR}$  vagy páratlan számú elektronra  $\mathbf{O}_S\mathbf{O}_R = \pm \mathbf{O}_{SR}$  (vagy  $\mathbf{O}_u\mathbf{O}_v = \mathbf{O}_{uv}$ ) a szokásos módon szolgáltatja, hogy

$$\mathbf{D}(S)\mathbf{D}(R) = \mathbf{D}(SR), \quad (21.14a)$$

illetőleg páratlan számú elektronra

$$\mathbf{D}(S)\mathbf{D}(R) = \mathbf{D}(SR),$$



$$\mathbf{D}(\mathbf{u})\mathbf{D}(\mathbf{v})=\mathbf{D}(\mathbf{uv}).$$

Páros számú elektronra a  $\mathbf{D}(R)$  mátrixok a forgáscsoport egyértékű, páratlanra pedig a forgáscsoport kétértékű (vagy az uniter csoport egyértékű) ábrázolását alkotják.

Ákárcsak a 12. fejezetben, eme ábrázolások irreducibilitása most is feltételezhető.<sup>3</sup> Páros számú elektronra  $\mathbf{D}(R)$  egyike a  $\mathbf{D}^{(0)}$ ,  $\mathbf{D}^{(1)}$ ,  $\mathbf{D}^{(2)}$ , ... stb. ábrázolásoknak; páratlan számú elektronra pedig egyike a  $\mathbf{D}^{(1/2)}$ ,  $\mathbf{D}^{(3/2)}$ , ... az ábrázolásoknak, ( $\mathbf{D}(\mathbf{u})$  valamelyik az  $\mathbf{U}^{(1/2)}$ ,  $\mathbf{U}^{(3/2)}$ ,  $\mathbf{U}^{(5/2)}$  ... stb. közül);

$$\mathbf{O}_R\Psi_\mu^{(j)}=\sum_{\mu'}\mathbf{D}^{(j)}(R)_{\mu'\mu}\Psi_{\mu'}^{(j)}. \quad (21.13a)$$

Eme ábrázolásokban a felső ( $j$  vagy  $J$ ) indexet a teljes impulzusmomentum kvantumszámának nevezik; ez páros számú elektronra egész, páratlanra pedig félegész (ez a „multiplicitás váltakozása”). A  $\mu$  sorszámot, amelyhez a sajátfüggvény hozzátartozik, itt is mágneses kvantumszámnak nevezik;  $\mu$  is egész páros számú, félegész páratlan számú elektron esetén.

5. Legyen  $\mathbf{S}$  szimmetrikus operátor  $\mathbf{O}_R$ -rel szemben, vagyis skalár; tehát a tengelyek megváltozása nem érinti. Ekkor ismeretes, hogy az olyan

$$S_{Nj\mu;N'j'\mu'}=(\Psi_{\mu'}^{Nj},\mathbf{S}\Psi_{\mu'}^{N'j'})=\delta_{j'j}\delta_{\mu'\mu}S_{Nj;N'j} \quad (21.15)$$

mátrixelem eltűnik, amelyben szereplő két sajátfüggvény különböző  $\mathbf{D}^{(j)}$  ábrázoláshoz, vagy ugyanannak az ábrázolásnak két különböző sorához tartozik. Ha viszont  $j=j'$  és  $\mu=\mu'$ , akkor (21.15) minden  $\mu$ -re ugyanaz, vagyis nem függ a mágneses kvantumszámtól.

Hasonló képleteket természetesen a vektor és tenzoroperátorokra is kereshetünk. A skalároperátort ama követelmény határozza meg, hogy legyen független a tengelyrendszertől; az energia például ilyen, de a dipólmomentum nem. Az előző mennyiség minden megfigyelő számára ugyanannak az operátornak felel meg. Másrészt azt a fizikai mennyiséget, amelyhez a második megfigyelő az  $\mathbf{S}$  operátort rendelí hozzá, az első megfigyelő az  $\mathbf{O}_R^{-1}\mathbf{S}\mathbf{O}_R$  operátorral írja le, ezért igaznak kell lennie, hogy

$$\mathbf{O}_R^{-1}\mathbf{S}\mathbf{O}_R=\mathbf{S}; \quad \mathbf{S}\mathbf{O}_R=\mathbf{O}_R\mathbf{S}. \quad (21.16)$$

Tehát a szimmetrikus operátor minden transzformációval felcserélhető.

<sup>3</sup> A sajátértéket több véletlenül egybeeső sajátértékként felfogva.

Ezzel ellentétben, ha  $\mathbf{V}_x, \mathbf{V}_y, \mathbf{V}_z$  valamely *vektoroperátor*  $X' Y' Z'$  komponense, akkor ugyanennek  $XYZ$  komponensei a következők:<sup>4</sup>

$$\begin{aligned}\mathbf{O}_R^{-1} \mathbf{V}_x \mathbf{O}_R &= R_{xx} \mathbf{V}_x + R_{xy} \mathbf{V}_y + R_{xz} \mathbf{V}_z, \\ \mathbf{O}_R^{-1} \mathbf{V}_y \mathbf{O}_R &= R_{yx} \mathbf{V}_x + R_{yy} \mathbf{V}_y + R_{yz} \mathbf{V}_z, \\ \mathbf{O}_R^{-1} \mathbf{V}_z \mathbf{O}_R &= R_{zx} \mathbf{V}_x + R_{zy} \mathbf{V}_y + R_{zz} \mathbf{V}_z.\end{aligned}\quad (21.17)$$

$\mathbf{V}_x, \mathbf{V}_y, \mathbf{V}_z$  tehát nem  $\mathbf{D}^{(0)}$  szerint transzformálódik, mint  $\mathbf{S}$ ; vagyis új tengelyrendszerre áttérve nem maradnak változatlanok, hanem az  $\mathbf{R}$  forgatás mátrixával transzformálódnak.  $\mathbf{D}^{(1)}$  azonban a forgáscsoport ábrázolása ezért ekvivalens az  $\mathbf{R}$  mátrixokkal történő ábrázolással. A későbbi számításokban az  $X, Y, Z$  komponensek helyett gyümölcsöző lesz a

$$\begin{aligned}\mathbf{V}^{-1} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{V}_x + \frac{2}{\sqrt{2}} \mathbf{V}_y, \\ \mathbf{V}^{(0)} &= \mathbf{V}_z, \\ \mathbf{V}^{(1)} &= \frac{-1}{\sqrt{2}} \mathbf{V}_x + \frac{i}{\sqrt{2}} \mathbf{V}_y\end{aligned}\quad (21.18)$$

komponensek használata. Ezekre (15.34) miatt (21.17) helyett

$$\mathbf{O}_R^{-1} \mathbf{V}^{(\varrho)} \mathbf{O}_R = \sum_{\sigma=-\omega}^{\omega} \mathbf{D}^{(\omega)}(R)_{\varrho\sigma} \mathbf{V}^{(\sigma)} \quad (21.17a)$$

érvényes.

Általánosabban vizsgálhatjuk az  $\omega$  fokú irreducibilis tenzor operátort, amelyet az a feltétel szab meg, hogy  $2\omega+1$  számú  $\mathbf{T}^{(\varrho)}$  komponense a tengelyek elforgatásakor a következőképpen transzformálódik:

$$\mathbf{O}_R^{-1} \mathbf{T}^{(\varrho)} \mathbf{O}_R = \sum_{\sigma=-\omega}^{\omega} \mathbf{D}^{(\omega)}(R)_{\varrho\sigma} \mathbf{T}^{(\sigma)}. \quad (21.17b)$$

Ha  $R$ -et (21.17)-ben  $R^{-1}$ -gyel helyettesítjük, akkor  $\mathbf{O}_{R^{-1}} = \mathbf{O}_R^{-1}$  és  $\mathbf{D}^{(\omega)}(R^{-1})_{\varrho\sigma} = \mathbf{D}^{(\omega)}(R)_{\sigma\varrho}^*$  miatt kapjuk, hogy

$$\mathbf{O}_R \mathbf{T}^{(\varrho)} \mathbf{O}_R^{-1} = \sum_{\sigma=-\omega}^{\omega} \mathbf{D}^{(\omega)}(R)_{\sigma\varrho}^* \mathbf{T}^{(\sigma)}. \quad (21.17c)$$

<sup>4</sup> (11.18a) és (21.16), látszólagos hasonlóságuk ellenére, teljesen különböző összefüggések. Az előző a vektor második koordináta-rendszerbeli vesszős komponenseit adja meg az első koordináta-rendszerbeli vesszőtlen komponenseivel. A három egyenlet (21.16)-ban az  $X', Y', Z'$  mentén irányított vektorokat szolgáltatja az  $XYZ$  mentén irányított vektorok segítségével. A két egyenlet egyíthetői azért azonosak, mert valós ortogonális mátrixot alkotnak; különben az egyik a másik inverzének transzponáltja volna.

Ezekből az egyenletekből most (21.15)-höz hasonló, de a vektor- és tenzoroperátorokra érvényes egyenleteket vezetünk le. (21.17c)-t felhasználjuk most a

$$T_{Nj\mu; N'j'\mu'}^{(\varrho)} = (\Psi_{\mu}^{Nj}, \mathbf{T}^{(\varrho)} \Psi_{\mu'}^{N'j'}) \quad (21.19)$$

skalárszorzatban, mégpedig úgy, hogy a skalárszorzat mindkét részébe beírjuk  $\mathbf{O}_R$ -et. Így azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} T_{Nj\mu; N'j'\mu'}^{(\varrho)} &= (\mathbf{O}_R \Psi_{\mu}^{Nj}, \mathbf{O}_R \mathbf{T}^{(\varrho)} \mathbf{O}_R^{-1} \mathbf{O}_R \Psi_{\mu'}^{N'j'}) = \\ &= \sum_{\nu} \sum_{\sigma} \sum_{\nu'} D^{(j)}(R)_{\nu\mu}^* D^{(\omega)}(R)_{\sigma\varrho}^* D^{(j')}(R)_{\nu'\mu'} T_{Nj\nu; N'j'\nu'}^{(\sigma)}. \end{aligned} \quad (21.19a)$$

Ha a skalároperátorokra vonatkozó hasonló képletet minden forgatásra kiintegrálnánk, akkor az ortogonalitási összefüggések (21.15)-öt közvetlenül szolgáltatnák. (21.19a)-ban három forgatási együttható szorzatát kell kiintegrálni. Először (17.16b) segítségével a két első szorzatát írjuk fel

$$D^{(j)}(R)_{\nu\mu} D^{(\omega)}(R)_{\sigma\varrho}^* = \sum_{L=|j-\omega|}^{j+\omega} s_{L\nu\sigma}^{(j\omega)} D^{(L)}(R)_{\nu+\sigma, \mu+\varrho}^* s_{L\mu\varrho}^{(j\omega)}.$$

Helyettesítsük ezt (21.19a)-ba és integráljunk valamennyi forgatásra a (10.12) ortogonalitási összefüggéseket figyelembe véve:

$$T_{Nj\mu; N'j'\mu'}^{(\varrho)} = \sum_{L=|j-\omega|}^{j+\omega} s_{L\mu\varrho}^{(j\omega)} \sum_{\nu\sigma\nu'} s_{L\nu\sigma}^{(j\omega)} \frac{\delta_{Lj'} \delta_{\nu+\sigma, \nu'} \delta_{\mu+\varrho, \mu'}}{2j'+1} T_{Nj\nu; N'j'\nu'}^{(\sigma)}.$$

Mindkét oldalt „osztottuk”  $\int dR$ -rel. Ez a kifejezés eltűnik, ha  $j'$  nem esik a  $|j-\omega|$   $j+\omega$  határok közé. Ha  $|j-\omega| \leq j+\omega$ , akkor

$$T_{Nj\mu; N'j'\mu'}^{(\varrho)} = s_{j'\mu\varrho}^{(j\omega)} \delta_{\mu+\varrho, \mu'} T_{Nj; N'j'}, \quad (21.20)$$

ahol  $T_{Nj; N'j'}$  nem függ  $\mu, \mu', \varrho$ -tól<sup>5</sup>.

Ez a képlet igen általános<sup>6</sup>. Olyan mátrixelemeknek, vagyis (21.19) alakú skalárszorzatoknak a  $T_{Nj\mu; N'j'\mu'}^{(\varrho)} / T_{Nj\mu; N'j'\mu'}^{(\sigma)}$  arányát adja meg, amelyekben a  $\Psi_{\mu}^{Nj}$  első tényező egy bizonyos sajátérték más és más sajátfüggvénye, az operátor valamely irreducibilis tenzor különböző komponense, a  $\Psi_{\mu'}^{N'j'}$  tényező pedig ismét egy sajátérték (amely különbözhet  $\Psi_{\mu}^{Nj}$  sajátértékétől) valamelyik sajátfüggvénye.

Részletezzük a vektoroperátor esetét, legyen tehát (21.20)-ban  $\omega=1$ . A vektorcsatolási együtthatók 205. oldalon található táblázatának a segítségével kapjuk a

<sup>5</sup>  $T_{Nj; N'j'}$ -t redukált vagy „kétvonalas” mátrixelemnek is nevezik és így jelölik:  $(N_j || T || N'j')$ .

<sup>6</sup> Ilyen általános alakban a képlet C. ECKARTTÓL származik. (Revs. Modern Phys. 2, 305 (1930)).

vektoroperátorokra vonatkozó, (21.15)-höz hasonló képleteket:

$$\begin{aligned} V_{Nj\mu; N'j-1\mu-1}^{(-1)} &= \sqrt{(j+\mu)(j+\mu-1)} V'_{Nj; N'j-1} \\ V_{Nj\mu; N'j-1\mu}^{(0)} &= \sqrt{(j+\mu)(j-\mu)} \sqrt{2} V'_{Nj; N'j-1}, \\ V_{Nj\mu; N'j-1\mu+1}^{(1)} &= \sqrt{(j-\mu-1)(j-\mu)} V'_{Nj; N'j-1}. \end{aligned} \quad (21.20a)$$

$$\begin{aligned} V_{Nj\mu; N'j\mu-1}^{(-1)} &= \sqrt{(j-\mu+1)(j+\mu)} V'_{Nj; N'j}, \\ V_{Nj\mu; N'j\mu}^{(0)} &= \mu \sqrt{2} V'_{Nj; N'j}, \\ V_{Nj\mu; N'j\mu+1}^{(1)} &= \sqrt{(j+\mu+1)(j-\mu)} V'_{Nj; N'j}. \end{aligned} \quad (21.20b)$$

$$\begin{aligned} V_{Nj\mu; N'j+1\mu-1}^{(-1)} &= \sqrt{(j-\mu+1)(j-\mu+2)} V'_{Nj; N'j+1}, \\ V_{Nj\mu; N'j+1\mu}^{(0)} &= \sqrt{(j-\mu+1)(j+\mu+1)} \sqrt{2} V'_{Nj; N'j+1}, \\ V_{Nj\mu; N'j+1\mu+1}^{(1)} &= \sqrt{(j+\mu+1)(j+\mu+2)} V'_{Nj; N'j+1}. \end{aligned} \quad (21.20c)$$

A vektoroperátoroknak minden itt fel nem sorolt mátrixeleme eltűnik. A  $j=j'=0$  elemek ugyancsak zérusok. Természetesen  $V_{Nj; N'j'}$  nem határozható meg általános megfontolások alapján. Míg a skaláropertátorok mátrixelemei eltűnnek, ha a sorok és az oszlopok teljes kvantumszámai vagy mágneses kvantumszámai különböznek ( $j$  és  $j'$  vagy  $\mu$  és  $\mu'$ ), addig vektoroperátorok esetében e kvantumszámok eggyel különbözhetnek egymástól.

(21.20) levezetése során az  $\mathbf{O}_R$  operátorok részletes alakjára vonatkozóan semmilyen feltevést sem tettünk. A (21.20) egyenletnek ezért olyan elméletben is alkalmazhatónak kell lennie, amelyik a spint nem veszi figyelembe, tehát az  $\mathbf{O}_R$  helyébe  $\mathbf{P}_R$  kerül és a teljes  $j$  kvantumszám helyébe az  $l$  azimutális kvantumszám. Valóban, már többször következtetünk arra, hogy egy vektoroperátor mátrixelemei eltűnnek. Például előfordult, hogy az

$$x_1 + x_2 + \dots + x_n, \quad y_1 + y_2 + \dots + y_n, \quad z_1 + z_2 + \dots + z_n$$

mennyiségek szerepeltek szorzóként. Ezek pedig vektoroperátorok. A  $\psi_F$ -ből a  $\psi_E$  állapotba átvivő sugárzási átmenetknél azt találtuk, hogy az  $|( \psi_F, (x_1 + x_2 + \dots + x_n) \psi_E )|^2$ -tel arányos átmeneti valószínűség eltűnik, ha  $\psi_F$  és  $\psi_E$  azimutális kvantumszámainak különbsége nem 0 vagy  $\pm 1$ . Később láttuk, hogy a mágneses kvantumszám nem változik, ha a fény a  $Z$  irányban van polarizálva ( $\varrho=0$ ). A mágneses kvantumszám  $\pm 1$ -gyel változik meg, ha a fény az  $X$  vagy az  $Y$  irányban polarizált.

A Schrödinger-egyenletben a  $Z$  irányú  $\mathcal{H}_z$  mágneses erőteréből eredő tag

$$\mathbf{V}_z = \mathbf{V}^{(0)} = \frac{ie\hbar\mathcal{H}_z}{2mc} [x_1\partial/\partial y_1 + x_2\partial/\partial y_2 + \dots + x_n\partial/\partial y_n - y_1\partial/\partial x_1 - y_2\partial/\partial x_2 - \dots - y_n\partial/\partial x_n],$$

ez pedig egy vektoroperátor  $Z$  komponense. Ebben az esetben tulajdonképpen a  $V_{Nl\mu, Nl\mu}$  mátrix-elemeket számoltuk ki. A középső (21.20b) egyenletekből látható, hogy ezeknek a  $\mu$  mágneses kvantumszámmal kell arányosnak lenniük. Arra is rájöttünk, hogy az arányossági tényező  $\hbar \mathcal{H}_z/2mc$ , amely  $N$ -től és  $l$ -től független.

Bizonyos értelemben (21.20) szembeállítható a (19.6) egyenlettel. Ez utóbbiban kifejezetten meghatároztuk a sajátfüggvények függését a konfiguráció- $n$ -láb irányításától. Így — legalábbis spinmentes elméletben — egyetlen egyenletet kapunk, s ez mindazon információt tartalmazza, mely a rendszer forgásszimmetriájából a hullámfüggvényre következik. Mind az elemi, mind pedig a spines elméletben (21.20) közelítés nélkül tartalmazza mindazokat az információkat, amelyek a mátrixelemekre a forgásszimmetriából adódnak.

6. Érdekes<sup>7</sup>, hogy a teljes kvantumszám létezése és (21.20) fennállása már a teljesen általános (21.10) egyenletről is következik, noha (21.10)-ből nem állapítható meg  $j$  egész vagy félegész volta. Ez nem is várható, hiszen az elektronok száma (21.10)-ben nem szerepel.

Ha (21.10)-et használjuk a  $\mathbf{D}$ -k (21.14) szorzási tulajdonságának levezetésére, akkor (21.14) helyett csak annyit kapunk, hogy a (21.13)-ban definiált  $\mathbf{D}(R)$  mátrixokra

$$\mathbf{D}(SR) = c_{S,R} \mathbf{D}(S) \mathbf{D}(R), \quad (21.21a)$$

tehát ezek egy tényezőtől eltekintve a forgáscsoport ábrázolását alkotják. Az  $E$  egység elemet azonban ekkor is az egységmátrix ábrázolja. Megmutatjuk most, hogy minden (21.21a)-t kielégítő  $\bar{\mathbf{D}}(R)$  mátrixot megfelelő  $c_R$  számmal szorozva a  $\bar{\mathbf{D}}(R) = c_R \mathbf{D}(R)$  mátrixok olyan rendszerét kapjuk, amely az unitér mátrixok ábrázolását alkotja, vagyis amelyre

$$\bar{\mathbf{D}}(S) \bar{\mathbf{D}}(R) = \pm \bar{\mathbf{D}}(SR). \quad (21.21)$$

Ezért a 15. fejezet alapján e mátrixrendszer hasonlósági transzformáció segítségével felbontható a  $\mathbf{D}^{(0)}$ ,  $\mathbf{D}^{(1/2)}$ ,  $\mathbf{D}^{(1)}$ , ... ábrázolásokra. Ez azt jelenti, hogy a mátrixrendszer, amelyhez (21.10) vezet el, lényegében a 15. fejezet egy- és kétértékű ábrázolásaival azonos.

Így például a (20.16)-ot kielégítő kétdimenziós mátrixrendszer vagy az állandó mátrixokat tartalmazza ( $\mathbf{D}^{(0)}$ -t kétszer), vagy pedig  $\mathbf{D}^{(1/2)}$ -del ekvivalens, ahogy erre az előző fejezetben következtettünk.

Először legyen  $\bar{\mathbf{D}}(R) = c_R \mathbf{D}(R)$  és legyen  $c_R$  egyenlő  $\mathbf{D}(R)$  determinánsának  $(-1/\lambda)$ -ik hatványával; itt  $\lambda$  egyenlő  $\mathbf{D}(R)$  dimenziójával. Így a determináns  $\bar{\mathbf{D}}(R) = 1$

$$|\bar{\mathbf{D}}(R)| = |c_R \mathbf{1} \cdot \mathbf{D}(R)| = |c_R \cdot \mathbf{1}| \cdot |\mathbf{D}(R)| = c_R^\lambda |\mathbf{D}(R)| = 1. \quad (21.22)$$

<sup>7</sup> E fejezet hátralevő része a további fejezetek szempontjából nem játszik lényeges szerepet.

Ez még  $c_R$  értékét és  $\mathbf{D}(R)$  elemeit csak  $\omega$  erejéig határozza meg; itt  $\omega$  a  $\lambda$  értékű  $\lambda$ -adik egységgyök. Így minden  $R$  csoportelemnek  $\lambda$  számú mátrix felel meg, nevezetesen  $\mathbf{D}(R)$  azon többszöröse, amelyek determinánsa 1.

Ha  $\overline{\mathbf{D}}(S)$ -et  $\overline{\mathbf{D}}(R)$ -rel szorozzuk, akkor egy  $\overline{\mathbf{D}}(SR)$ -et kapunk. (21.21a) miatt ez a szorzat minden  $\overline{\mathbf{D}}(SR)$ -nek egyszerű állandószorosa. Determinánsa  $\overline{\mathbf{D}}(S)$  és  $\overline{\mathbf{D}}(R)$  determinánsának szorzata, amely utóbbi 1.

*Az egyetlen tényezőtől eltekintve ábrázolást alkotó  $\mathbf{D}(R)$ -ekből  $\lambda$  értékű ábrázolást kaptunk:* akármelyik  $\overline{\mathbf{D}}(S)$ -nek és  $\overline{\mathbf{D}}(R)$ -nek a szorzata egy  $\overline{\mathbf{D}}(SR)$ -et ad.

Kíséréljük meg eme ábrázolás többértékűségét csökkenteni azzal, hogy a  $\lambda$  számú  $\overline{\mathbf{D}}(R)$  mátrixok közül egyet tartunk meg, a többit pedig elvetjük. Természetesen ez nem hajtható végre önkényesen, hanem csak úgy, hogy bármelyik megtartott  $\overline{\mathbf{D}}(S)$  mátrixot bármelyik megtartott  $\overline{\mathbf{D}}(R)$ -rel szorozva éppen a megtartott  $\overline{\mathbf{D}}(SR)$ -et kapjuk eredményül. Ezt a kiválogatást H. WEYL módszerét<sup>8</sup> követve az ábrázolások folytonossági tulajdonságaira alapozzuk.

Ha  $S$  és  $S'$  két szomszédos csoportelem, akkor a  $\mathbf{D}(S)$ -ek eredeti alakjában igaznak kell lennie, hogy

$$\mathbf{D}(S) \sim \mathbf{D}(S') \quad \text{és} \quad |\mathbf{D}(S)| \sim |\mathbf{D}(S')|.$$

Az utóbbi egyenletből következik, hogy a  $c_S$ -nek  $\lambda$  különböző értéke és  $c_{S'}$ -nek  $\lambda$  számú különböző értéke párokba rendezhető úgy, hogy egy  $c_S$ -érték egy  $c_{S'}$ -értékhez közel essen, így vele párt alkosson. A  $\lambda$  számú  $\overline{\mathbf{D}}(S)$  páronként ugyancsak közel esik a  $\lambda$  számú  $\overline{\mathbf{D}}(S')$  mátrixhoz oly módon, hogy egy  $\overline{\mathbf{D}}(S)$  egy és csakis egy  $\overline{\mathbf{D}}(S')$  szomszédja, a többi  $\lambda - 1$  lényegesen különbözik tőle, hiszen olyan számmal van szorozva, amely 1-től lényegesen eltér (ez az egység  $\lambda$ -adik gyöke).

Ha az  $E=S(0)$  és az  $S=S(1)$  elemet a paramétertérben folytonos  $S(t)$  vonallal összekötjük, megkövetelhetjük, hogy a  $\overline{\mathbf{D}}(S(t))$  mátrixok folytonosan változzanak. Ily módon a  $\overline{\mathbf{D}}(S(0))=\overline{\mathbf{D}}(E)=\mathbf{1}$  mátrixból kiindulva és az  $S(t)$  utat végigkövetve a  $\lambda$  számú  $\overline{\mathbf{D}}(S)$  mátrix közül egyetlenhez jutunk el. Jelöljük ezt  $\overline{\mathbf{D}}(S)_{S(t)}$ -vel. Ha az  $S(t)$  vonalat folytonosan úgy deformáljuk, hogy a végpontokat rögzítjük, akkor  $\overline{\mathbf{D}}(S)_{S(t)}$  nem változik meg. (Hiszen csak folytonosan változhatna, ha a vonal folytonosan deformálódik, viszont ha más  $\overline{\mathbf{D}}(S)$ -be menne át, akkor ez ugrást jelentene számára.)

A  $\overline{\mathbf{D}}(S)_{S(t)} \cdot \overline{\mathbf{D}}(R)_{R(t)}$  szorzat az egyik  $\overline{\mathbf{D}}(SR)$  mátrix, s ez  $\overline{\mathbf{D}}(E)=\mathbf{1}$ -ből ugyancsak folytonosan érhető el. Az ennek megfelelő vonal első része az  $E$ -ből kiinduló  $S(t)$ . Ezen megyünk el  $S$ -ig, miközben  $\overline{\mathbf{D}}(E)$  folytonosan megy át  $\overline{\mathbf{D}}(S)_{S(t)}$ -be, majd tovább megyünk  $SR$ -ig az  $S, R(t)$  vonalon, ekkor  $\overline{\mathbf{D}}(S)_{S(t)}=\overline{\mathbf{D}}(S)_{S(t)} \cdot \mathbf{1}$  folytonosan megy át a  $\overline{\mathbf{D}}(S)_{S(t)}\overline{\mathbf{D}}(R(t))$  mátrixokon át  $\overline{\mathbf{D}}(S)_{S(t)}\overline{\mathbf{D}}(R)_{R(t)}$ -be:

$$\overline{\mathbf{D}}(S)_{S(t)} \cdot \overline{\mathbf{D}}(R)_{R(t)} = \overline{\mathbf{D}}(SR)_{S(t), S \cdot R(t)}. \quad (21.23)$$

<sup>8</sup> H. WEYL, Math. Z. 23, 271; 24, 328, 377, 789 (1925); V. SCHREIER, Abhandl. Math. Seminar Hamburg 4, 14 (1926); 5, 233 (1927).

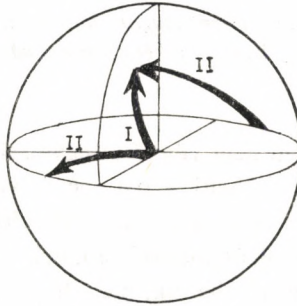
Ha minden  $E$ -ből  $S$ -be vezető vonal egymásba folytonos deformációval átvihető, akkor a paraméterter egyszerűen összefüggő, és csak egyetlen olyan  $\bar{\mathbf{D}}(S) = \bar{\mathbf{D}}(S)_{S(t)}$  létezik, amely  $\bar{\mathbf{D}}(E) = \mathbf{1} = \bar{\mathbf{D}}(E)$ -ből folytonosan származtatható. Ezek a  $\bar{\mathbf{D}}(S)$ -ek a csoport egyértékű ábrázolását alkotják.

Ha a paraméter többszörösen összefüggő, akkor két vagy több olyan  $S_1(t), S_2(t), \dots$  vonal létezik, amelyek nem vihetők át egymásba folytonos deformációval. A megfelelő  $\bar{\mathbf{D}}(S)_{S_1(t)}, \bar{\mathbf{D}}(S)_{S_2(t)}, \dots$  mátrixok is különbözhetnek egymástól. Az ábrázolás így módon annyi értékű, ahány egymásba át nem vihető vonal vezet  $E$ -ből  $S$ -be.

7. A (21.23) egyenlet azt sugallja, hogy az eredeti csoport helyett olyan „lefedő” csoportot tekintsünk, amelyben annyi  $S_{S_1(t)}, S_{S_2(t)}, \dots$  elem tartozik az eredeti csoport  $S$  eleméhez, ahány egymásba át nem vihető  $S_1(t), S_2(t), \dots$  vonal vezet  $E$ -ből  $S$ -be.<sup>9</sup> E lefedő csoport szorzási szabálya

$$S_{S_1(t)} R_{R_k(t)} = S R_{S_1(t) \cdot S \cdot R_k(t)} \quad (21.23a)$$

(21.23) szerint a  $\mathbf{D}(S)_{S_i(t)}$  mátrixok a lefedő csoport reguláris, egyértékű ábrázolását alkotják. Ebből következik, hogy folytonos csoport egyetlen tényező erejéig meghatározott ábrázolása a lefedő csoport reguláris ábrázolásába transzformálható át megfelelően választott számokkal történő szorzással. Ha a lefedő csoport valamennyi ábrázolása ismert, akkor az eredeti csoport valamennyi olyan ábrázolása is ismert, amely csupán egyetlen tényező erejéig van meghatározva.

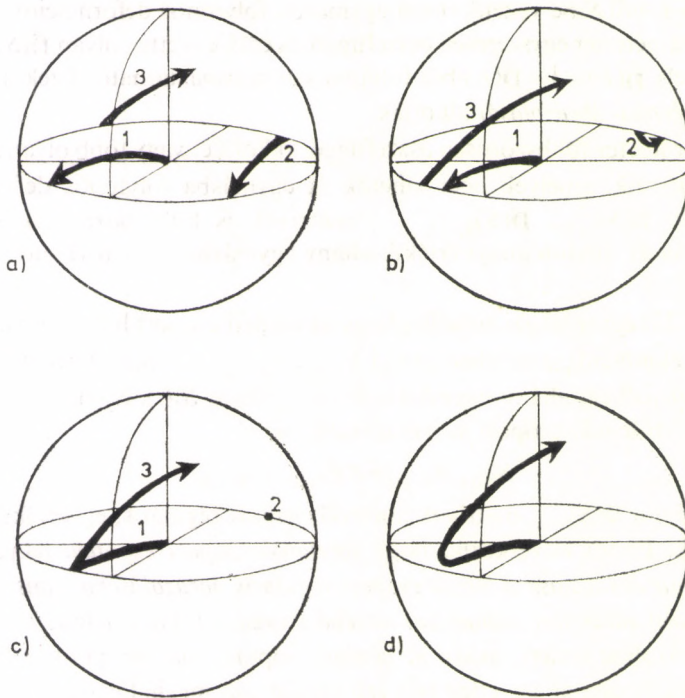


12. ábra.

A forgáscsoport bármely eleme az egységelemből vagy ugrást nem tartalmazó folytonos vonalon érhető el (I), vagy pedig olyan vonal mentén, amelyen valamelyik pontban átugrunk a pont antipódusába (II). E két út egymásba folytonos deformációval nem vihető át

A háromdimenziós valódi forgáscsoport paramétere (1. ábra, 99. oldal) kétszeresen összefüggő. Bármelyik pont vagy közvetlenül érhető el  $E$ -ből (12. ábra) (I), vagy pedig úgy, hogy átugrunk a gömbfelület szemben fekvő pontjára, az

<sup>9</sup> A szóban forgó csoportot Poincaré-csoportnak is nevezik.



13. ábra.

*Olyan vonal, amely két antipódusokra történő átugrást tartalmaz, folytonos deformációval átvihető olyan vonalba, amelyen nincs ugrás, tehát a két ugrás egymást a fenti módon megsemmisíti*

antipódusra (II), s e két vonal nem vihető át egymásba deformációval. (Az antipódusra való átugrás nem tekinthető a paraméter vonalán diszkontinuitásnak, hiszen az antipódusok ugyanannak a forgatásnak felelnek meg.) Az olyan vonal viszont, amelyen kétszer ugrunk át antipódusra, már átvihető ugrás nélküli vonalba, mert a deformációt úgy választhatjuk meg, hogy a két ugrás egymást megsemmisítse (13. ábra).

A lefedő csoportnak ennek megfelelően kétszer annyi eleme van, mint a forgás-csoportnak, következésképpen izomorf a  $\mathbf{D}^{1/2}(R)$ -ek csoportjával. Ez a forgás-csoport kétértékű ábrázolása, így a lefedő csoportnak biztosan reguláris ábrázolása. Az ábrázolás valóban hű, mivel minden forgatásnak két mátrix,  $\pm \mathbf{D}^{(1/2)}(R)$  felel meg, s ezek egymástól és minden más  $\mathbf{D}^{(1/2)}(S)$ -től különböznek.

A  $\mathbf{D}^{(1/2)}(R)$ -ek alkotják a unitér csoportot, ez tehát a háromdimenziós forgás-csoport lefedő csoportja. Ennek ábrázolásai felbonthatók az  $U^{(0)}$ ,  $U^{(1/2)}$ , ..., ábrázolásokra, következésképpen a  $\bar{\mathbf{D}}(R) = c_R \mathbf{D}(R)$  mátrixok széttördelhetők a  $\pm \mathbf{D}^{(0)}$ ,  $\pm \mathbf{D}^{(1/2)}$ ,  $\pm \mathbf{D}^{(1)}$ , ..., mátrixokra. Tegyük fel, hogy  $\mathbf{D}(R)$  alakját már redukáltuk.



(Ez csak azon múlik, hogy új lineárisan független függvényekre térünk át.) Ekkor az új függvényekre nyerjük, hogy

$$\mathbf{O}_R \Psi_\mu^{(j)} = \frac{1}{c_R} \sum_{\mu'} \mathbf{D}^{(j)}(R)_{\mu'\mu} \Psi_{\mu'}^{(j)} \quad (21.13b)$$

$j$  pedig a  $\Psi_{-j}^{(j)}, \Psi_{-j+1}^{(j)}, \dots, \Psi_{j-1}^{(j)}, \Psi_j^{(j)}$  sajátfüggvények teljes kvantumszámának tekinthető.

Noha (21.13b) nem teljesen egyenértékű (21.13a)-val, mégis módot nyújt a  $j$  teljes kvantumszámra vonatkozó legtöbb szabály levezetésére.

## 22. A SZÍNKÉPVONALAK FINOMSZERKEZETE

1. A 18. fejezetben levezettük a pályakvantumszám, a paritás és a multipliett rendszer kiválasztási szabályait. Ezek olyan elméletben voltak alkalmazhatók, amely a spint nem veszi figyelembe. Ha azokat az erőket is számításba vesszük, amelyek az elektronok spinből eredő mágneses momentumából adódnak, akkor a szabályok már nem lesznek szigorúan érvényesek, mivel azon alapultak, hogy  $\mathbf{P}_R\Psi$  az energiaoperátornak ugyanolyan sajátértékű sajátfüggvénye, mint  $\Psi$ . (A feltételezés szerint  $\mathbf{P}_R\Psi$  a forgatástól eltekintve azonos  $\Psi$ -vel.)

Most már tudjuk, hogy ha a spint is figyelembe vesszük, akkor nem  $\mathbf{P}_R$ , hanem  $\mathbf{O}_R$  foganatosítja az állapot elforgatását. ( $\mathbf{P}_R$  csupán a rendszer helykoordinátáit forgatja el.) Ennek megfelelően  $\mathbf{P}_R\Psi$  csak akkor lenne  $\mathbf{H}$  sajátfüggvénye, ha  $\mathbf{H}$  „spinmentes” mennyiség volna. A valóságban azonban spinből származó tagokat is tartalmaz, ezért  $\mathbf{P}_R\Psi$  nem a  $\Psi$  sajátértékéhez tartozó sajátfüggvénye  $\mathbf{H}$ -nak, ezért nem is írható fel e sajátérték sajátfüggvényeinek lineáris kombinációjaként. Ha tehát a spint is figyelembe vesszük, a sajátfüggvények nem tartoznak a  $\mathbf{P}_R$ -re vonatkozó forgáscsoport egyik ábzololásához sem. A pályakvantumszám fogalma szigorú értelemben nem gyümölcsoztható. E fogalomnak csak addig van értelme, és a 18. fejezet kiválasztási szabályai is csak addig érvényesek, amíg a spinből eredő tagok kicsinyek, amíg az igazi *Schrödinger*-egyenlet megoldásaira e tagok elhanyagolásával jó közelítések kaphatók. Ez a feltevés általában érvényes. Mindezt az alábbiakban részletezzük.

Mindazok a számolások, amelyeket a 18. fejezetben  $\mathbf{P}$  segítségével végeztünk el, akkor is végrehajthatók, ha  $\mathbf{P}$ -t  $\mathbf{O}$ -val helyettesítjük. Így szigorú eredményeket kapunk, hiszen a *Hamilton*-operátor minden tagja invariáns az  $\mathbf{O}$  operációkkal szemben. A forgatásoknak megfelelő  $\mathbf{O}_R$  operátorok felcserélhetők a tükrözés  $\mathbf{O}_I$  operátorával, és ezek mind felcserélhetők az  $\mathbf{O}_P$  operátorral, amely két vagy több elektron koordinátanégyeseit permutálja egymás között:

$$\begin{aligned} \mathbf{O}_P\Psi(x_{\alpha_1}, y_{\alpha_1}, z_{\alpha_1}, \dots, x_{\alpha_n}, y_{\alpha_n}, z_{\alpha_n}) &= \\ &= \Psi(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n). \end{aligned} \quad (21.1)$$

$\left[ P \text{ az } \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ \alpha_1 & \alpha_2 & \dots & \alpha_n \end{pmatrix} \text{ permutáció} \right]$ . A teljes szimmetriacsoport a forgatásokat

leíró  $\mathbf{O}_R$ -ek csoportjának direkt szorzata a tükrözési és permutációs csoporttal. E direkt szorzat ábrázolásai, s így a teljes *Schrödinger*-egyenlet sajátértékei is három szimbólummal, vagyis három kvantumszámmal jellemezhetők. Ezek jelölik ki a három csoport ama ábrázolásait, amelyek direkt szorzata megadja a teljes szimmetriacsoportnak azt az ábrázolását, amelyhez a kérdéses sajátérték sajátfüggvényei tartoznak. A forgatásoperátorok csoportjának  $\mathbf{D}^{(j)}$  ábrázolásait az előző fejezetben vizsgáltuk meg; így megkaptuk a teljes impulzusmomentum  $J$  kvantumszámát<sup>1</sup>. Az  $\mathbf{O}_E=1$ ,  $\mathbf{O}_I=\mathbf{P}_I$  tükrözéscsoport ábrázolásai szolgáltatják a paritást. Most az  $\mathbf{O}_P$  permutációs operátorokat taglaljuk részletesebben. E vizsgálat elvezet a *Pauli*-féle ekvivalencia-elvhez, így majd a szigorúan érvényes szimmetria tulajdonságokra vonatkozó megfontolásaink teljessé válnak. A fejezet hátralevő részében azzal foglalkozunk, hogy a fenti mennyiségek hogyan kapcsolódnak a 18. fejezetben megismert közelítő fogalmakhoz (az  $L$  pályakvantumszámhoz és az  $S$  multipllett rendszerhez).

A koordinátanégyesek (22.1) permutációit hasznos lesz felbontani két tényezőre. Ez megfelel az  $\mathbf{O}_R$  felbontásának a  $\mathbf{P}_R$  és a  $\Phi_R$  tényezőkre. Ily módon

$$\mathbf{O}_P = \mathbf{P}_P \mathbf{Q}_P = \mathbf{Q}_P \mathbf{P}_P, \quad (22.2)$$

ahol  $\mathbf{Q}_P$  csak a spinkoordinátákra hat:

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_P \Psi(x_1, y_1, z_1, s_{x_1}, \dots, x_n, y_n, z_n, s_{x_n}) = \\ = \Psi(x_1, y_1, z_1, s_1, \dots, x_n, y_n, z_n, s_n), \end{aligned} \quad (22.2a)$$

és  $\mathbf{P}_P$  pedig csupán a *Descartes*-koordinátákra:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_P \Phi(x_{\alpha_1}, y_{\alpha_1}, z_{\alpha_1}, \sigma_1, \dots, x_{\alpha_n}, y_{\alpha_n}, z_{\alpha_n}, \sigma_n) = \\ = \Phi(x_1, y_1, z_1, \sigma_1, \dots, x_n, y_n, z_n, \sigma_n). \end{aligned} \quad (22.2b)$$

Ha (22.2b)-ben  $\Phi$  helyébe  $\mathbf{Q}_P \Psi$ -t írunk, akkor

$$\mathbf{P}_P \mathbf{Q}_P \Psi(\dots, x_{\alpha_k}, y_{\alpha_k}, z_{\alpha_k}, \sigma_k, \dots) = \mathbf{Q}_P \Psi(\dots, x_k, y_k, z_k, \sigma_k, \dots).$$

Ha még a  $\sigma_k = S_{\alpha_k}$  helyettesítést is elvégezzük, akkor (22.2a) és (22.1) miatt kapjuk közvetlenül (22.2)-t.

2. A következőket lényegesen egyszerűsíti az a tény, hogy minden *fizikai* állapot  $\mathbf{O}_P$ -re vonatkozóan antiszimmetrikus ábrázoláshoz tartozik:

$$\mathbf{O}_P \Phi = \varepsilon_P \Phi; \quad (\mathbf{O}_P - \varepsilon_P) \Phi = 0. \quad (22.3)$$

<sup>1</sup> A könyv hátralevő részében ezt a kvantumszámot  $J$ -vel jelöljük.

Itt  $\varepsilon_P + 1$  vagy  $-1$  aszerint, hogy  $P$  páros vagy páratlan permutáció. (22.3)-at kielégítő függvényeket *antiszimmetrikus függvényeknek* nevezik. A *Pauli*-elv lényege az az állítás, hogy minden hullámfüggvény antiszimmetrikus.<sup>2</sup>

A *Pauli*-elv nem következménye a kvantummechanika korábban ismertett alapelveinek; a mozgásegyenlet szerepét játszó időfüggő *Schrödinger*-egyenlettel ellentétben ez kezdeti feltételnek tekinthető, amelyet minden rendszer teljesít. Ha (22.3) valamely időpontban kielégül, akkor bármely későbbi időpontban is ki fog elégülni. Mutassuk ezt meg. Tekintettel arra, hogy  $\mathbf{H}$  az  $\mathbf{O}_P$ -kel szemben szimmetrikus s így velük felcserélhető, az egyenletből következik, hogy

$$i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \mathbf{H}\Phi$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{O}_P - \varepsilon_P)\Phi = (\mathbf{O}_P - \varepsilon_P)i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \mathbf{H}(\mathbf{O}_P - \varepsilon_P)\Phi. \quad (22.3a)$$

Ebből azonban következik, hogy  $(\mathbf{O}_P - \varepsilon_P)\Phi$  mindig eltűnik, hacsak valamely időpontban zérus volt. (22.3a)-ból arra az eredményre jutunk, hogy az

$$((\mathbf{O}_P - \varepsilon_P)\Phi, (\mathbf{O}_P - \varepsilon_P)\Phi) \quad (22.E.1)$$

skalárszorzat időben állandó; így ha egyszer zérus volt, akkor mindig az is marad. (22.E.1) eltűnése következtében  $(\mathbf{O}_P - \varepsilon_P)\Phi$  is eltűnik. Látható, hogy a *Pauli*-elv legalábbis *összefér* a kvantummechanikai mozgásegyenlettel.

Annak a ténynek, hogy minden hullámfüggvény antiszimmetrikus ábrázoláshoz tartozik, egy fontos következménye érvényesül valamely rendszer részekre osztásakor. Tekintsünk például két olyan héliumatomból álló rendszert, amelyek bizonyos ideig kölcsönhatottak egymással, majd eltávolodtak egymástól. Jelöljük  $\mathbf{D}(P)$ -vel a negyedfokú szimmetrikus csoport ama ábrázolásait, amelyhez a hullámfüggvény az eltávolodás előtt tartozott. Ekkor feltehetjük a kérdést: a másodfokú szimmetrikus csoportnak mely ábrázolásához tartozhatik az egyik héliumatom állapota az eltávolodás után? Ha  $\mathbf{D}(P)$  antiszimmetrikus ábrázolás, akkor mindkét héliumatom állapota is biztosan antiszimmetrikus az eltávolodás után. Az a tény, hogy a rendszer egyik része valamely kitüntetett ábrázoláshoz tartozik, egyértelműen adódik abból, hogy a teljes rendszer az antiszimmetrikus ábrázoláshoz tartozik. Ez igaz akkor is, ha  $\mathbf{D}(P)$  a szimmetrikus (azonos) ábrázolás, akkor azonban nem, ha  $\mathbf{D}(P)$  valamilyen más ábrázolás.

Az összes hullámfüggvény antiszimmetrikus jellege nem bizonyítható általános megfontolásokból kiindulva, hanem kísérleti ténynek tekintendő.<sup>3</sup>

3. A következőkben a *Hamilton*-operátort két tagból állónak tekintjük:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_1. \quad (22.4)$$

<sup>2</sup> W. HEISENBERG, Z. Physik. **38**, 411 (1926), P. A. M. DIRAC, Proc. Roy. Soc. **112**, 661 (1926).

<sup>3</sup> W. PAULI megmutatta, hogy félegész spinű részecskékre relativisztikus térelmélet csak akkor fogalmazható meg könnyen, ha a *Pauli*-elv kielégül.

Az első tag a közönséges *Schrödinger*-operátor, amely a töltések kölcsönhatásait és a mozgási energiákat tartalmazza:

$$\mathbf{H}_0 = -\hbar^2 \sum_k \frac{1}{2m_k} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_k^2} \right) + V(x_1, \dots, x_n). \quad (22.4a)$$

Ez spinmentes operátor. A második  $\mathbf{H}_1$  tag az elektronok mágneses momentumát tartalmazza. Ezt  $\mathbf{H}_0$ -hoz képest kicsinynek tekintjük, és tárgyalásunk során „perturbációként” kezeljük majd. E perturbáció létesíti a finomszerkezetet: az egyszerű (22.4a) *Schrödinger*-egyenlet sajátértékeinek (vagyis a „durva” szintszerkezetnek) felhasadását számos finomszerkezeti komponensre.

A perturbációszámítás (5. fejezet) alkalmazásában az első lépés a „helyes lineáris kombinációk” meghatározása. Erre azért van szükség, mert a nem perturbált problémában  $\mathbf{H}_0$  valamennyi sajátértéke elfajult. Ez lesz e fejezet fő feladata. Feltehetjük az  $\mathbf{O}_P$ -ket illetően, hogy a helyes lineáris kombinációk a szimmetrikus csoport irreducibilis ábrázolásához tartoznak; a *Pauli*-elv miatt csak antiszimmetrikus ábrázolásokat használunk. Ha a tér izotrópiája nem sérül meg, akkor az is feltehető az  $\mathbf{O}_R$ -eket illetően, hogy a forgáscsoport valamely  $\mathbf{D}^{(J)}$  irreducibilis ábrázolásának egyik sorához tartoznak-e kombinációk. A jelen esetben  $\mathbf{H}_0$  valamely sajátértékénck olyan sajátfüggvényeiből, amelyek a  $\mathbf{D}^{(J)}$  ábrázolás egy bizonyos sorához tartoznak, csak egyetlen antiszimmetrikus lineáris kombináció készíthető, tehát a perturbációs eljárás helyes lineáris kombinációja egyedül a fenti követelményre szorítkozva már meghatározható.

Legyen  $\mathbf{H}_0$  egy sajátértéke  $E$  és  $\psi(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n)$  a megfelelő sajátfüggvény; ez utóbbi a *Descartes*-koordináták függvénye.  $\mathbf{H}_0$ -nak  $E$ -hez tartozó olyan sajátfüggvényét, mely az összes  $x_1, y_1, z_1, s_1, \dots, x_n, y_n, z_n, s_n$  koordinátáktól függ úgy kapjuk, hogy  $\psi$ -t a spinkoordináták tetszőleges  $f(s_1, \dots, s_n)$  függvényével megszorozzuk. Tekintve, hogy  $\mathbf{H}_0$  spinmentes operátor,  $f(s_1, \dots, s_n)$  állandó tényezőként kezelhető.

$$\mathbf{H}_0 \psi f = f \mathbf{H}_0 \psi = f E \psi = E \psi f. \quad (22.5)$$

Az  $s_1, s_2, \dots, s_n$  változóknak összesen  $2^n$  olyan lineárisan független függvénye létezik:

$$f_{\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_n} = \delta_{s_1 \sigma_1} \delta_{s_2 \sigma_2} \dots \delta_{s_n \sigma_n} \quad (\sigma_1 = \pm 1, \sigma_2 = \pm 1, \dots, \sigma_n = \pm 1) \quad (22.6)$$

Ezek segítségével  $s_1, s_2, \dots, s_n$  minden függvénye lineáris módon fejezhető ki, amint azt már beláttuk a 13. fejezetben, ahol a szimmetrikus csoport irreducibilis ábrázolásait meghatároztuk. Ha tehát

$$f_1, f_2, \dots, f_{2^n} \quad (22.6a)$$

az  $S$ -ek teljes ortogonális függvényrendszere (ezek lehetnek a (22.6) függvények), akkor  $\psi$ -ből  $\mathbf{H}_0$ -nak  $2^n$  sajátfüggvénye képezhető:

$$\psi f_1, \psi f_2, \dots, \psi f_{2^n}. \quad (22.7)$$

Ha az  $E$  sajátértékkel  $\mathbf{H}_0$ -nak több  $x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n$ -től függő sajátfüggvény-nyel rendelkezik, akkor mindegyikükből  $2^n$  olyan lineárisan független saját-függvény képezhető, amely a spinkoordinátákat is tartalmazza változóként. A spin-koordináták bevezetésével a spinmentes operátorok sajátértékeinek multiplicitása  $2^n$ -szerezésre nő meg. Ez annak felel meg, hogy  $\mathbf{H}_0\psi = E\psi$  csak a Descartes-koordinátákban lefolyó mozgást szabja meg; az  $n$  számú spin mindegyikét még két, egymással ellentétes irányba állíthatjuk be.

4. Először olyan rendszert vizsgálunk meg, amely az elektronok egyenértékű-ségén kívül nem mutat más szimmetriát, tehát a térbeli szimmetriát megbontja egy külső erőtér. Feltehetjük, hogy a  $\mathbf{H}_0$  adott sajátértékéhez tartozó és  $x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n$  változóktól függő  $\psi_1, \psi_2, \dots$  függvényei az  $n$ -edfokú szimmetriacsoport irreducibilis ábrázolása szerint transzformálódnak:

$$\mathbf{P}_P \psi_\kappa = \sum_{\kappa'} D(P)_{\kappa'\kappa} \psi_{\kappa'}. \quad (22.8)$$

Ezek az egyenletek akkor is érvényesek, ha  $\psi_\kappa$  helyébe  $\psi_\kappa f_\lambda$ -t írunk, hiszen a spin-koordináták függvénye a  $\mathbf{P}_P$  operátorok szempontjából állandó tényezőnek tekinthető.

$\mathbf{H}_0$ -nak  $\psi_\kappa f_\lambda$  sajátfüggvényei szükségképpen az  $\mathbf{O}_P$ -k csoportjának egy ábrázolá-sához is hozzátartoznak, hiszen az elektronok akkor is egyenértékűek, ha a spint is figyelembe vesszük. Az  $\mathbf{O}_P \psi_\kappa f_\lambda$  állapotnak, amely  $\psi_\kappa f_\lambda$ -tól csupán abban különbözik, hogy benne az elektronok szerepet cseréltek, ugyancsak  $\mathbf{H}_0$  sajátfüggvényé-nek kell lennie, ugyanolyan sajátértékkel, mint  $\psi_\kappa f_\lambda$ . Ezért  $\mathbf{O}_P \psi_\kappa f_\lambda$  kifejezhető a  $\psi_{\kappa'} f_{\lambda'}$ -k lineáris kombinációjaként.  $\mathbf{P}_P \psi_\kappa$  helyébe az

$$\mathbf{O}_P \psi_\kappa f_\lambda = \mathbf{P}_P \mathbf{Q}_P \psi_\kappa f_\lambda = \mathbf{P}_P \psi_\kappa \cdot \mathbf{Q}_P f_\lambda \quad (22.9)$$

egyenletben beírhatjuk (22.8) jobb oldalát és kifejezhetjük  $\mathbf{Q}_P f_\lambda$ -t az  $f_{\lambda'}$ -k segít-ségével, hiszen *s minden* függvénye az  $f_{\lambda'}$ -k segítségével kifejezhető. Azért azonban, hogy az együtthatóknak a lehető legegyszerűbb rendszerét kapjuk, a (22.6a) orto-gonális rendszerből kell kiindulnunk; e függvények a  $\mathbf{Q}_P$  operátorok szimmetrikus csoportjának irreducibilis ábrázolásához tartoznak.

5. A 13. fejezetben az  $s$ -ekre meghatároztunk ilyen ortogonális rendszert. Ott (22.6) helyett az

$$s_1^{s_1} s_2^{s_2} \dots s_n^{s_n} \quad (22.6b)$$

rendszer használtuk. E függvényeket úgy rendeztük el, hogy a  $k$ -adik sor függvényei mind  $k$ -adfokúak voltak ( $\gamma_1 + \gamma_2 + \dots + \gamma_n = k$ ). Ilyen függvény  $\binom{n}{k}$  van. Megmutattuk akkor, hogy ha  $k \leq \frac{n}{2}$ , a  $k$ -adfokú függvényből oly lineáris kombinációk képezhetők, amelyek mindegyike a

$$\mathbf{D}^{(0)}, \mathbf{D}^{(1)}, \dots, \mathbf{D}^{(k)} \quad (22.E.2)$$

ábrázolások egyikének valamelyik sorához tartoznak. Tekintve, hogy  $\mathbf{D}^i$  dimenziója

$$l_i = \binom{n}{i} - \binom{n}{i-1}, \quad (22.10)$$

azért e függvények száma valóban

$$l_0 + l_1 + l_2 + \dots + l_k = \binom{n}{k}.$$

A (22.E.2) ábrázolások helyére  $k \leq \frac{1}{2}n$  esetén a

$$\mathbf{D}^{(0)}, \mathbf{D}^{(1)}, \mathbf{D}^{(2)}, \dots, \mathbf{D}^{(n-k)} \quad (22.E.3)$$

ábrázolások lépnek (lásd a 144. oldalon a táblázatot).

Jelöljük a  $\mathbf{D}^{(i)}$  mátrix  $\lambda$ -adik sorához tartozó  $k$ -adfokú függvényeket  $g_{\lambda k}^{(i)}$ -val; ekkor

$$\mathbf{Q}_P g_{\lambda k}^{(i)} = \sum_{\lambda'=1}^{l_i} \mathbf{D}^{(i)}(P)_{\lambda' \lambda} g_{\lambda' k}^{(i)}; \quad (i=0, 1, 2, \dots, k, \text{ vagy } n-k). \quad (22.11)$$

A (22.6) függvények helyett inkább a (22.6b) függvényeket használtuk, mert ezekben egyszerűen elhagyhattuk az olyan  $s_q^{\gamma_q}$  tényezőket, amelyekben  $\gamma_q = 0$ , így a képletek egyszerűsödtek. Most azonban a (22.6) függvényekre térünk át azzal, hogy  $s_q^0$  helyébe  $\delta_{s_q, -1}$ -et,  $s_q^1$  helyébe  $\delta_{s_q, 1}$ -et, vagyis általában  $s_q^{\gamma_q}$  helyébe  $\delta_{s_q, 2\gamma_q - 1}$ -et helyettesítünk. Így az

$$UF(s_1, s_2, \dots, s_n) = \sum_{\gamma_q=0,1} c_{\gamma_1 \gamma_2 \dots \gamma_n} \delta_{s_1, 2\gamma_1 - 1} \delta_{s_2, 2\gamma_2 - 1} \dots \delta_{s_n, 2\gamma_n - 1} \quad (22.12a)$$

kerül mindenütt az

$$F(s_1 s_2 \dots s_n) = \sum_{\gamma_q=0,1} c_{\gamma_1 \gamma_2 \dots \gamma_n} s_1^{\gamma_1} s_2^{\gamma_2} \dots s_n^{\gamma_n} \quad (22.12)$$

függvény helyébe. Ezzel a transzformációs tulajdonságok nem változnak meg, hiszen (22.12)-nek (22.12a)-val történő helyettesítése nyilvánvalóan felcserélhető a

változók permutációjával. Ezért az

$$Ug_{\lambda k}^{(i)} = f_{\lambda, k - \frac{1}{2}n}^{(\frac{1}{2}n-i)}, \quad Ug_{\lambda, \frac{1}{2}n+m}^{(\frac{1}{2}n-S)} = f_{\lambda m}^{(S)} \quad (22.13)$$

és a<sup>4</sup>

$$D^{(i)}(P) = A^{(\frac{1}{2}n-i)}(P)*; \quad D^{(\frac{1}{2}n-S)}(P) = A^{(S)}(P)* \quad (22.13a)$$

jelölések segítségével (22.11) alapján

$$O_{P'} f_{\lambda m}^{(S)} = \sum_{\lambda'} A^{(S)}(P)_{\lambda' \lambda}^* f_{\lambda' m}^{(S)}. \quad (22.11a)$$

Páros  $n$ -re mind  $S$ , mind pedig  $m$  egész; páratlan  $n$ -re mindkettő félegész.

$A g_{\lambda, \frac{1}{2}n+m}^{(\frac{1}{2}n-S)}$  függvény  $\frac{1}{2}n+m$ -ed fokú, tehát ha a (22.12) alakban írjuk, akkor csak az  $\frac{1}{2}n+m$  számú  $s^1$  tényezőt (és  $\frac{1}{2}n-m$  számú  $s_0^0$  tényezőt) tartalmazó tagok fordulnak elő benne. Ezért az  $Ug_{\lambda, \frac{1}{2}n+m}^{(\frac{1}{2}n-S)} = f_{\lambda m}^{(S)}$  függvényben csak olyan tagok szerepelnek, amelyekben a  $\delta_{s_0, 1}$  tényezők száma  $\frac{1}{2}n+m$  (és a  $\delta_{s_0, -1}$  tényezők  $\frac{1}{2}n-m$ ); az  $f_{\lambda m}^{(S)}$  függvények csak az  $s$ -ek értékeinek olyan sorozatára különbözik zérustól, amelyben az  $s$ -ek közül  $\frac{1}{2}n+m$  egyenlő  $+1$ -gyel (és  $\frac{1}{2}n-m$  pedig  $-1$ -gyel), tehát az  $s_0$ -k összege  $\frac{1}{2}n+m - (\frac{1}{2}n-m) = 2m$ ;

$$f_{\lambda m}^{(S)}(s_1 s_2 \dots s_n) = 0 \quad \text{ha} \quad s_1 + s_2 + \dots + s_n \neq 2m. \quad (22.14)$$

Ha az  $s$ -ek teljes, ortogonális függvényrendszerének az

$$f_{\lambda m}^{(S)} \begin{cases} \lambda = 1, 2, \dots, \binom{n}{\frac{1}{2}n-S} - \binom{n}{\frac{1}{2}n-S-1} \\ m = -S, -S+1, \dots, S-1, S, \\ S = \frac{1}{2}n, \frac{1}{2}n-1, \frac{1}{2}n-2, \dots, \frac{1}{2} \quad \text{vagy} \quad 0 \end{cases} \quad (22.E.4)$$

függvényeket választjuk, akkor (22.8) és (22.11a) miatt (22.9) így alakul:

$$O_{P'} \psi_{\alpha} f_{\lambda m}^{(S)} = \sum_{\alpha'} \sum_{\lambda'} D(P)_{\alpha' \alpha} A^{(S)}(P)_{\lambda' \lambda}^* \psi_{\alpha'} f_{\lambda' m}^{(S)}. \quad (22.9a)$$

$\psi_{\alpha} f_{\lambda m}^{(S)}$ -ek egymás között tehát a

$$D(P) \times A^{(S)}(P)*$$

direkt szorzat szerint transzformálódnak.

<sup>4</sup> (22.13a)-ban a csillagoknak nincs jelentőségük, mert  $D^{(i)}(P)$  valós. Csak azért használunk csillagot, mert a továbbiakban így nem kell  $D^{(i)}$  valós voltát kihasználni a számolások egyszerűsödnek.



6. Feltehetjük, hogy a perturbációs eljárásban, amely a spinfüggőerőket hivatott figyelembe venni, az első közelítés

$$\sum_{\substack{\kappa S' \\ \lambda m}} a_{S' \lambda m} \psi_{\lambda m}^{(S')} \quad (22.15)$$

sajátfüggvényei (a „helyes lineáris kombinációk”) az  $\mathbf{O}_p$ -k csoportjának irreducibilis ábrázolásaihoz tartoznak. A *Pauli*-elv megköveteli, hogy csak olyan sajátfüggvényeket használjunk, melyek ábrázolása antiszimmetrikus, ezért csak az antiszimmetrikus (22.15) lineáris kombinációkat kell meghatározoznunk. A *Pauli*-elvet kielégítő sajátfüggvények első közelítései tehát ezek lineáris kombinációi lesznek.

Tegyük fel tehát, hogy (22.15) antiszimmetrikus. Ekkor (22.9a)-ból és a  $\psi_{\kappa} f_{\lambda' m}^{(S')}$ -ek lineáris függetlenségéből következik, hogy

$$\sum_{\kappa \lambda} a_{\kappa S' \lambda m} D(P)_{\kappa' \kappa} A^{(S')}(P)_{\lambda' \lambda}^* = \varepsilon_P a_{\kappa' S' \lambda' m}. \quad (22.16)$$

Ha az  $A^{(S')}(P)$ -hez asszociált ábrázolást így jelöljük:

$$\bar{A}^{(S')}(P) = \varepsilon_P A^{(S')}(P) \quad (22.17)$$

és megszorozzuk (22.16)-ot  $\varepsilon_P$ -vel, akkor mivel  $\varepsilon_P^2 = 1$  következik, hogy

$$\sum_{\kappa \lambda} a_{\kappa S' \lambda m} D(P)_{\kappa' \kappa} \bar{A}^{(S')}(P)_{\lambda' \lambda}^* = a_{\kappa' S' \lambda' m}. \quad (22.18)$$

Felösszegezve ezt az összes  $P$  permutációra, az ortogonalitási összefüggések alapján állíthatjuk, hogy a bal oldal eltűnik, ha  $\mathbf{D}(P)$  és  $A^{(S')}(P)$  nem ekvivalensek. Ha  $\mathbf{D}(P)$  nem ekvivalens az egyik  $\bar{A}^{(S')}(P)$  ábrázolással sem, akkor valamennyi  $a_{\kappa' S' \lambda' m}$  eltűnik, a  $\psi_{\kappa} f_{\lambda m}^{(S)}$ -ekből antiszimmetrikus lineáris kombináció egyáltalán nem képezhető. Az  $s$ -ek függvényeiből és  $\mathbf{H}_0$  olyan sajátfüggvényeiből, amelyek  $\mathbf{P}_P$  valamely irreducibilis ábrázolásához tartoznak, csak akkor képezhető antiszimmetrikus sajátfüggvény, ha ez az ábrázolás ekvivalens valamelyik  $\bar{A}^{(2n)}$ ,  $\bar{A}^{(2n-1)}$ ,  $\bar{A}^{(2n-2)}$ , ... ábrázolással. A *Pauli*-elv kizárja  $\mathbf{H}_0$  olyan sajátfüggvényeit és sajátértékeit, amelyek más ábrázoláshoz tartoznak.

Feltesszük ezért, hogy  $\mathbf{D}(P)$  valamelyik  $\bar{A}^{(S')}(P)$ -vel, mondjuk  $\bar{A}^{(S)}(P)$ -vel ekvivalens. Tulajdonképpen azt tesszük fel, hogy azonos vele, hiszen  $\mathbf{D}(P)$  hasonlósági transzformációja annyit jelent csupán, hogy meghatározott módon kell a  $\psi_{\kappa}$  lineárisan független sajátfüggvényeket kiválogatnunk.  $S$ -et az  $\bar{A}^{(S)}$  ábrázoláshoz tartozó  $\psi_{\kappa}$  sajátfüggvények multipliett rendszerének nevezzük. Ha (22.18)-ba helyettesítjük azt, hogy

$$\mathbf{D}(P) = \bar{A}^{(S)}(P) \quad (22.19)$$

és az összes permutációra felösszegezzük, akkor  $(\mathbf{A}^{(S)}(P))$  dimenzióját most  $g_S$ -sel jelölve)

$$\sum_{\kappa\lambda} a_{\kappa S' \lambda m} \frac{n!}{g_S} \delta_{SS'} \delta_{\kappa' \lambda'} \delta_{\kappa \lambda} = n! a_{\kappa' S' \lambda' m}, \quad (2220.)$$

$$a_{\kappa' S' \lambda' m} = \delta_{SS'} \delta_{\kappa' \lambda'} \sum_{\kappa} \frac{a_{\kappa S \lambda m}}{g_S} = \delta_{SS'} \delta_{\kappa' \lambda'} b_m,$$

ahol  $b_m$  független  $S', \kappa', \lambda'$ -től. A  $\psi f_{\lambda m}^{(S)}$ -nek antiszimmetrikus lineáris kombinációja tehát (22.15) szerint a következő alakú:

$$\sum_{\substack{\kappa S' \\ \lambda m}} \delta_{SS'} \delta_{\kappa \lambda} b_m \psi_{\kappa} f_{\lambda m}^{(S')} = \sum_m b_m \sum_{\kappa} \psi_{\kappa} f_{\kappa m}^{(S)}. \quad (22.20a)$$

$2S+1$  lineárisan független antiszimmetrikus

$$\Xi_m^S = \sum_{\kappa} \psi_{\kappa} f_{\kappa m}^{(S)} \quad (22.20b)$$

függvény létezik az  $m$  kvantumszám  $2S+1$  számú értékének megfelelően.

Ha a  $\mathbf{H}_0$  egy sajátértékének  $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots$  sajátfüggvényeiből antiszimmetrikus függvényeket akarunk képezni, akkor az  $\bar{\mathbf{A}}^{(S)}$   $\kappa$ -ik sorához tartozó  $\psi_{\kappa}$ -t  $s$ -nek olyan  $f_{\kappa m}^{(S)}$  függvényével kell szorozni, amely az  $\mathbf{A}^{(S)*}$  asszociált ábrázolás  $\kappa$ -ik sorához tartozik és összegeznünk kell valamennyi  $\kappa$ -ra (az összes „partnerre”). A  $\psi_{\kappa} f_{\lambda m}^{(S)}$  függvények többi,  $g_S \cdot (2^n - 2S - 1)$  számú lineáris kombinációja, mely a fenti függvényekre ortogonális,  $\mathbf{O}_P$ -nek nem antiszimmetrikus ábrázolásához tartozik.

7. Ha  $\mathbf{H}_0$ -hoz hozzáadjuk a spines  $\mathbf{H}_1$  tagokat,  $\mathbf{H}$  megszűnik spinmentes operátornak lenni. Az  $E$  sajátérték számos oly sajátértékre hasad fel, amelyek általában az  $\mathbf{O}_P$  szimmetriaoperátorok csoportjának irreducibilis ábrázolásához tartoznak. Mivel a fizikában megvalósítható összes állapot hullámfüggvénye antiszimmetrikus, azért csak antiszimmetrikus ábrázoláshoz tartozó szint lehet energiaszint.  $\mathbf{H}_0$ -nak  $E$  sajátértékű függvényei csupán  $(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n)$ -től függenek; ha ezek az  $\bar{\mathbf{A}}^{(S)}(P)$  ábrázoláshoz tartoznak, akkor az  $E$  energiája környezetében  $2S+1$  egymáshoz közeli szint jelenik meg. Első közelítésben e szintek mindegyikéhez a (22.20b)  $\Xi_m$  kombinációi közül egy tartozik hozzá. A valóságos helyes lineáris kombinációt (vagyis (22.20a)-ban a  $b_m$ -ek értékeit) nem lehet meghatározni a

$$(\mathbf{H}_1)_{m'm} = (\Xi_m', \mathbf{H}_1 \Xi_m) \quad (22.20c)$$

mátrix  $(2S+1)$  dimenziós szekuláris egyenletének megoldása nélkül; mivel esetünkben a feltételezett külső erők miatt nincs oly szimmetria, amely a segítségünkre lehetne.

8. Tekintsünk most olyan rendszert, amely az elektronok egyenértékűsége mellett még forgásszimmetrikus is. Ekkor  $\mathbf{H}_0$ -nak  $(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n)$ -től függő

sajátfüggvényei az  $S$  multipliett rendszer mellett még  $L$  pályakvantumszámmal is rendelkeznek, és megválaszthatók oly módon, hogy kielégítsék a

$$\mathbf{P}_P \psi_{\kappa\mu} = \sum_{\mu'} \bar{A}^{(S)}(P)_{\kappa'\kappa} \psi_{\kappa'\mu'}, \quad (22.21)$$

$$\mathbf{P}_R \psi_{\kappa\mu} = \sum_{\mu'} \mathbf{D}^{(L)}(R)_{\mu'\mu} \psi_{\kappa\mu'}$$

egyenleteket (itt  $P$  permutáció és  $R$  forgatás). A térkoordináták  $\psi_{\kappa\mu}$  függvényeiből képezhetők a  $\psi_{\kappa\mu} f_{\lambda m}^{(S)}$ -ek; ezek valamennyi koordináta függvényei és  $\mathbf{H}_0$ -nak szintén sajátfüggvényei. (22.21)-et  $\psi_{\kappa\mu} f_{\lambda m}^{(S)}$  ugyanúgy kielégíti, mint  $\psi_{\kappa\mu}$ , hiszen  $\mathbf{P}$  a spinkoordinátákat nem érinti, ezért (22.21)-ben az  $f_{\lambda m}^{(S)}$  spinfüggvény állandó tényezőként kezelhető.

A  $\psi_{\kappa\mu} f_{\lambda m}^{(S)}$  függvények szükségképpen hozzátartoznak az  $\mathbf{O}_R$ -ek forgáscsoportjához, amely ábrázolásához is, tekintve, hogy a spinirányok bevezetésével a térbeli irányok egyenértékűsége nem bomolhat meg. Valóban (lásd a hasonló (22.9) egyenletet)

$$\mathbf{O}_R \psi_{\kappa\mu} f_{\lambda m}^{(S)} = \mathbf{P}_R \psi_{\kappa\mu} \cdot \mathbf{Q}_R f_{\lambda m}^{(S)}, \quad (22.22)$$

és ebben az egyenletben  $\mathbf{P}_R \psi_{\kappa\mu}$  (22.21) felhasználásával kifejezhető az eredeti  $\psi_{\kappa\mu}$ -k segítségével. Mint az  $S$  változók minden függvénye,  $\mathbf{Q}_R f_{\lambda m}^{(S)}$  is felírható az  $f_{\lambda m}^{(S)}$ -ek lineáris kombinációjaként. Határozzuk meg most az együtthatókat.

Ha  $\mathbf{Q}_R f_{\lambda m}^{(S)}$ -et az  $f_{\lambda' m'}^{(S)}$ -kel fejezzük ki, akkor csak azokat az  $f_{\lambda m}^{(S)}$ -ket kell használnunk, amelyek ugyancsak  $\mathbf{A}^{(S)}$ -nek  $\lambda$ -adik sorához tartoznak hozzá, hiszen az  $s$ -ek permutációival szemben  $\mathbf{Q}_R$  szimmetrikus operátor (nem úgy, mint  $\mathbf{Q}_P$ ), és nem változtatja meg  $f_{\lambda m}^{(S)}$  transzformációs tulajdonságait. Ily módon

$$\mathbf{Q}_R f_{\lambda m}^{(S)} = \sum_{m'=-S}^S \mathbf{D}^{(S)}(R)_{m'm} f_{\lambda m'}^{(S)}; \quad (m = -S, -S+1, \dots, S-1, S). \quad (22.23)$$

Mivel  $\mathbf{Q}_R \mathbf{Q}_{R'} = \pm \mathbf{Q}_{RR'}$ , a  $\mathbf{D}^{(S)}(R)$  mátrixok a forgáscsoport  $2S+1$  dimenziós (egy- vagy kétértékű) ábrázolását alkotják. Nyomban megmutatjuk, hogy ez éppen az irreducibilis  $\mathbf{D}^{(S)}(R)$  ábrázolás.

Legyen  $R$   $\alpha$  szögű forgatás a  $Z$  tengely körül. Ekkor

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_R f_{\lambda m}^{(S)}(s_1, \dots, s_n) &= \sum_{t_\rho = \pm 1} \dots \mathbf{D}^{(\pm)}(R)_{\frac{1}{2} s_\rho' \frac{1}{2} t_\rho} \dots f_{\lambda m}^{(S)}(t_1, \dots, t_n) = \\ &= \sum_{t_\rho = \pm 1} \delta_{s_1 t_1} e^{i \frac{1}{2} s_1 \alpha} \dots \delta_{s_n t_n} e^{i \frac{1}{2} s_n \alpha} f_{\lambda m}^{(S)}(t_1, \dots, t_n) = \\ &= e^{i \frac{1}{2} (s_1 + \dots + s_n) \alpha} f_{\lambda m}^{(S)}(s_1, \dots, s_n), \\ \mathbf{Q}_R f_{\lambda m}^{(S)}(s_1, \dots, s_n) &= e^{+im\alpha} f_{\lambda m}^{(S)}(s_1, \dots, s_n), \end{aligned} \quad (22.24)$$

ahol az  $m = \frac{1}{2}(s_1 + s_2 + \dots + s_n)$  helyettesítést alkalmaztuk, hiszen (22.14) szerint az  $f_{\lambda m}^{(S)}$  függvény az  $s$ -ek más értéksorozatára biztosan eltűnik.  $R = \{\alpha, 0, 0\}$ -ra a (22.23)-ban az ábrázolás diagonális mátrix, melynek diagonális elemei:  $\exp(-iS\alpha)$ ,  $\exp(-i(S-1)\alpha)$ ,  $\dots$ ,  $\exp(+i(S-1)\alpha)$ ,  $\exp(+iS\alpha)$ . Így bizonyítottuk, hogy az ekvivalens a  $\mathbf{D}^{(S)}(R)$  irreducibilis ábrázolással. Mi több, (22.24) azt mutatja, hogy  $f_{\lambda m}^{(S)} \mathbf{D}^{(S)}(R)$   $m$ -ik sorához tartozik, tehát  $\mathbf{D}^{(S)}(R)$  valóban helyesen szerepel (22.23)-ban. Az  $s_1, s_2, \dots, s_n$  ama függvényei, amelyek a változók permutációit tekintve az  $\mathbf{A}^{(S)} = \mathbf{D}^{(\frac{1}{2}n-S)}$  ábrázoláshoz tartoznak, egyúttal a  $\mathbf{Q}_R$  forgatások forgáscsoportjának  $\mathbf{D}^{(S)}(R)$  ábrázolásához is hozzátartoznak. Ezek tulajdonképpen tehát a két csoport direkt szorzatának  $\mathbf{A}^{(S)*} \times \mathbf{D}^{(S)}$  ábrázolása szerint transzformálódnak. Ez következik, ha (22.23)-ra  $\mathbf{Q}_P$ -vel hatunk és utána felhasználjuk (22.11a)-t:

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_P \mathbf{Q}_R &= \sum_{m'} \mathbf{D}^{(S)}(R)_{m'm} \mathbf{Q}_P f_{\lambda m'}^{(S)} = \\ &= \sum_{m'} \sum_{\lambda'} \mathbf{D}^{(S)}(R)_{m'm} \mathbf{A}^{(S)}(P)_{\lambda'\lambda}^* f_{\lambda' m'}^{(S)} \end{aligned} \quad (22.24a)$$

tehát

$$f_{\lambda m}^{(S)} \mathbf{A}^{(S)}(P)^* \times \mathbf{D}^{(S)}(R)$$

$(\lambda, m)$  sorához tartozik hozzá.

A fenti gondolatmenet eredményeit jól szemléltethetjük az 144. oldalon található elrendezéssel. Gondoljuk el, hogy mindegyik  $\mathbf{D}^{(l)}$ -t azzal a függvénnyel helyettesítjük, amely  $\mathbf{D}^{(l)}$ -hez tartozik. Így az  $i$ -edik oszlop ama függvényeket tartalmazza majd, amelyek a változók permutációit tekintve a  $\mathbf{D}^{(l)} = \mathbf{A}^{(\frac{1}{2}n-l)}$ -hez tartozik; a  $k$ -adik sor  $\mathbf{D}^{(l)}$ -je helyére  $g_{1k}^{(i)}, g_{2k}^{(i)}, \dots$  kerül. Ha  $g_{\lambda k}^{(i)}$ -t (22.13) szerint  $f_{\lambda k}^{(\frac{1}{2}n-i)} = \mathbf{U} g_{\lambda k}^{(i)}$  helyettesíti, akkor a  $k = \frac{1}{2}n + m$ -ik sor oly függvényeket tartalmaz majd, amelyek  $Z$  körüli forgatások szempontjából  $\exp(im\varphi)$ -hez tartoznak. Abból, hogy  $\mathbf{D}^{(l)} = \mathbf{A}^{(\frac{1}{2}n-l)}$  legfeljebb egyszer fordul elő, minden sorban látható, hogy az  $s$ -eknek legfeljebb egy olyan függvénye létezik, amely  $\mathbf{A}^{(\frac{1}{2}n-i)}$  adott sorához és a  $Z$  körüli forgatások szempontjából  $\exp(im\varphi)$ -hez tartozik hozzá. Tekintve, hogy  $\mathbf{A}^{(\frac{1}{2}n-i)}$  előfordul az  $i, i+1, \dots, n-i-1, n-i$  sorokban, az  $m = k - \frac{1}{2}n$  kifejezés az  $i$ -ik oszlopban a  $-\frac{1}{2}n+i, -\frac{1}{2}n+i+1, \dots, \frac{1}{2}n-i-1, \frac{1}{2}n-i$  értékeket fogja felvenni. Azok a függvények, amelyek az  $i$ -ik oszlop különböző sorokban fordulnak elő, a háromdimenziós forgatások szempontjából  $\mathbf{D}^{(\frac{1}{2}n-i)}$  különböző soraihoz tartoznak s így „partnereik”.

Ha az  $f = \mathbf{U}g$  függvények helyett közvetlenül a 13. fejezet  $g$  függvényeit használtuk volna, akkor csak a „ $Z$  körüli forgatások” helyett „ $X$  körüli forgatásokot” kellene mondanunk, minden más változatlanul maradna.

Az  $x_1, y_1, z_1, s_1, \dots, x_n, y_n, z_n, s_n$  változók oly függvényei, amelyek az  $S$  multipliett rendszerhez tartoznak és a Descartes-koordináták  $\mathbf{P}_P$  permutációi alkalmazásával az  $\mathbf{A}^{(S)}$  ábrázolás szerint transzformálódnak, szükségképpen [(22.21) és (22.11a)] a spinkoordináták  $\mathbf{Q}_P$  permutációiokra az  $\mathbf{A}^{(S)*}$  ábrázolás szerint és a spinkoordináták forgatásakor  $\mathbf{D}^{(S)}$  szerint transzformálódnak (22.24a). Ezért a multipliett rendszer nem csupán a változók (vagy a Descartes- vagy a spinkoordináták) permutációira nézve szimmetria, hanem az  $s$  függvényeinek különleges szerkezete miatt egyúttal a spinkoordináták elforgatása szempontjából is az, hasonlóan ahhoz, ahogy a pályakvantumszám a Descartes-koordináták elforgatásakor megnyilvánuló szimmetria kifejezője. A pályakvantumszám és a multipliett szerkezet között lényeges különbség onnan ered, hogy a legfontosabb meny-

nyiségek – mint például  $\mathbf{H}_0$  — spinmentesek, s ezek az összes  $\mathbf{Q}$ -val szemben invariánsak még akkor is, ha külső erőter megbontja a tér izotrópiáját.

Az, hogy a szimmetrikus csoport  $\mathbf{A}^{(S)}$  irreducibilis ábrázolásához tartozó  $f_{\lambda m}^{(S)}$  függvények egyúttal a forgáscsoport  $\mathbf{D}^{(S)}$  irreducibilis ábrázolásához is hozzá tartoznak és viszont, oly függvények tulajdonsága, amelyek változói csupán két értéket vehetnek fel. Ha  $s$  több értéket vehetne fel, akkor oly függvény, amely a szimmetrikus csoport bizonyos ábrázolásához tartozik, a forgáscsoportnak még többféle ábrázolásához is hozzá tartozhatna és fordítva, a forgáscsoport adott ábrázolásához tartozó függvény még a szimmetrikus csoport többféle ábrázolásához is hozzá tartozhatna. A forgatási és permutációs tulajdonságok csupán kétértékű változók esetén kapcsolódnak össze a fent ismertetett módon.

9. Képezzünk a  $\psi_{\kappa\mu} f_{\lambda m}^{(S)}$ -ekből antiszimmetrikus kombinációkat (22.20b) módjára. Ezek száma  $(2S+1)(2L+1)$  lesz, hiszen minden  $\mu$ -re megalkotható a (22.20b) kifejezés:

$$\Xi_{m\mu}^{SL} = \sum \psi_{\kappa\mu}^{SL} f_{\lambda m}^{(S)} \quad (22.25)$$

Alkalmazzunk forgatást a  $\Xi_{m\mu}^{SL}$  állapotokra:

$$\begin{aligned} \mathbf{O}_R \Xi_{m\mu}^{SL} &= \sum_{\kappa} \mathbf{P}_R \psi_{\kappa\mu}^{SL} \mathbf{Q}_R f_{\lambda m}^{(S)} = \\ &= \sum_{\kappa} \sum_{\mu' m'} \mathbf{D}^{(L)}(R)_{\mu' \mu} \psi_{\kappa\mu'}^{SL} \mathbf{D}^{(S)}(R)_{m' m} f_{\lambda m'}^{(S)} = \\ &= \sum_{\mu' m'} \mathbf{D}^{(L)}(R)_{\mu' \mu} \mathbf{D}^{(S)}(R)_{m' m} \Xi_{m' \mu'}^{SL}. \end{aligned}$$

Látható, hogy ezek a  $\mathbf{D}^{(L)} \times \mathbf{D}^{(S)}$  direkt szorzat szerint transzformálódnak. Az eredményül adódó antiszimmetrikus sajátértékek  $J$  teljes kvantumszámát ezért a  $\mathbf{D}^{(L)} \times \mathbf{D}^{(S)}$  felbontásából kapjuk meg. E felbontást a 17. fejezetben már elvégeztük. Az irreducibilis komponensek felső indexei:

$$J = |L-S|, |L-S|+1, \dots, L+S-1, L+S, \quad (22.26)$$

míg a  $\Xi_{m\mu}^{SL}$ -k megfelelő lineáris kombinációi a 204. oldalon (17.18a) szerint:

$$\Psi_m^J = \sum_{\mu} s_{J\mu, m-\mu}^{(LS)} \Xi_{m-\mu, \mu}^{SL} \quad (22.27)$$

Az  $s_{J\mu, m-\mu}^{(LS)}$  együtthatókat a 17. fejezetben (17.27) és (17.27b) adja meg.

Az  $L$  pályakvantumszámú és  $S$  multipliett szerkezetű szint a spin bevezetése miatt  $2L+1$  vagy  $2S+1$  (attól függően, hogy melyik a kisebb) „finomszerkezeti komponensre” hasad fel, a teljes kvantumszámot (22.26) adja meg. Az első közelítés megfelelő sajátfüggvényeit (22.27)-ből kapjuk.

Noha a teljes térbeli szimmetria esetén valamely sajátértékhez tartozó sajátfüggvények száma sokkal nagyobb, mint akkor, ha nincs teljes szimmetria, a perturbációs eljárás helyes lineáris kombinációit mégis egyszerűbb meghatározni a teljes szimmetriára. A teljes térbeli szimmetria esetén a helyes lineáris kombinációk

együtthatói egyszerűen a 17. fejezetben taglalt vektorösszeadási modell együtt-  
thatói. Így a teljes térbeli szimmetria bőségesen kárpótol a velejáró benyodalma-  
kért.

(22.26) azt mutatja, hogy a spin bevezetésével az  $L$  pályakvantumszámú és  $S$   
multiplett rendszerű szintből származó szintek  $J$  teljes kvantumszámait a *vektor-*  
*összeadási modell* szolgáltatja. E modellben az  $L$  és  $S$  vektorok a 9. ábra szerint  
összegezve adják ki a  $J$  vektort.<sup>5</sup> Az  $L$  vektort, mint a pályamenti mozgás impulzus-  
momentumát értelmezzük,  $S$  az elektronok spinjének megfelelő impulzusmomen-  
tum,  $J$  pedig a teljes impulzusmomentum.

10. Határozzuk meg végül a (22.27) függvények paritását. Jelölje a  $\psi_{\mu}$  függ-  
vények paritását  $w$  (ez ugyanaz minden  $\psi_{\mu}$ -re), ekkor

$$\mathbf{P}_1 \psi_{\mu} = w \psi_{\mu}.$$

Ez érvényes a (22.7) függvényekre is, hiszen, ha a *Descartes*-koordináták függvé-  
nyeinek tekintjük őket, akkor a  $\psi_{\mu}$  függvények lineáris kombinációiként állnak  
elő és  $\mathbf{O}_1 = \mathbf{P}_1$ . A paritás tehát a spinkoordináták bevezetésével nem változik meg,  
hanem bármely szint valamennyi finomszerkezeti komponensére ugyanolyan lesz,  
mint amilyen az eredeti szint paritása volt a spin bevezetése előtt.

11. Becsüljük meg a „multiplett felhasadás” mértékét, vagyis az egyes finom-  
szerkezeti komponensek energiaszintjének a távolságát egymástól. Klasszikusan  
a felhasadást a spin mágneses momentumának és ama áram kölcsönhatásának  
energiája okozza, amelyet a mag körül, valamint az egymáshoz képest mozgó  
elektronok hoznak létre. A köráram által létrehozott tér erőssége  $\sim ev/r^2c$ , itt  $e$   
a töltés,  $v$  az elektron sebessége és  $r$  az origótól mért távolság.  $r$  helyett  $\hbar^2/me^2$ -et  
írhatunk, ez az első *Bohr*-pálya sugara; a kvantummechanika szerint a belső elekt-  
ronok átlagosan ilyen távolságra vannak a magtól.  $v$ -t az  $mvr \sim \hbar$  relációból becsül-  
hetjük meg. Így a mágneses tér erősségére kapjuk az

$$\sim \frac{m^2 e^7}{\hbar^5 c}$$

értéket. Az  $e\hbar/2mc$  mágneses dipólus energiája ebben az erőtérben  $me^8/2\hbar^4c^2$ .  
(*DIRAC* relativisztikus elméletében a pontos számítás a hidrogénatom  $N=2$ ,  $l=1$ ,  
 $j=\frac{1}{2}$  és  $j=\frac{3}{2}$  szintjeinek energiakülönbségére az  $me^8/32\hbar^4c^2$  értéket adja.) Ily módon  
a finomszerkezeti felhasadás nagyjából a különböző főkvantumszámú szintjeinek  
energiakülönbségének („durvaszerkezet”) és az

$$\sim \left( \frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 = \alpha^2 = \left( \frac{1}{137} \right)^2$$

számnak a szorzata.  $\alpha$  a *Sommerfeld*-féle finomszerkezeti állandó.

<sup>5</sup> E célból a 9. ábrán  $l$  helyébe  $L$ -et,  $\bar{l}$  helyébe  $S$ -et,  $L$  helyébe pedig  $J$ -t kell helyettesíteni.

A különböző fizikai effektusok nagyságrendjét közelítőleg úgy becsülhetjük meg, hogy az energiát a finomszerkezeti állandó hatványai szerint sorba fejtjük. A számolásban minden hatvány gyakorlatilag új fizikai effektusnak felel meg. A nulladik hatvány az elektron  $mc^2$  nyugalmi tömegét tartalmazza. Az első hatvány együtthatója zérus. A második hatvány az az energia, amelyet az egyszerű *Schrödinger*-elmélet ad meg. Ez arányos az  $mc^2\alpha^2 = me^4/\hbar^2$  mennyiséggel; ez az egyetlen olyan tag, amelyben a fénysebesség nem fordul elő. A harmadik hatvány együtthatója ismét zérus. Az imént láttuk, hogy a negyedik hatvány a perturbációs eljárás első közelítésében éppen a spines elektron mágneses momentumának energiáját adja meg. Az ötödik hatvány a szintek dipólussugárzásból következő kiszélesedését tartalmazza.<sup>6</sup> A hatodik tag a spin effektusainak második közelítése, a hetedik pedig a szinteknek a kvadrupólussugárzás folytán bekövetkező kiszélesedését adja meg. A nyolcadik a spinenergiának kiszámításában a harmadik közelítés, a kilencedik hatvány a szinteknek az interkombinációs tilalom által kizárt vonalak miatt előálló kiszélesedését szolgáltatja.

Ha a kifejtés egyik együtthatója elég nagy, a finomszerkezeti állandót magasabb hatványon tartalmazó tag természetesen nagyobb is lehet, mint egy alacsonyabb hatványú tag. Szabály szerint azonban minél magasabb hatványon tartalmazza a tag  $\alpha$ -t, annál kisebb. Bizonyos tagok (ilyen a finomszerkezeti felhasadás is) együtthatói azonban nőnek, ha az atom töltésszáma nő, míg más tagok (például a szintek sugárzásos kiszélesedése) esetében általában nem ez a helyzet. Így például a finomszerkezeti felhasadás második közelítése — az első néhány elemtől eltekintve — jóval nagyobb, mint a sugárzásos kiszélesedés. Azok a vonalak, amelyeket az interkombinációs tilalom zár ki, majdnem mindig erősebbek, mint a kvadrupólus vonalak. Ily módon az  $\alpha$  hatványai szerint történő kifejtés sokszor nem jelent az effektusok csoportosítására vonatkozó kombinációnál sokkal többet. Ha a sorban az előbb megjelenő tag a későbbieknél nagyobb, akkor azt mondjuk, hogy a csatolás normális.

12. Ha (22.27) pontosan adná meg  $\mathbf{H}$  sajátfüggvényeit, akkor ezek a  $\mathbf{P}_P$  és a  $\mathbf{P}_R$  csoportok  $\mathbf{A}^{(S)}(P)$ , illetőleg  $\mathbf{D}^{(L)}(R)$  irreducibilis ábrázolásaihoz tartoznának, és a multiplett rendszerre, valamint a pályakvantumszámra vonatkozó kiválasztási

<sup>6</sup> A két szint kiszélesedésének összege a köztük levő átmenet vonalának természetes szélességét adja meg. A szint szélessége a szintből lehetséges összes átmenet valószínűségének összege szorozva  $\hbar$ -val. Ha (18.1a)-ban  $\hbar\omega$  helyébe  $\hbar\omega \sim mc^2\alpha^2$ -t és  $x$  mátrixelemébe az első *Bohr*-pálya sugarát írjuk, akkor az átmeneti valószínűség

$$\frac{4}{3} \frac{e^2 m^3 c^6 \alpha^6}{\hbar^3 \hbar^3} \cdot \frac{\hbar^4}{m^2 e^4} \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{4mc^3 \hbar \alpha^6}{3e} \sim \frac{mc^2}{\hbar} \alpha^5,$$

tehát  $\alpha$  ötödik hatványával arányos.

szabályok pontosan érvényesülnének. A valóságban (22.27) a sajátfüggvényeknek csupán első közelítése. Ha a

$$\Phi_m^{NJ} = \Psi_m^{NJ} + \sum_{N' \neq N} \sum_{J' m'} \left( \frac{\Psi_m^{N'J'}, \mathbf{H}_1 \Psi_m^{NJ}}{E_N - E_{N'}} \right) \Psi_m^{N'J'} \quad (22.28)$$

második közelítés lényegében megegyezik az elsővel, akkor feltehetjük, hogy az első már majdnem helyes.<sup>7</sup> Ebben az esetben az olyan átmenetek, amelyeket az  $S$ -re és  $L$ -re vonatkozó kiválasztási tilalmak zárnak ki, nem fordulhatnak elő számottevő intenzitással.

(22.28)-ban elég  $N'$ -re összegezni, mivel  $\mathbf{H}_1$  az  $\mathbf{O}_R$ -ekkel szemben szimmetrikus, s így  $(\Psi_m^{N'J'}, \mathbf{H}_1 \Psi_m^{NJ})$  biztosan eltűnik, ha  $J' \neq J$  vagy  $m' \neq m$ . Továbbá  $(\Psi_m^{N'J'}, \mathbf{H}_1 \Psi_m^{NJ})$  ugyanolyan nagyságrendű, mint  $(\Psi_m^{N'J}, \mathbf{H}_1 \Psi_m^{NJ})$ , amely viszont a spinből eredő perturbációs energia első közelítése (vagyis a multipliett felhasadás). Másrészt  $E_N - E_{N'}$  azon legközelebbi durvaszerkezeti szinttől mért távolság, amely a  $J$  teljes kvantumszámhoz tartozik. Ha ez jóval kisebb, mint a szint energiája, akkor (22.27) jó közelítés, különben nem az. A közelítés megbízhatósága ezért igen érzékenyen függ attól, hogy az olyan szintek, melyekre  $J$  azonos, de  $S$  és  $L$  különböző, mennyire esnek véletlenszerűen közel egymáshoz. (Ha  $\Psi_m^{N'J}$ -ben  $S$  és  $L$  megegyezik a  $\Psi_m^{NJ}$  függvény  $S$ -ével és  $L$ -ével, akkor (22.28)-ban a megfelelő tag  $\Psi_m^{N'J}$ -nek a  $\mathbf{P}$ -kkel szemben mutatott transzformációs tulajdonságait nem érinti.)

<sup>7</sup>  $E_N$ , az egyszerű *Schrödinger*-egyenlet összes sajátértékét futja be; az  $S$  és  $L$  index, amelyek a multipliett rendszert és a pályakvantumszámot adják meg, az  $N'$ -be van foglalva.



## 23. A SPIN FIGYELEMBEVÉTELÉVEL ADÓDÓ KIVÁLASZTÁSI ÉS INTENZITÁSSZABÁLYOK

A spint figyelembe vevő elméletből adódó kiválasztási, intenzitás- és intervallum-szabályok két osztályba sorolhatók. Az első osztály szabályai (ezeket alább 1-től 4-ig számozzuk meg) szimmetria meggondolásokból következnek anélkül, hogy a spinerők nagyságára bármilyen feltevést is tennénk. Ezek a szabályok mind tartalmukban, mind pedig alapfeltevéseiket tekintve nagyon hasonlítanak az egyszerű elmélet szabályaihoz (13. fejezet), amelyek szintén az energiaoperátornak forgatással és a tükrözéssel szemben mutatott invarianciájából következnek. A tér izotrópiája egyedül már nem elégséges a második osztály szabályainak (5-től 7-ig) levezetéséhez; itt azt is fel kell tételeznünk, hogy a spinerők kicsik az egyszerű elmélet elektrosztatikus erőihez képest, így az egyszerű elmélet sajátfüggvényei és sajátértékei nem változnak meg lényegesen, hogy a *Hamilton*-függvénybe a spineket is belevesszük.

1. A teljes kvantumszám kiválasztási szabálya ugyanaz, mint a pályakvantumszám kiválasztási szabálya az egyszerű elméletben. Dipólussugárzásos átmenetnél  $J$  értéke  $\pm 1$ -gyel, vagy 0-val változik meg azzal a további megszorítással, hogy két  $J=0$  szint között tilos az átmenet. A dipólussugárzásra a vektoroperátorok (szorzás  $[x_1 + x_2 + \dots + x_n]$ -nel stb.) mátrixelemei jellemzőek; ezek eltűnnek, ha a fenti feltételek nem teljesülnek.

A paritás kiválasztási szabálya (a *Laporte*-szabály) szintén ugyanaz marad, mert az  $\mathbf{O}_I$  operátor azonos az egyszerű *Schrödinger*-elmélet  $\mathbf{P}_I$  operátorával. Bármely poláris vektor összes

$$(\psi_F, \mathbf{V}_x \psi_E), (\psi_F, \mathbf{V}_y \psi_E), (\psi_F, \mathbf{V}_z \psi_E) \quad (23.1)$$

mátrixeleme eltűnik, ha csak  $\psi_F$ -nek  $w_F$ , illetve  $\psi_E$ -nek  $w_E$  paritása nem ellentétes. Ha a tengelyeket tükrözzük, a poláris vektor megőrzi az irányát, tehát komponensei előjelet váltanak,

$$\mathbf{O}_I \mathbf{V}_x \mathbf{O}_I^{-1} = -\mathbf{V}_x.$$

Az  $\mathbf{O}_I \psi_F = w_F \psi_F$  és az  $\mathbf{O}_I \psi_E = w_E \psi_E$  egyenletek miatt  $\mathbf{O}_I$  unitér jellegéből következik, hogy

$$\begin{aligned} (\psi_F, \mathbf{V}_x \psi_E) &= (\mathbf{O}_I \psi_F, \mathbf{O}_I \mathbf{V}_x \mathbf{O}_I^{-1} \cdot \mathbf{O}_I \psi_E) = \\ &= -w_F w_E (\psi_F, \mathbf{V}_x \psi_E). \end{aligned}$$

(23.1) tehát szükségképpen eltűnik, ha  $\psi_F$  és  $\psi_E$  paritása megegyezik. (Ugyanilyen módon megmutatható, hogy axiális vektor mátrixelemei zérusok, ha  $\psi_F$  és  $\psi_E$  paritása különböző.)

Ugyanilyen módon a *Laporte*-szabály érvényes marad egy durvaszerkezeti vonal valamennyi finomszerkezeti komponensére, hiszen a durvaszerkezeti szint paritását annak valamennyi finomszerkezeti komponense megtartja.

Ha a spektrum csupán  $w = (-1)^L$  paritású dublett szintekből áll (ilyen például az összes hidrogén-szerű spektrum), akkor a  $j$ -re és  $w$ -re vonatkozó kiválasztási szabályokból az  $L$ -re vonatkozó kiválasztási szabály következik. A *Laporte*-szabály miatt  $L$  csak páratlan számmal változhatik meg; egységnyi változás megengedett, de 3-as vagy ennél több nem, mert ez azt jelentené, hogy  $j$  ( $=L \pm \frac{1}{2}$ ) kettővel vagy ennél többel változnék meg, ami lehetetlen.

Azt a szabályt, hogy a transzformációs tulajdonság az elektronok permutációjakor nem változik meg, az az állítás tartalmazza, hogy a hullámfüggvények, amelyek mindegyike antiszimmetrikus, antiszimmetrikusak maradnak tetszőleges perturbáció során is (tehát nemcsak sugárzás hatására).

2. A  $Z$  tengellyel párhuzamos mágneses erőterben a  $j$  teljes kvantumszámú szintek  $2j+1$  *Zeeman*-komponensre hasadnak fel. A mágneses helyzeti energiát perturbációként kezelve a „helyes lineáris kombinációk” maguk a  $\Psi_\mu^j$ -k éppen úgy, mint az egyszerű elméletben. Ha  $\mathbf{O}_R$ -et  $\Psi_\mu^j$ -re alkalmazzuk (itt  $R$  egy  $\alpha$  szögű forgatás  $Z$  körül), akkor a  $\Psi_\mu^j$  hullámfüggvény egyszerűen  $e^{i\mu\alpha}$ -val szorozódik meg. A mágneses tér az elfajulást teljesen feloldja; így mágneses térben minden sajátértékhez csupán egyetlen sajátfüggvény tartozik.

A mágneses teret tartalmazó  $\mathbf{H}_2$  operátort fejtsük hatványsorba az erőter  $\mathcal{H}_x$ ,  $\mathcal{H}_y$ ,  $\mathcal{H}_z$  komponensei szerint:

$$\mathbf{H}_2 = (\mathcal{H}_x \mathbf{V}_x + \mathcal{H}_y \mathbf{V}_y + \mathcal{H}_z \mathbf{V}_z) + (\mathcal{H}_x^2 \mathbf{V}_{xx} + \dots) + \dots \quad (23.2)$$

Az első hatvány  $\mathbf{V}_x$ ,  $\mathbf{V}_y$ ,  $\mathbf{V}_z$  együtthatóinak axiális vektort kell alkotniuk, mivel  $\mathcal{H}$  maga axiális vektor és  $\mathbf{H}_2$ -nek skalárnak kell lennie. A  $Z$  irányú mágneses térből eredő energiaperturbáció első közelítésben

$$\mathcal{H}_z(\Psi_\mu^j, \mathbf{V}_z \Psi_\mu^j),$$

amely a vektoroperátorok mátrixelemeire vonatkozó képlet szerint  $\mu$ -vel arányos (lásd (21.19b) középső képletét). Gyenge mágneses erőter esetén a felhasadás a térerősség első hatványával arányos, és az eredeti szintet  $2j+1$  egyforma távolságú

komponensre bontja. Az egyszerű elmélet felhasadásával szemben azonban ez nem minden szintre egyforma nagy, és általánosan nem számolható ki. Csak „normális csatolás” esetén adható meg numerikusan, tehát akkor, ha (22.27) a sajátfüggvénynek jó közelítése.

Más a helyzet a Zeeman-komponensek intenzitásvizonyait illetően. A magasabb szint  $\mu$  komponensét az alacsonyabb  $\mu'$  komponensével összekötő vonal erősségét állandó univerzális tényezőtől eltekintve a

$$\left( \Psi_{\mu}^{Nj}, \sum_k z_k \Psi_{\mu'}^{N'j'} \right), \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \Psi_{\mu}^{Nj}, \sum_k (x_k + iy_k) \Psi_{\mu'}^{N'j'} \right), \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \Psi_{\mu}^{Nj}, - \sum_k (x_k - iy_k) \Psi_{\mu'}^{N'j'} \right)$$

kifejezések egyikének abszolútérték-négyzete adja meg attól függően, hogy a fény a  $Z$  irányban vagy balra, vagy jobbra cirkulárisan polarizált. Ezek egy vektoroperátor három komponensének mátrixelemei. Arányaik különböző  $\mu$ ,  $\mu'$  és polarizációértékek esetén közvetlenül (21.19)-ből kaphatók. E képlet azt is mutatja, hogy a  $\mu$  mágneses kvantumszám csak 0-val ( $\pi$  komponensre), vagy  $\pm 1$ -gyel ( $\sigma$  komponensre) változhat meg. A relatív intenzitások  $j \rightarrow j-1$  átmenetre:

$$A_{\mu \rightarrow \mu-1} = (j+\mu)(j+\mu-1), \\ A_{\mu \rightarrow \mu} = 2(j+\mu)(j-\mu), \\ A_{\mu \rightarrow \mu+1} = (j-\mu)(j-\mu-1). \quad (23.3)$$

A három kifejezés összege (23.3)-ban, amely a mágneses momentum magasabb állapotból az alacsonyabb állapot összes Zeeman-szintjeibe történő átmenetek teljes valószínűsége, ugyanaz a felső szint valamennyi Zeeman-komponensére, vagyis független  $\mu$ -tól. Ugyanez érvényes az összes olyan vonal átmeneti valószínűségének összegére is, amelynél az alacsonyabbik Zeeman-szint a közös.

Az átmeneti valószínűségek eme összesszabályának fizikai alapja egyszerű. A (23.3) három kifejezés összege annak teljes valószínűsége, hogy a  $\Psi_{\mu}^{Nj}$  állapotból átmenet történik olyan állapotokba, amelyek energiája az alacsonyabb szintnek felel meg. A különböző  $\mu$ -jú  $\Psi_{\mu}^{Nj}$  állapotok azonban a tengelyek elforgatásakor egymás lineáris kombinációiba transzformálódnak át, így csupán forgatásban különböznek, ám a teljes átmeneti valószínűségnek forgatástól függetlennek kell lennie, tehát nem függhet  $\mu$ -tól.

Matematikailag az összesszabály (21.18a)-ból egyszerűen levezethető. Képezzük a

$$|T_{Nj\mu; N'j'\mu'}^{(\omega)}|^2 = \sum_{\nu\sigma\nu'} \sum_{\lambda\tau\lambda'} \mathbf{D}^{(j)}(R)_{\nu\mu}^* \mathbf{D}^{(j)}(R)_{\lambda\mu} \mathbf{D}^{(\omega)}(R)_{\sigma\varrho}^* \times \\ \times \mathbf{D}^{(\omega)}(R)_{\tau\varrho} \mathbf{D}^{(j)}(R)_{\nu'\mu'} \mathbf{D}^{(j)}(R)_{\lambda'\mu'}^* T_{Nj\mu; N'j'\nu'}^{(\sigma)} T_{Nj\lambda; N'j'\lambda'}^{(\tau)*}$$

kifejezést. Ha ezt  $\mu$ -re és  $\varrho$ -ra összegezzük, akkor  $\mathbf{D}^{(j)}$  és  $\mathbf{D}^{(\omega)}$  unitér jellege miatt a jobb oldal első négy tényezője helyébe  $\delta_{\nu\lambda} \cdot \delta_{\sigma\tau}$  kerül.

Az integrálás a forgatásokra az ortogonalitási összefüggések miatt azt adja, hogy

$$\sum_{\mu\varrho} |T_{Nj\mu; N'j'\mu'}^{(\varrho)}|^2 = \frac{1}{2j'+1} \sum_{\nu\sigma\nu'} |T_{Nj\nu; N'j'\nu'}^{(\sigma)}|^2. \quad (23.E.1)$$

Innen közvetlenül megállapítható, hogy (23.E.1) jobb oldalán az összeg  $\mu'$ -től független.

3. A  $Z$  tengellyel párhuzamos elektromos erőtér a  $j$  teljes kvantumszámú szintet  $j+1$  komponensre hasítja fel, ha az elektronok száma páros; ugyanúgy, mint a 18. fejezetben megvizsgált egyszerű elméletben. Ezek a kétdimenziós forgás—tükrözés-csoport

$$\mathbf{Z}^{(j)}, \mathbf{Z}^{(j-1)}, \dots, \mathbf{Z}^{(2)}, \mathbf{Z}^{(1)}, \mathbf{Z}^{(0)}, \text{ vagy } \mathbf{Z}^{(0')}$$

ábrázolásaihoz tartoznak. Az utolsó szint vagy  $\mathbf{Z}^{(0)}$ -hoz, vagy  $\mathbf{Z}^{(0')}$ -höz tartozik aszerint, hogy  $w(-1)^j$  értéke  $+1$  vagy  $-1$ . A 18. fejezetbelihez hasonló kiválasztási szabályok vezethetők le itt is, pontosan ugyanúgy mint ott, azzal a különbséggel, hogy  $L$  helyébe  $j$ -t kell írni.

A Stark-jelenséget páratlan számú elektron esetében részletesebben tárgyaljuk. Magát az eredményt voltaképpen elég egyszerűen megkaphatnánk, azonban itt egy elvi kérdést is meg kívánunk vizsgálni.

Nehézség merül fel annak a ténynek kapcsán, hogy minden  $R$  forgatásnak két  $\pm \mathbf{D}^{(j)}(R)$  mátrix felel meg. Ugyanez érvényes a nem valódi forgatásokra is:

$$\mathbf{D}^{(j, w)}(RI) = \pm w \mathbf{D}^{(j)}(R).$$

Csak a tükrözésnek felel meg az egyetlen  $+w\mathbf{1}$  mátrix. Az elektromos tér azonban megszünteti a tükrözési szimmetriát. Noha számos nem valódi forgatás megmarad, a megfelelő mátrixok kétértékűségük miatt ugyanazok, akár  $w = +1$ , akár  $w = -1$ . Ez azt sugallja, hogy valami lényeges elem elvész a kétértékűség folytán. Bizonyos szimmetriákra valóban ez lehet a helyzet. A most következő részletes elemzés az elektromos erőtér szimmetriacsoportjának esetében nem vezet a már nyilvánvaló eredményeken túl máshoz.

Annak érdekében, hogy egyértékű ábrázolásokat kapjunk, felidézünk, hogy páratlan számú elektronra a forgásszimmetria az  $\mathbf{O}_u$  operátorok segítségével fejeződik ki, s ezek a kétdimenziós unitér csoporttal izomorf csoportot alkotnak. Az invarianciát a nem valódi forgatásokkal szemben az  $\mathbf{O}_I, \mathbf{O}_u$  operátorokkal fejezzük ki. Az  $\mathbf{O}_u = \mathbf{1}\mathbf{O}_u, \mathbf{O}_I, \mathbf{O}_u$  operátorok összessége a tükrözéscsoport ( $\mathbf{O}_E = \mathbf{1}, \mathbf{O}_I$ ) és az  $\mathbf{O}_u$ -k csoportjának direkt szorzata. Jelölje  $\mathbf{z}$  a tükrözéscsoport és az unitér csoport direkt szorzatának<sup>1</sup> általános elemét. Ekkor a teljes tükrözés—forgatás-szimmetriát ki-

<sup>1</sup> A  $\mathbf{z}$ -k nem mátrixcsoportnak, hanem a  $J\mathbf{u}$  párok absztrakt csoportjának az elemei.  $J$  vagy  $E$ , vagy  $\mathbf{I}$  és  $\mathbf{u}$  az unitér csoport eleme. A szorzás szabálya a 16. fejezet szerint  $J\mathbf{u}J\mathbf{u}\mathbf{1} = JJ\mathbf{u}\mathbf{u}\mathbf{1}$ .

fejezhetjük az  $\mathbf{O}_z$ -k segítségével; ezek a  $z$ -k csoportjával izomorf csoportot alkotnak.  $z$  és  $\mathbf{O}_z$  vagy valódi forgatásnak felel meg (ekkor  $z$   $E_u$  alakú), vagy pedig nem valódi forgatásnak (ekkor  $z$  alakja  $I_u$ ). Két  $z$  vagy  $\mathbf{O}_z$  felel azonban meg minden forgatásnak, legyen az akár valódi, akár nem valódi forgatás.

Ha külső erőteret kapcsolunk be, akkor csak azok a  $z$ -k maradnak szimmetriaoperációk<sup>2</sup>, amelyek a külső erőterbe helyezett rendszer szimmetriacsoportjához tartozó valódi vagy nem valódi forgatásoknak felelnek meg. Az ezekhez

$$\mathbf{O}_z \Psi_u = \sum_{u'} D(z)_{u'u} \Psi_{u'} \quad (23.4)$$

szerint rendelt  $\mathbf{D}(z)$  mátrixok a megfelelő  $z$ -k csoportjának (egyértékű) ábrázolását alkotják, a rendszer egyes szintjei az erőterben e csoport más és más ábrázolásához tartoznak. A rendszer szimmetriacsoportja e csoporttal nem izomorf, hanem (egy-kettő értelműen) homomorf, hiszen minden elemének két  $z$  felel meg.

A  $Z$  tengellyel párhuzamos homogén elektromos erőter esetében a  $Z$  körüli elforgatások és a  $Z$ -n átfektetett síkokra való tükrözések tartoznak a szimmetriacsoporthoz. A  $Z$  körül elvégzett  $\alpha$  szögű forgatásoknak a

$$z_\alpha = E \begin{pmatrix} e^{-\frac{1}{2} i\alpha} & 0 \\ 0 & e^{\frac{1}{2} i\alpha} \end{pmatrix}; \quad z'_\alpha E = \begin{pmatrix} -e^{-\frac{1}{2} i\alpha} & 0 \\ 0 & -e^{+\frac{1}{2} i\alpha} \end{pmatrix} \quad (23.5)$$

$(-\pi < \alpha \leq \pi)$

mátrixok felelnek meg (lásd (15.16)-ot). A  $ZX$  síkra vonatkozó tükrözés nem egyéb, mint  $Y$  körül egy  $\pi$  szöggel forgatásnak és egy tükrözésnek a szorzata. Ezért a neki megfelelő  $z$ -k

$$z_y = I \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad z'_y = I \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (23.5a)$$

(23.5) és (23.5a) szorzatai más síkokra történő tükrözéseknek felelnek meg. A tükrözéscsoport és az unitér csoport direkt szorzatának ama ábrázolásában, amely a  $w$  paritású és  $j$  teljes kvantumszámú szinthez tartozik, a (23.5) csoportelemeknek megfelelő mátrixok:

$$\mathbf{D}(z_\alpha) = \begin{pmatrix} e^{-ij\alpha} & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & e^{ij\alpha} \end{pmatrix}, \quad (23.6)$$

$$\mathbf{D}(z'_\alpha) = - \begin{pmatrix} e^{-ij\alpha} & & & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \\ \vdots & & \ddots & \\ 0 & \dots & & e^{ij\alpha} \end{pmatrix}.$$

<sup>2</sup> Vagyis most már csak ezek transzformálják adott sajátérték sajátfüggvényeit ugyanazon sajátérték sajátfüggvényeibe.

Hasonló módon kapjuk a (23.5a) csoportelemeknek megfelelő mátrixokat. (Helyettesítsünk (15.21a)-ban  $a=0$ -t és  $b=-1$ -t  $z_y$ , és  $a=0$ -t,  $b=+1$ -et  $z'_y$  esetében és szorozzunk  $w$ -vel.)

$$\mathbf{D}(z_y) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 & -w \\ 0 & 0 & \dots & w & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & -w & \dots & 0 & 0 \\ w & 0 & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (23.6a)$$

A (23.6) és (23.6a) mátrixok és szorzataik ábrázolják a tükrözéscsoport és unitér csoport direkt szorzatának azon alcsoportját, amelynek elemei a rendszer — elektromos tér jelenlétében megőrződő — szimetriaelemeinek felelnek meg. Ez az ábrázolás a sorok és az oszlopok felcserélésével redukálható úgy, hogy sorrendjük  $-j, j, -j+1, j-1, \dots, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$  lesz  $-j, -j+1, \dots, j-1, j$  helyett. Ekkor az ábrázolás kétsoros irreducibilis ábrázolásokra bomlik fel:

$$\mathbf{Z}^{(m)}(z_\sigma) = \begin{pmatrix} e^{-im\alpha} & 0 \\ 0 & e^{im\alpha} \end{pmatrix} \quad (23.7)$$

$$\mathbf{Z}^{(m)}(z'_\alpha) = \begin{pmatrix} -e^{-im\alpha} & 0 \\ 0 & -e^{+im\alpha} \end{pmatrix}$$

és

$$\mathbf{Z}^{(m)}(z_\nu) = (-1)^{j-m} \begin{pmatrix} 0 & -w \\ w & 0 \end{pmatrix} \quad (23.7a)$$

$$\mathbf{Z}^{(m)}(z'_\nu) = (-1)^{j-m} \begin{pmatrix} 0 & w \\ -w & 0 \end{pmatrix}$$

amikor is  $m$  az

$$m = j, j-1, j-2, \dots, \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \quad (23.8)$$

értéket futja be. Így a  $j$  teljes kvantumszámú szint a Stark-jelenségben  $j+\frac{1}{2}$  komponensre hasad fel; ezek elektromos kvantumszámai tűnnek fel (23.8)-ban.

Ily módon igaz az, hogy a  $w=+1$  és  $w=-1$  eset  $\mathbf{Z}^{(m)}$  ábrázolásai a

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

mátrix segítségével egymásba áttranszformálhatók. A páros és páratlan szintekből származó egyforma elektromos kvantumszámú szintek transzformációs tulajdonságai tehát megegyeznek; kiválasztási szabályaik is egyformák. Ez az eredmény

már sejthető volt abból a tényből, hogy a *Laporte*-szabály elektromos térben páros számú elektron esetében sem érvényes, és a páros, illetőleg páratlan szintekből származó állapotok között az egyetlen különbség a 0, illetőleg 0' szintek megjelenése. Páratlan számú elektronnál a paritás eme jellegzetessége is elvész, mert 0 és 0' szint nem jelenhet meg.

4. Az elektromos erőter perturbációs operátorát (23.2) mintájára sorba fejtve az elektromos tér vektorának poláris természetéből következik, hogy a  $V_x, V_y, V_z$  együtthatóknak poláris vektor komponenseinek kell lenniük. Ezért tűnnek el a

$$(\Psi_{\mu}^{Nj}, V_z \Psi_{\mu'}^{Nj'})$$

mátrixelemek, amelyek a térerősség első hatványával arányos effektust okozhatnának, hiszen  $\Psi_{\mu}^{Nj}$  és  $\Psi_{\mu'}^{Nj'}$  paritása megegyezik.

A felhasadás csak az  $\mathcal{O}^2$ -tel arányos második közelítésben jelentkezik. Megmutatható, hogy e közelítésben az eltolódás és a felhasadás  $\mu^2$ -tel arányos.

5. Az eddig levezetett szabályok legtöbbször, amennyiben az izotrop esetre vonatkozik, (21.19)

$$T_{Nj\mu; N'j'\mu'}^{(e)} = s_{j'\mu\varrho}^{(j'\sigma)} \delta_{\mu+\varrho, \mu'} T_{Nj; N'j'} \quad (23.9)$$

speciális esete. Ez az egyenlet a mátrixelemek

$$\begin{aligned} \frac{T_{Nj\mu; N'j'\mu'}^{(e)}}{T_{Nj\nu; N'j'\nu'}^{(e)}} &= \frac{(\Psi_{\mu}^{Nj}, \mathbf{T}^{(e)} \Psi_{\mu'}^{Nj'})}{(\Psi_{\nu}^{Nj}, \mathbf{T}^{(e)} \Psi_{\nu'}^{Nj'})} \\ &= \frac{(\Psi_{\mu}^{Nj}, \mathbf{T}^{(\sigma)} \Psi_{\mu'}^{Nj'})}{(\Psi_{\nu}^{Nj}, \mathbf{T}^{(\sigma)} \Psi_{\nu'}^{Nj'})} \end{aligned} \quad (23.9a)$$

arányának meghatározására nyújt módot, ha a  $\Psi_{\mu}^{Nj}$  és  $\Psi_{\nu}^{Nj}$ , illetőleg a  $\Psi_{\mu'}^{Nj'}$  és  $\Psi_{\nu'}^{Nj'}$  sajátfüggvények ugyanazon  $E_j^{Nj}$  illetőleg  $E_{j'}^{Nj'}$  sajátértékekhez tartoznak, és ha a  $\mathbf{T}^{(e)}$  és  $\mathbf{T}^{(\sigma)}$  operátor ugyanazon *irreducibilis tenzoroperátor* komponensei:

$$\mathbf{O}_R^{(-1)} \mathbf{T}^{(e)} \mathbf{O}_R = \sum_{\sigma} \mathbf{D}^{(n)}(R)_{\sigma\sigma} \mathbf{T}^{(\sigma)}. \quad (23.9b)$$

A  $\mathbf{D}^{(0)}$  ábrázoláshoz tartozó skalárok és a vektorok (melyek  $\mathbf{D}^{(1)}$ -hez tartoznak) is irreducibilis tenzorok. A  $T_{Nj; N'j'}$  számokat (23.9)-ben nem lehet az általános módszerekkel meghatározni, mivel ezek a  $\mathbf{T}$  operátorrendszerből és az alkalmazott  $\mathbf{H}$  operátor speciális alakjától függenek.

Ez idáig egyetlen olyan képlettel találkoztunk, amely nem írható a (23.9) alakba. Ez a (18.8) egyenlet a normális *Zeeman*-felhasadás képlete. Levezetésekor megjegyeztük, hogy a kérdéses vektoroperátor a (18.7) által megadott

$$\mathbf{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \mathbf{P}_{\{\tau, 00\}}, \quad (23.10)$$

amelyet a  $\varphi=0$  pontban kell kiértékelnünk. Egyébként olyan szabályokat, amelyek (23.9)-en túlmennek, csak a közelítésekre tett további feltételek alapján lehet levezetni.

Az ilyen jellegű feltevések között a legfontosabb a spin és a pályaimpulzus-momentum közötti úgynevezett „normális” vagy *Russel—Saunders*-csatolás. Ezt már az előző fejezetben is feltettük; jellemzője az, hogy a finomszerkezeti felhasadás kicsiny a durvaszerkezet szomszédos szintjeinek távolságaihoz képest. Ebben az esetben nem csupán a teljes kvantumszám definiálható, hanem a multipliett rendszer és a pályakvantumszám fogalmai is jelentéssel bírnak. Helyes, ha ezt úgy tesszük nyilvánvalóvá, hogy a hármas *NSL* szimbólumot helyettesítjük az egyező *J* teljes kvantumszámú szintek futó *N* indexe helyébe. *S* itt a multipliett rendszert, *L* a pályakvantumszámot jelöli és *N* szolgál ama szintek megkülönböztetésére, amelyekre *S*, *L* és *J* egyenlő<sup>3</sup>. A fejezet hátralevő része a „normális csatolás” feltevésére alapul. (22.27) szerint a sajátfüggvények alakja a következő:

$$\Psi_m^{NSL} = \sum_{\mu} s_{J\mu, m-\mu}^{(LS)} \Xi_{m-\mu, \mu}^{NSL} \quad (23.11)$$

$\Xi_{-S, \mu}^{NSL}$ ,  $\Xi_{S+1, \mu}^{NSL}$ , ...,  $\Xi_{S, \mu}^{NSL}$   $\mathbf{Q}_R$ -ek vonatkozásában egymás „partnerei” és  $\mathbf{D}^{(S)}$  különböző soraihoz tartoznak; ugyanez igaz a  $\Xi_{\nu, -L}^{NSL}$ ,  $\Xi_{\nu, -L+1}^{NSL}$ , ...,  $\Xi_{\nu, L}^{NSL}$  család esetében is a  $\mathbf{P}_R$ -ekre és a  $\mathbf{D}^{(L)}$  ábrázolásra vonatkozóan. (23.11)-ből a

$$(\Psi_m^{NSLJ}, \mathbf{T}^{(\sigma\varrho)} \Psi_{m'}^{N'S'L'J'}) = T_{NSLJm; N'S'L'J'm'}^{(\sigma\varrho)} \quad (23.12)$$

mátrixelemek aránya különböző *J*, *J'*, *m*, *m'*,  $\sigma$ ,  $\varrho$ , de azonos *NSL* és *N'S'L'* esetén kiszámítható, ha  $\mathbf{T}^{(\sigma\varrho)}$  a  $\mathbf{Q}_R$ -ekre vonatkozóan irreducibilis *q*-adfokú és a  $\mathbf{P}_R$ -ekre vonatkozóan irreducibilis *p*-edfokú tenzor, vagyis

$$\mathbf{Q}_R^{-1} \mathbf{T}^{(\sigma\varrho)} \mathbf{Q}_R = \sum_{\sigma'} \mathbf{D}^{(q)}(R)_{\sigma\sigma'} \mathbf{T}^{(\sigma'\varrho)}, \quad (23.13a)$$

$$\mathbf{P}_R^{-1} \mathbf{T}^{(\sigma\varrho)} \mathbf{P}_R = \sum_{\varrho'} \mathbf{D}^{(p)}(R)_{\varrho\varrho'} \mathbf{T}^{(\sigma\varrho')}. \quad (23.13b)$$

A  $\mathbf{T}$  tenzor az  $\mathbf{O}_R$  szimmetriaoperátorokra vonatkozóan általában nem irreducibilis, hanem két irreducibilis ábrázolás direkt szorzatához tartozik:

$$\begin{aligned} \mathbf{O}_R^{-1} \mathbf{T}^{(\sigma\varrho)} \mathbf{O}_R &= \mathbf{Q}_R^{-1} \mathbf{P}_R^{-1} \mathbf{T}^{(\sigma\varrho)} \mathbf{P}_R \mathbf{Q}_R = \\ &= \sum_{\varrho'} \mathbf{Q}_R \mathbf{D}^{(p)}(R)_{\varrho\varrho'} \mathbf{T}^{(\sigma\varrho')} \mathbf{Q}_R = \sum_{\sigma'\varrho'} \mathbf{D}^{(q)}(R)_{\sigma\sigma'} \mathbf{D}^{(p)}(R)_{\varrho\varrho'} \mathbf{T}^{(\sigma'\varrho')}. \end{aligned}$$

A  $\mathbf{Q}_R$  operációkra nézve a  $\Xi_{\nu\mu}^{NSL}$  mennyiségek  $\nu = -s, \dots, s$  esetén  $\mathbf{D}^{(S)}$  szerint transzformálódnak és egymás partnerei. (23.13a)-ból következik a

$$(\Xi_{\nu\mu}^{NSL}, \mathbf{T}^{(\sigma\varrho)} \Xi_{\nu'\mu'}^{N'S'L'}) = \delta_{\nu+\sigma, \nu'} s_{\nu\sigma}^{(Sq)} t_{SNL\mu; N'S'L'\mu'}^{(\varrho)} \quad (23.14a)$$

<sup>3</sup> Mint a normális csatolás esetén mindig, ismét a *J* szimbólummal jelöljük a teljes kvantumszámot.



egyenlet, amely (23.9) hasonmása. Ugyanígy

$$(\Xi_{\nu\mu}^{NSL}, \mathbf{T}^{(\sigma\varrho)} \Xi_{\nu'\mu'}^{N'S'L'}) = \delta_{\mu+\varrho, \mu'} s_{L'\mu\varrho}^{(LP)} \bar{T}_{NSL\nu; N'S'L'\nu'}^{\sigma} \quad (23.14b)$$

amely (23.13b)-ből következik és abból, hogy a  $\Xi_{\nu\mu}^{NSL}$ -a  $\mathbf{P}_R$  operációkra nézve  $\mathbf{D}^{(L)}$  szerint transzformálódnak ( $\mu = -L, \dots, L$ ).

(23.14a) és (23.14b) együtt tehát azt adják, hogy

$$(\Xi_{\nu\mu}^{NSL}, \mathbf{T}^{(\sigma\varrho)} \Xi_{\nu'\mu'}^{N'S'L'}) = \quad (23.14)$$

$$= \delta_{\nu+\sigma, \nu'} \delta_{\mu+\varrho, \mu'} s_{S'\nu\sigma}^{(Sq)} s_{L'\mu\varrho}^{(LP)} t_{NSL; N'S'L'}^{\sigma}$$

vagy (23.11) miatt.

$$\begin{aligned} (\Psi_m^{NSLJ}, \mathbf{T}^{(\sigma\varrho)} \Psi_{m'}^{N'S'L'J'}) &= \sum_{\mu\mu'} s_{J, \mu, m-\mu}^{(LS)} s_{J', \mu', m'-\mu}^{(L'S')} \delta_{m-\mu+\sigma, m'-\mu'} \times \\ &\times \delta_{\mu+\varrho, \mu'} s_{S', m-\mu, \sigma}^{(Sq)} s_{L', \mu\varrho}^{(LP)} t_{NSL; N'S'L'}^{\sigma} = \sum_{\mu} s_{J, \mu, m-\mu}^{(LS)} \times \\ &\times s_{J', \mu+\varrho, m-\mu+\sigma}^{(L'S')} \delta_{m+\sigma+\varrho, m'} s_{S', m-\mu, \sigma}^{(Sq)} s_{L', \mu\varrho}^{(LP)} t_{NSL; N'S'L'}^{\sigma} \end{aligned} \quad (23.15)$$

E képletek az összes (23.12) mátrixelem olyan arányait adják meg, amelyekben  $NSL$  és  $N'S'L'$  rögzített.

(23.15)-ben csakúgy, mint (23.9)-ben az összes olyan  $s_{J\mu\nu}^{(LS)}$ , amelyben az első index nagyobb, mint a két felső összege, vagy kisebb, mint azok különbségének abszolútértéke ( $J > L+S$  vagy  $J > |L-S|$ ), zérussal teendő egyenlővé. Ugyanez érvényes akkor is, ha  $|\mu| > L$ , ha  $|\nu| > S$  vagy  $|\mu+\nu| > J$ .

6. Az operátorok ama osztálya, melyet (23.13a) és (23.13b) definiál, meglehetősen mesterkéltnek tűnhet. Mindazonáltal csaknem minden fontos operátor ilyen jellegű tenzor egyik komponense, vagy komponenseinek összege. Nevezetesen a spinmentes operátorok valamennyien szimmetrikusak (vagyis skalárok)  $\mathbf{Q}_R$ -re nézve, tehát ezekre (23.13a)  $q=0$  mellett érvényes. Ezért  $\mathbf{P}_R$ -re nézve ugyanúgy transzformálódnak, mint  $\mathbf{O}_R$ -re nézve, így ezek az előbbi operációval szemben is skalárok, vektorok stb., ha valóban is azok (vagyis azok  $\mathbf{O}_R$ -rel szemben is).

Igazoljuk (23.15) fennállását néhány egyszerű esetben. Spinmentes operátorokra és minden olyan operátorra, amelyre  $q=0$ , a (23.15) skalárszorzat láthatóan eltűnik, ha  $S' \neq S$ . Ez annak a korábbi szabálynak felel meg, hogy különböző multiplicitású állapotok mátrixelemei eltűnnek ( $A$  szabály a 208. oldalon). Ha  $P$  is zérus (vagyis az operátor skalár  $\mathbf{P}_R$ -rel és így  $\mathbf{O}_R$ -rel szemben is), akkor az  $L' = L$  egyenlőségnek is fenn kell állnia. Mivel  $\varrho = \sigma = 0$  (a skalárnak csak 0 komponense van), a (23.15) összeg kiszámítható a vektorcsatolási együtthatók alábbi ortogonalitási összefüggéseinek (17.28) felhasználásával:

$$\sum_{\mu} s_{J, \mu, m-\mu}^{(LS)} s_{J', \mu, m-\mu}^{(LS)} = \delta_{JJ'}. \quad (23.16)$$

Vegyük még azt is figyelembe, hogy  $s_{L\mu 0}^{(L0)} = s_{S, m-\mu}^{(S0)}, 0=1!$  Az olyan operátorra, amely mindkét tekintetben skalár ( $p=0, q=0$ ), azt az eredményt kapjuk, hogy a

$$(\Psi_m^{NSLJ}, \mathbf{T}\Psi_{m'}^{N'S'L'J'}) = \delta_{SS'} \delta_{LL'} \delta_{JJ'} \delta_{mm'} \cdot t_{NSL; N'S'L'} \quad (23.17)$$

mátrixelemek (a) eltűnnek, ha  $J' \neq J$ , vagy  $m' \neq m$ ; e mátrixelemek függetlenek  $m$ -től, ha  $J' = J$  és  $m' = m$  (ez éppen az  $\mathbf{O}_R$ -ekkel szemben szimmetrikus operátorokra vonatkozó szabály), továbbá, hogy (b) egy durvaszerkezeti szint valamennyi finomszerkezeti komponensere  $J$ -től függetlenül megegyeznek. Mindehhez nem elegendő, hogy  $\mathbf{T}$  skalár legyen az  $\mathbf{O}_R = \mathbf{P}_R \mathbf{Q}_R$  operációkkal szemben, hanem a  $\mathbf{P}_R$ -rel és  $\mathbf{Q}_R$ -rel szemben külön-külön is skalárnak kell lennie és szükséges, hogy a csatolás normális legyen.

Mindkét vonatkozásban skaláris operátor például az egyszerű *Schrödinger*-elmélet  $\mathbf{H}_0$  Hamilton-operátora. Ebben az esetben

$$(\psi_m^{NSLJ}, \mathbf{H}_0 \psi_{m'}^{N'S'L'J'}) = E^{NSL} \delta_{NN'} \delta_{SS'} \delta_{LL'} \delta_{JJ'} \delta_{mm'},$$

ahol  $E^{NSL}$  valamennyi finomszerkezeti komponensre ugyanaz, hiszen ez az elmélet nem ad finomszerkezeti felhasadást.

## A HÖNL—KRONIG-INTENZITÁSKÉPLETEK

Ha  $\mathbf{T}^{(\sigma)} = \mathbf{V}^{(\sigma)}$  a  $\mathbf{Q}_R$ -rel szemben skalár és  $\mathbf{P}_R$ -rel szemben vektor (mint például az

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k (x_k + iy_k), \sum_k z_k, \frac{-1}{\sqrt{2}} \sum_k (x_k - iy_k)$$

kifejezésekkel történő szorzás operátorai), akkor  $p=1, q=0$ . (23.15) szerint írhatjuk, hogy

$$\mathbf{V}_{NSLJm; N'S'L'J'm'}^{(\rho)} = \quad (23.15)$$

$$= \delta_{SS'} \delta_{m+\rho, m'} \sum_{\mu} s_{J, \mu, m-\mu}^{(LS)} s_{J', \mu, m-\mu}^{(L'S')} s_{L', \mu, \rho}^{(L1)} v_{NSL; N'S'L'}.$$

A (23.15a) mátrixelemek csak akkor nem tűnnek el, ha  $S'=S$  és  $L'=L$  vagy  $L' = L \pm 1$  (és  $J'=J$  vagy  $J'=J \pm 1$ ). Mivel a mátrixelemek arányát különböző  $m, m'$  és  $\rho$  esetén már ismerjük (23.9),

$$\mathbf{V}_{NSLJm; N'S'L'J'm'}^{(\rho)} = s_{J'm\rho}^{(J1)} \delta_{m+\rho, m'} \mathbf{V}_{NSLJ; N'S'L'J'}, \quad (23.18)$$

ezek helyébe határozott értékeket írva kiszámíthatunk és kiszámíthatjuk különböző  $J$  és  $J'$  esetén felvett értékük arányát. Az  $s$ -ek képletei akkor a legegyszerűbbek,

ha  $m=J$ ,  $m'=J'$  és  $\varrho=m'-m=J'-J$ . Ekkor például (17.27b) és a 219. oldal IV. táblázata szerint  $L'=L-1$  és  $J'=J+1$  esetén a következő egyszerűsítő kifejezést kapjuk:

$$\begin{aligned}
 & s_{J,\mu,J-\mu}^{(LS)} s_{L-1,\mu,1}^{(L1)} = \\
 & = \frac{(-1)^{L-\mu} \sqrt{(L+S-J)!(2J+1)!}}{\sqrt{(J+L+S+1)!(J+S-L)!(J-S+L)!}} \times \\
 & \times \sqrt{\frac{(L+\mu)!(S+J-\mu)!}{(L-\mu)!(S-J+\mu)!}} \cdot \frac{\sqrt{(L-\mu-1)(L-\mu)}}{\sqrt{2L(2L+1)}} = \\
 & = \frac{(-1)^{L-1-(\mu+1)} \sqrt{(L-1+S-J-1)!(2J+3)!}}{\sqrt{(J+1+L-1+S+1)!(J+1+S-L+1)!(J+1-S+L-1)}} \times \\
 & \times \sqrt{\frac{(L+\mu)!(S+J-\mu)!}{(L-\mu-2)!(S-J+\mu)!}} \times \\
 & \times \sqrt{\frac{(L+S-J-1)(L+S-J)(J+S-L+1)(J+S-L+2)}{(2J+2)(2J+3)2L(2L+1)}} = \\
 & = s_{J+1,\mu+1,J-\mu}^{(L-1,S)} \times \\
 & \times \sqrt{\frac{(L+S-J-1)(L+S-J)(J+S-L+1)(J+S-L+2)}{(2J+2)(2J+3)2L(2L+1)}}.
 \end{aligned}$$

(23.16) és a fenti egyenlőség segítségével azt kapjuk a (23.15a) összegre, hogy

$$\begin{aligned}
 & V_{NSLJJ; N'SL-1J+1J+1}^{(1)} = \\
 & = \sum_{\mu} s_{J,\mu,J-\mu}^{(LS)} s_{L-1,\mu,1}^{(L1)} s_{J+1,\mu+1,J-\mu}^{(L-1,S)} v_{N'SL; NSL-1} = \\
 & = \sqrt{\frac{(L+S-J-1)(L+S-J)(J+S-L+1)(J+S-L+2)}{(2J+2)(2J+3)2L(2L+1)}} v_{NSL; N'SL-1}.
 \end{aligned}$$

Így (23.18)-ban  $V_{NSLJ; N'S'L'J'-re}$   $s_{J+1,J,1}^{(J1)}=1$  azt adja, hogy

$$\begin{aligned}
 & V_{NSLJ; N'SL-1J+1} = \\
 & = \sqrt{\frac{(L+S-J-1)(L+S-J)(J+S-L+1)(J+S-L+2)}{(2J+2)(2J+3)2L(2L+1)}} v_{NSL; N'SL-1}.
 \end{aligned} \tag{23.19a}$$

Ugyanígy vezethető le a két hasonló képlet is:

$$\begin{aligned}
 & V_{NSLJ; N'SL-1J} = \\
 & = \sqrt{\frac{(L+S-J)(J+S-L+1)(J-S+L)(J+L+S+1)}{2J(2J+2)L(2L+1)}} v_{NSL; N'SL-1},
 \end{aligned} \tag{23.19b}$$

$$\begin{aligned}
 & V_{NSLJ; N'SL-1J-1} = \\
 & = \sqrt{\frac{(J-S+L-1)(J-S+L)(J+S+L)(J+L+S+1)}{2J(2J-1)(2L)(2L+1)}} v_{NSL; N'SL-1}.
 \end{aligned} \tag{23.19c}$$

Ezek az egyenletek a dipólusátmenet operátorainak két multipliett hullámfüggvényével képezett valamennyi mátrixelemét egy és ugyanazon  $v_{NSL; N'SL-1}$  mennyiség segítségével fejezik ki. A két multipliett pályakvantszám  $L$  és  $L'=L-1$ . Hasonló számítás szolgáltatja  $L'=L$  esetén a

$$\begin{aligned}
 & V_{NSLJ; N'SLJ+1} = \\
 & = \sqrt{\frac{(L+S-J)(J-S+L+1)(J+S-L+1)(J+L+S+2)}{(2J+2)(2J+3)(2L)(L+1)}} v_{NSL; N'SL},
 \end{aligned} \tag{23.19d}$$

$$\begin{aligned}
 & V_{NSLJ; NS'LJ-1} = \\
 & = -\sqrt{\frac{(L+S-J+1)(J-S+L)(J+S-L)(J+L+S+1)}{2J(2J-1)(2L)(L+1)}} v_{NSL; N'SL}
 \end{aligned} \tag{23.19e}$$

eredményt.

Ebben az esetben  $s_{L\mu J'-1}^{(L1)}$ -et részben (23.15a) első, részben pedig annak második tényezőjébe olvastottuk bele. Egyedül az  $L'=L$  és  $J'=J$  eset megfelelő képletének levezetése kíván különleges eljárást. Az  $s_{L\mu 0}^{(L1)}$  együtthatót két tagra kell bontani:

$$s_{L\mu 0}^{(L1)} = \frac{\mu}{\sqrt{L(L+1)}} = \frac{L}{\sqrt{L(L+1)}} \frac{\sqrt{L-\mu}\sqrt{L-\mu}}{\sqrt{L(L+1)}}.$$

Az első tagra az összegezés (23.15a)-ban közvetlenül a (23.16) ortogonalitási képletek segítségével elvégezhető; erre a  $\mu$  szerinti összegezés azt adja, hogy

$$v_{NSL; N'SL} L / \sqrt{L(L+1)}.$$

A második tagra az összegeztést a (23.16) ortogonalitási összefüggések és az alábbiak felhasználásával lehet elvégezni:

$$\begin{aligned}
 s_{J,\mu,J-\mu}^{(LS)} \sqrt{L-\mu} &= \frac{(-1)^{L-\mu} \sqrt{(L+S-J)!(2J+1)!}}{\sqrt{(J+S+L+1)!(J+S-L)!(J-S+L)!}} \times \\
 &\times \sqrt{\frac{(L+\mu)!(J+S-\mu)!}{(L-\mu-1)!(S-J-\mu)!}} = \\
 &= -s_{J+\frac{1}{2},\mu-\frac{1}{2},J-\mu}^{(L-\frac{1}{2},S)} \sqrt{\frac{(L+S-J)(J+S-L+1)}{2J+2}}.
 \end{aligned}$$

Így (23.15a)-ra kapjuk, hogy

$$\begin{aligned}
 \sum_{\mu} (s_{J,\mu,J-\mu}^{(LS)})^2 s_{L,\mu 0}^{(L1)} &= \frac{L}{\sqrt{L(L+1)}} \frac{(L+S-J)(J+S-L+1)}{2J+2\sqrt{L(L+1)}} = \\
 &= \frac{J(J+1)+L(L+1)-S(S+1)}{2J(J+1)\sqrt{L(L+1)}},
 \end{aligned}$$

ebből végül, hogy

$$V_{NSLJ; N'SLJ} = \frac{J(J+1)+L(L+1)-S(S+1)}{2\sqrt{J(J+1)}\sqrt{L(L+1)}}. \quad (23.19f)$$

$L'=L+1$  esetén a mátrixelemek arányait ugyanilyen közvetlen számítással kaphatnánk. Vegyük azonban észre, hogy  $\mathbf{V}^{(0)}$  hermitikus volta miatt

$$V_{N'SL-1J'm'}^{(0)}; NSLJm = V_{NSLJm; N'SL-1J'm'}^{(0)*}$$

Így ezek az arányok is kiszámíthatók a (23.19a)—(23.19c) egyenletekből.

A (23.19a)—(23.19f) képletekben valamely vonal finomszerkezeti komponenseinek intenzitásarányaira vonatkozó Hönl—Kronig-féle intenzitásképleteket kaptuk meg. Az  $NSLJ \rightarrow N'S'L'J'$  finomszerkezeti komponens teljes intenzitása úgy kapható, hogy az egyes Zeeman-komponensek  $|V_{NSLJm; N'S'L'J'm'}|^2$  intenzitásait összegezzük valamennyi  $m$ -re,  $m'$ -re és  $\varrho$ -ra:

$$\begin{aligned}
 \sum_{m'm} \sum_{\varrho} |V_{NSLJm; N'S'L'J'm'}^{(\varrho)}|^2 &= \sum_{mm'} |V_{NSLJ; N'S'L'J'} s_{J'm, m'-m}^{(J1)}|^2 = \\
 &= |V_{NSLJ; N'S'L'J'}|^2 \sum_{m'} 1 = (2J'+1) |V_{NSLJ; N'S'L'J'}|^2.
 \end{aligned}$$

A  $J \rightarrow J'$  vonal teljes intenzitását ezért lényegében  $V_{NSLJ; N'S'L'J'}$  határozza meg.

7. A (23.19f) képlet második alkalmazása a Zeeman-jelenséghez kapcsolódik. Ha az atomra mágneses erőter hat, akkor a Hamilton-operátorhoz két tagot kell hozzávenni: Az első  $\mathbf{V} = \eta \mathcal{H} \mathbf{L}_z$ , ahol  $\eta = e/2m_0c$ ;  $m_0$  az elektron tömege. Ez a tag írja le a mágneses tér kölcsönhatását az elektronok mozgásából eredő árammal; ugyanolyan az alakja, mint az egyszerű elméletben: (18.6) és (18.7). Az operátor hatása csak annyi, hogy a hullámfüggvény az impulzuszórántum  $\mathbf{L}_z$  komponensével szorzódik meg:

$$\mathbf{L}_z \psi_{\kappa\mu}^{NSL} = \mu \hbar \psi_{\kappa\mu}^{NSL}. \quad (23.20)$$

Ezért (22.25) szerint

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_z \Xi_{\nu\mu}^{NSL} &= \sum_{\kappa} \mathbf{L}_z \psi_{\kappa\mu}^{NSL} f_{\kappa\nu}^{(S)} = \hbar \sum_{\kappa} \mu \psi_{\kappa\mu}^{NSL} f_{\kappa\nu}^{(S)} = \\ &= \mu \hbar \Xi_{\nu\mu}^{NSL}, \end{aligned}$$

tehát  $v_{NSL; N'S'L'}$  ebben az esetben

$$(\Xi_{\nu\mu}^{NSL}, \mathbf{L}_z \Xi_{\nu\mu}^{NSL}) = \mu \hbar = v_{NSL; NSL} \frac{\mu}{\sqrt{L(L+1)}},$$

ahogy az kitűnik, ha ezt (23.14)-gyel összehasonlítjuk. Így (23.19f) szerint

$$V_{NSLJ; NSLJ} = \hbar \frac{J(J+1) + L(L+1) - S(S+1)}{2\sqrt{J(J+1)}}. \quad (23.20a)$$

Ekkor (23.18)-ból látszik, hogy  $\mathbf{L}_z$  mátrixelemei a következők:

$$(\Psi_m^{NSLJ}, \mathbf{L}_z \Psi_m^{NSLJ}) = m \hbar \frac{J(J+1) + L(L+1) - S(S+1)}{2J(J+1)}. \quad (23.21)$$

A Hamilton-operátorban a mágneses teret tartalmazó második tag,  $\bar{\mathbf{V}}$  a mágneses tér hatását írja le az elektron spinmágneses momentumára. Ez a mágneses momentumnak és térerősségnek a skaláris szorzata ( $\eta = e/2m_0c$ ):

$$2\eta(S_x \mathcal{H}_x + S_y \mathcal{H}_y + S_z \mathcal{H}_z). \quad (23.22)$$

Sok elektron esetében  $\bar{\mathbf{V}}$  ilyen tagok összege. Ha a mágneses tér  $Z$  irányú, akkor  $\bar{\mathbf{V}} = 2\eta \mathcal{H} S_z$ , ahol  $S_z$  a teljes spin  $Z$  komponense. A megfelelő operátor pedig szorzás az

$$\frac{1}{2} \hbar (s_1 + s_2 + \dots + s_n) = S_z \quad (23.22a)$$

kifejezéssel, mivel  $S_z$  is szorzás  $s$ -sel (20.21) szerint. Megmutatjuk, hogy

$$S_z \Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial \alpha} \mathbf{Q}_{\{\alpha 00\}} \Psi|_{\alpha=0}. \quad (23.23a)$$

Ez (18.7) hasonmása:

$$\mathbf{L}_z \Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{P}_{\{\alpha 00\}} \Psi|_{\alpha=0} \quad (23.23b)$$

(23.22a)-ban az  $\frac{1}{2}$  onnan ered, hogy spin nagysága csak  $\hbar/2$ . Mivel

$$D^{(1/2)}(\alpha, 0, 0)_{\frac{1}{2}s, \frac{1}{2}t} = \delta_{st} e^{\frac{1}{2}i s \alpha}$$

a  $\mathbf{Q}_R$ -et definiáló (21.6b) egyenlet a következő alakot ölti:

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_{\{\alpha 00\}} \Psi(\dots, x_k, y_k, z_k, s_k, \dots) &= \\ &= \sum_{t_1 \dots t_n = \pm 1} \dots D^{(1/2)}(\{\alpha, 0, 0\})_{\frac{1}{2}s_k, \frac{1}{2}t_k} \dots \Psi(\dots, x_k, y_k, z_k, t_k, \dots) = \\ &= \sum_{t_1 \dots t_n = \pm 1} \dots \delta_{s_k t_k} e^{\frac{1}{2}i s_k \alpha} \dots \Psi(\dots, x_k, y_k, z_k, t_k, \dots) = \\ &= e^{\frac{1}{2}i(s_1 + s_2 + \dots + s_n)\alpha} \Psi. \end{aligned}$$

Ebből (23.23a) azonnal következik.

Ezért az is érvényes, hogy

$$(\bar{\Xi}_{\nu\mu}^{NSL}, S_z \bar{\Xi}_{\nu\mu}^{NSL}) = v\hbar. \quad (23.22b)$$

$S_z$  skalár  $\mathbf{P}_R$ -rel szemben és vektor  $\mathbf{Q}_R$ -rel szemben, míg  $\mathbf{L}_z$  vektor  $\mathbf{P}_R$ -rel szemben és skalár  $\mathbf{Q}_R$ -rel szemben. Ha a (23.22b) mennyiségekből kiszámítjuk a  $(\Psi_m^{NSLJ}, S_z \Psi_m^{NSLJ})$  értéket, akkor tehát fel kell cserélnünk  $L$  és  $S$  szerepét, így (23.21) helyett kapjuk:

$$(\Psi_m^{NSLJ}, S_z \Psi_m^{NSLJ}) = m\hbar \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}. \quad (23.24)$$

A mágneses tér hatását leíró teljes  $\mathbf{V} + \bar{\mathbf{V}} = \eta\mathcal{H}\mathbf{L}_z + 2\eta\mathcal{H}S_z$  operátor mátrixelemeit úgy számolhatjuk ki, hogy (23.21)-hez (23.24) kétszeresét hozzáadjuk. Az  $m$  mágneses kvantumszámú Zeeman-komponens eltolódása tehát

$$\Delta E_m = \frac{e\hbar\mathcal{H}}{2m_0c} m \cdot \frac{3J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}. \quad (23.25)$$

Ez az ismerős Landé-féle  $g$ -képlet. Azt állítja, hogy az elektronspinhez tartozó anómális (a klasszikusnál kétszer nagyobb) mágneses momentum miatt a különböző szintek különbözőképpen hasadnak fel mágneses térben. A valóságos felhasadást megkapjuk, ha a normális  $\eta\mathcal{H}m$  Zeeman-felhasadást megszorozzuk a

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (23.25a)$$

tényezővel.

A (23.19) képletek és más hasonló összefüggések levezetését lerövidíthetjük, ha észrevesszük, hogy a mátrixelemek kiszámolt arányainak (23.15) szerint függetlennek kell lenniük a kérdéses mechanikai problémától, azok csak a  $\mathbf{T}^{(\sigma)}$  operátorok alakjától és csupán ezek transzformációs tulajdonságaitól függhetnek. Valóban csupán az  $s_{\mu\nu}^{(LS)}$  együtthatók szorzataiból képzett összegek arányát kell kiszámítani. A (17.27)-ben megadott  $s$ -ek azonban csak számok, tehát ezek az arányok az egyforma transzformációs tulajdonságú operátorokra megegyeznek. Ezért bármely (23.13a) és (23.13b) alakú transzformációs tulajdonságú tenzorra kiszámíthatók és átvihetők bármely olyan tenzorra, amelynek ugyanaz a  $p$ -je és a  $q$ -ja.

## AZ INTERVALLUMSZABÁLY

8. Ennek példaként vezessük le a Landé-féle intervallumszabályt, vagyis a

$$(\Psi_m^{NSLJ}, \mathbf{H}_1 \Psi_m^{NSLJ}) = \Delta E^{NSL}$$

szinteltolódások arányát egy durvaszerkezeti szint különböző finomszerkezeti komponenseire. A  $\mathbf{H}_1$  operátor a *Schrödinger*-egyenletnek az elektronok mágneses momentumát tartalmazó járuléka.

A  $\mathbf{H}_1$  operátor két részből áll. Az első az elektronok mágneses momentumának a kölcsönhatását adja meg azzal az árammal, amely az elektronok mozgásából származik. A második leírja a mágneses momentumok kölcsönhatását egymással.

Az első rész, amely majdnem mindig a nagyobbik,  $n$  kifejezés összegéből áll:  $\mathbf{B} = \mathbf{B}_1 + \mathbf{B}_2 + \dots + \mathbf{B}_n$ , ahol  $\mathbf{B}_k$  a  $k$ -adik elektron mágneses momentumának a kölcsönhatási energiája az áramokkal. *Descartes*-koordinátákon kívül  $\mathbf{B}_k$  csak a  $k$ -adik elektron spinkoordinátáira hat<sup>4</sup>, tehát

$$\mathbf{B}_k = s_{kx} \mathbf{V}_{kx} + s_{ky} \mathbf{V}_{ky} + s_{kz} \mathbf{V}_{kz}, \quad (23.26)$$

ahol  $\mathbf{V}_{kx}$ ,  $\mathbf{V}_{ky}$ ,  $\mathbf{V}_{kz}$  spinmetes operátorok. Tekintve, hogy  $\mathbf{B}_k$ -nak skalárnak kell lennie  $\mathbf{O}_R$ -rel szemben és  $s_{kx}$ ,  $s_{ky}$ ,  $s_{kz}$  vektoroperátor komponensei, a  $\mathbf{V}_{kx}$ ,  $\mathbf{V}_{ky}$ ,  $\mathbf{V}_{kz}$  operátoroknak is valamely vektoroperátor komponenseinek kell lenniük.

Ha  $\mathbf{B}$  összes mátrixelemeinek

$$(\Psi_m^{NSLJ}, B \Psi_m^{NSLJ}) : (\Psi_m^{NSLJ'}, B \Psi_m^{NSLJ'})$$

<sup>4</sup> Az olyan operátor, amelyik csak a  $k$ -adik spinkoordinátára hat, a következő alakba írható:  $s_0 + s_{kx} V_{kx} + s_{ky} V_{ky} + s_{kz} V_{kz}$ . Itt  $s_0$ ,  $V_{kx}$ ,  $V_{ky}$ ,  $V_{kz}$  spinmentes operátorok. (23.26)-ban az  $s_0$  nem szerepel. Ha azonban szerepelne, akkor mind  $\mathbf{P}_R$ , mind pedig  $\mathbf{Q}_R$  szempontjából skalárnak kellene lennie. Így a  $p=q=0$  esetnek felelne meg (23.13a)-ban és (23.13b)-ben, s így (23.17) szerint az összes finomszerkezeti komponensben ugyanolyan eltolódást okozna, a felhasadást viszont nem változtatná meg.



arányait kívánjuk kiszámolni, akkor ezek helyett elegendő egyetlen  $\mathbf{B}_k$ -ra ezen arányokat meghatározni, hiszen ezek valamennyi  $k$ -ra egyformák lesznek. Ezen felül  $s_{kz}\mathbf{V}_{kx}$ ,  $s_{ky}\mathbf{V}_{ky}$ ,  $s_{kz}\mathbf{V}_{kz}$  (21.13a)-t és (21.13b)-t kielégítő olyan tenzor  $xx$ ,  $yy$  és  $zz$  komponense, amely mindkét vonatkozásban vektor ( $p=q=1$ ). Ezért a

$$(\Psi_m^{NSLJ}, s_{kx}\mathbf{V}_{kx}\Psi_m^{NSLJ}); (\Psi_m^{NSLJ}, s_{ky}\mathbf{V}_{ky}\Psi_m^{NSLJ}); \quad (23.27)$$

$$(\Psi_m^{NSLJ}, s_{kz}\mathbf{V}_{kz}\Psi_m^{NSLJ})$$

kifejezések közül bármely kettőnek az aránya minden ilyen tenzorra ugyanaz lesz, még akkor is, ha ezeknek és olyan hasonló kifejezéseknek arányát tekintjük, amelyekben  $J$  helyett  $J'$  szerepel.

Ugyanez érvényes (23.27) három kifejezésének összegére is, tehát elég különböző  $J$ -kre a

$$(\Psi_m^{NSLJ}, (\mathbf{T}^{(yy)} + \mathbf{T}^{(zz)})\Psi_m^{NSLJ}) \quad (23.28)$$

mátrixelemek arányait kiszámolni. (Itt  $\mathbf{T}$  tetszőleges olyan operátor, amely mindkét szempontból vektor.) Természetesen eme operátorokat úgy választjuk meg, hogy (23.28) kiszámítása a lehető legegyszerűbbé váljék. Legyen

$$\mathbf{T}^{(xx)} = \mathbf{L}_x\mathbf{S}_x; \quad \mathbf{T}^{(xy)} = \mathbf{L}_x\mathbf{S}_y; \quad \mathbf{T}^{(xz)} = \mathbf{L}_x\mathbf{S}_z; \quad \dots \quad (23.29)$$

Ekkor először is

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \mathbf{O}_{\{\alpha 00\}} = \mathbf{Q}_{\{\alpha 00\}} \frac{\partial}{\partial \alpha} \mathbf{P}_{\{\alpha 00\}} + \mathbf{P}_{\{\alpha 00\}} \frac{\partial}{\partial \alpha} \mathbf{Q}_{\{\alpha 00\}}. \quad (23.20)$$

Így ha  $\alpha=0$ , akkor (23.23a) és (23.23b) szerint

$$\mathbf{L}_z + \mathbf{S}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \alpha} \mathbf{O}_{\{\alpha 00\}}|_{\alpha=0}. \quad (23.30a)$$

Lévéen  $\mathbf{O}_{\{\alpha 00\}}\Psi = \exp(im\alpha)\Psi$ , ebből az következik, hogy

$$(\mathbf{L}_z + \mathbf{S}_z)\Psi_m = m\hbar\Psi_m \quad (23.31)$$

és

$$(\mathbf{L}_z + \mathbf{S}_z)^2\Psi_m = m^2\hbar^2\Psi_m. \quad (23.31a)$$

Így kapjuk, hogy

$$\sum_{m=-J}^J (\Psi_m^{NSLJ}, (\mathbf{L}_z + \mathbf{S}_z)^2\Psi_m^{NSLJ}) = \sum_{m=-J}^J m^2\hbar^2 = \quad (23.32)$$

$$= \frac{\hbar^2 J(J+1)(2J+1)}{3}.$$

E kifejezésben  $z$ -t  $x$ -szel, vagy  $y$ -nal is helyettesíthetnénk, mivel az  $m$ -re elvégzett összegezés után semmilyen tengely nem tüntethető ki. Hogy ezt igazoljuk, legyen  $\mathbf{O}_R$  olyan forgatás, amely  $Z$ -t  $X$ -be viszi át. Így (23.32) átalakítható:

$$\begin{aligned}
 & \sum_m (\mathbf{O}_{R-1} \Psi_m^{NSLJ}, \mathbf{O}_{R-1} (\mathbf{L}_z + \mathbf{S}_z)^2 \mathbf{O}_R \cdot \mathbf{O}_{R-1} \Psi_m^{NSLJ}) = \\
 & = \sum_m \sum_{m'm''} D^{(J)}(R^{-1})_{m'm}^* D^{(J)}(R^{-1})_{m''m} (\Psi_{m'}^{NSLJ}, (\mathbf{L}_x + \mathbf{S}_x)^2 \Psi_{m''}^{NSLJ}) = \\
 & = \sum_{m'm''} \delta_{m'm''} (\Psi_{m'}^{NSLJ}, (\mathbf{L}_x + \mathbf{S}_x)^2 \Psi_{m''}^{NSLJ}) = \\
 & = \sum_m (\Psi_m^{NSLJ}, (\mathbf{L}_x + \mathbf{S}_x)^2 \Psi_m^{NSLJ}).
 \end{aligned}$$

Íly módon

$$\begin{aligned}
 & \sum_m (\Psi_m^{NSLJ}, [(\mathbf{L}_x + \mathbf{S}_x)^2 + (\mathbf{L}_y + \mathbf{S}_y)^2 + (\mathbf{L}_z + \mathbf{S}_z)^2] \Psi_m^{NSLJ}) = \\
 & = \hbar^2 J(J+1)(2J+1).
 \end{aligned} \tag{23.33}$$

Mivel  $(\mathbf{L}_x + \mathbf{S}_x)^2 + (\mathbf{L}_y + \mathbf{S}_y)^2 + (\mathbf{L}_z + \mathbf{S}_z)^2$  skalár, (vagyis  $\mathbf{O}_R$ -rel szemben szimmetrikus operátor), (23.33) bal oldalának  $2J+1$  számú tagja egymással megegyezik, nevezetesen

$$\begin{aligned}
 & (\Psi_m^{NSLJ}, [(\mathbf{L}_x + \mathbf{S}_x)^2 + (\mathbf{L}_y + \mathbf{S}_y)^2 + (\mathbf{L}_z + \mathbf{S}_z)^2] \Psi_m^{NSLJ}) = \\
 & = \hbar^2 J(J+1).
 \end{aligned} \tag{23.33a}$$

A pályaimpulzus-momentum esetében ugyanígy

$$\mathbf{L}_z \mathcal{E}_{\nu\mu}^{NSL} = \mu \hbar \mathcal{E}_{\nu\mu}^{NSL} \tag{23.34}$$

alapján arra következtethetünk, hogy

$$(\mathcal{E}_{\nu\mu}^{NSL}, (\mathbf{L}_x^2 + \mathbf{L}_y^2 + \mathbf{L}_z^2) \mathcal{E}_{\nu\mu}^{NSL}) = \hbar^2 L(L+1). \tag{23.35}$$

Így a (17.28) ortogonalitási összefüggésből és (23.11)-ből következik, hogy

$$(\Psi_m^{NSLJ}, (\mathbf{L}_x^2 + \mathbf{L}_y^2 + \mathbf{L}_z^2) \Psi_m^{NSLJ}) = \hbar^2 L(L+1), \tag{23.35a}$$

mivel  $\mathbf{L}_x^2 + \mathbf{L}_y^2 + \mathbf{L}_z^2$  mindkét szempontból skalár. Hasonlóképpen a spin esetében

$$\begin{aligned}
 & \mathbf{S}_z \mathcal{E}_{\nu\mu}^{NSL} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \alpha} \mathbf{Q}_{\{\alpha 00\}} \mathcal{E}_{\nu\mu}^{NSL} = \nu \hbar \mathcal{E}_{\nu\mu}^{NSL} \\
 & (\alpha=0),
 \end{aligned} \tag{23.36}$$

amelyből következik, hogy

$$(\Psi_m^{NSLJ}, (\mathbf{S}_x^2 + \mathbf{S}_y^2 + \mathbf{S}_z^2) \Psi_m^{NSLJ}) = \hbar^2 S(S+1). \quad (23.36a)$$

(23.35a)-t és (23.36a)-t (23.33a)-ból levonva kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} (\Psi_m^{NSLJ}, (\mathbf{L}_x \mathbf{S}_x + \mathbf{L}_y \mathbf{S}_y + \mathbf{L}_z \mathbf{S}_z) \Psi_m^{NSLJ}) = \\ = \frac{1}{2} \hbar^2 [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)]. \end{aligned} \quad (23.37)$$

Az előző megfontolások szerint tehát egy durvaszerkezeti szint finomszerkezeti komponenseinek eltolódásai egymással (23.37) szerint arányosak:

$$\Delta E_J^{NSL} = \varepsilon_{NSL} [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)]. \quad (23.37a)$$

Két egymás utáni finomszerkezeti komponens eltolódásának különbsége:

$$\Delta E_{J+1}^{NSL} - \Delta E_J^{NSL} = 2\varepsilon_{NSL}(J+1), \quad (23.37b)$$

amely tehát arányos a nagyobbik teljes kvantumszámával. Ez a *Landé*-féle intervallumszabály.

A *Landé*-féle intervallumszabály csak normális csatolás esetén érvényes, vagyis amikor a finomszerkezeti felhasadás kicsiny a durvaszerkezeti szintek távolságaihoz képest. Mi több, azt a feltevést is tartalmazza, hogy a kölcsönhatás a spinmágneses momentumok között elhanyagolható. Ez a feltevés, ahogy azt HEISENBERG<sup>5</sup> kimutatta, csődöt mond a nagyon könnyű elemekre, különösen a héliumra. Az intervallumszabály a közepes elemekre érvényes a legtökéletesebben.

A spinmágneses momentumok kölcsönhatása két részből áll. Az első mindkét szempontból skalár, így a finomszerkezetet egyáltalán nem befolyásolja. A második mindkét vonatkozásban  $\mathbf{D}^{(2)}$ -höz tartozik. Egészében egy (23.37a) alakú tag mellett még egy  $[J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)]^2$ -nel arányos szinteltolódást és egy  $J$ -től független tagot is kapunk.<sup>6</sup> E tagokban az arányossági tényezők és  $\varepsilon_{NSL}$  hányadosát nem lehet általános gondolatmenet alapján meghatározni, tehát az intervallumképlet két *határozatlan* állandót tartalmaz akkor, ha a spin—spin kölcsönhatást is figyelembe vesszük.

<sup>5</sup> W. HEISENBERG, Z. Physik. **39**, 499 (1926).

<sup>6</sup> A bizonyítást az olvasóra hagyjuk. Lásd még G; ARAKI, Progr. Theoret. Phys. (Kyoto), **3**, 152 (1948).

## 24. A RACAII-EGYÜTTHATÓK

A Hönl—Kronig-intenzitásképleteknek és a Landé-intervallumszabálynak az előző fejezetben megadott levezetése csupán kiragadott példa olyan irreducibilis tenzoroperátor mátrixelemeinek a kiszámítására, amelynek a transzformációs tulajdonságai nemcsak az összes, hanem külön a hely- és külön a spinkoordináták elforgatásakor is határozottak. (23.13a)-ban és (23.13)-ban határoztuk meg az ilyen  $\mathbf{T}^{(\sigma\varrho)}$  operátorokat<sup>1</sup>. Ezekből lineáris kombinációval kaphatók olyan operátorok, amelyek irreducibilisek a spin- és a helykoordináták egyidejű elforgatásakor:

$$\mathbf{T}_\omega^{(\tau)} = \sum_q s_{\omega\tau-q}^{(qp)} \mathbf{T}_{qp}^{(\varrho, \tau-q)} \quad (24.1)$$

Könnyű bebizonyítani (23.13a), (23.13b), (17.16b) és az  $s$ -ekre felírt (17.28) ortogonalitási összefüggések segítségével, hogy

$$\mathbf{O}_R^{-1} \mathbf{T}_\omega^{(\tau)} \mathbf{O}_R = \mathbf{D}^{(\omega)}(R)_{\tau\tau'} \mathbf{T}_\omega^{(\tau')}. \quad (24.1a)$$

Tulajdonképpen ilyen operátort vizsgáltunk akkor is, amikor a Landé-intervallumszabályt levezettük. A spin—pályakölcsönhatás operátora skalár ( $\omega=0$ ), és olyan operátorokból van megalkotva, amelyek mind a spin-, mind pedig a helykoordináták elforgatásakor vektorként viselkedik ( $q=1, p=1$ ).

Hasonlóképpen valamennyi koordináta elforgatásakor a mátrixelemekben szereplő  $\Psi_m^{NSLJ}$  és  $\Psi_{m'}^{N'S'L'J'}$  hullámfüggvényeknek is határozott transzformációs jellegük van (ezt a  $J$  kvantumszám jellemzi). E hullámfüggvényeknek külön a spin- és külön a helykoordináták elforgatásakor is határozottak a transzformációs tulajdonságaik. A két megfelelő kvantumszám  $S$  és  $L$ . Ennek eredményeként a

$$(\Psi_{m'}^{N'S'L'J'}, \mathbf{T}_\omega^{(\tau)} \Psi_m^{NSLJ}) \quad (24.E.1)$$

<sup>1</sup> Az olvasó bizonyára emlékszik rá, hogy  $\mathbf{T}^{(\sigma\varrho)}$  olyan tenzor  $\delta, \varrho$  komponense, amely a  $\mathbf{Q}_R$  spinforgatások szempontjából  $q$ -ad, a helykoordináták  $\mathbf{P}_R$  forgatásaival szemben  $p$ -ed fokú tenzorként viselkedik. A  $\mathbf{T}_\omega^{(\tau)}$  operátor (24.1)-ben olyan tenzor  $\tau$  komponense, amely a spin- és helykoordináták együttes  $\mathbf{O}_R = \mathbf{Q}_R \mathbf{P}_R$  forgatásaikor  $\omega$ -ad fokú tenzorként transzformálódik.

alakú mátrixelemek kifejezhetők az összes megengedett  $J, J', \omega, m, m', \tau$  értékekkel és egyetlen állandóval. A megengedett értékek egyszerűen azok, amelyeknél  $\Psi$  és  $\mathbf{T}$  létezik. Az  $|S-L| \leq J \leq S+L$  vektorösszeadási szabály nem egyéb, mint  $J$  behatárolása; ugyanez  $m$ -re a  $-J \leq m \leq J$  szabály és így tovább. A számolás végrehajtásakor az volt a nehézség, hogy a hullámfüggvényeknek és az operátoroknak az összes koordinátaegyüttes elforgatására jellemző  $J, J', \omega$  mennyiségeit használva kapott kifejezés nem illeszkedett természetes módon ahhoz a kifejezéshez, amelyet külön a spin- és külön a helykoordináták elforgatására vonatkozó transzformációs tulajdonságok felhasználásával kaptunk. Az előző kifejezésre példa (23.18), az utóbbira pedig (23.15a). (23.18)-at követő számolás átviszi (23.15a)-t a (23.18)-alakba. Eme átalakítás lehetősége azt mutatja, hogy a vektorcsatolási együtthatók között eddig felszínre nem hozott további fontos összefüggések is léteznek. E fejezetet annak szenteljük, hogy részletesebben tanulmányozzuk a  $\mathbf{D}^{(J)}$  ábrázolások tulajdonságait (különösen ezek valóssági feltételeit), a vektorcsatolási együtthatók szimmetriáit (amelyekről (17.27) után már esett szó,) és végül az olyan általános összefüggéseket, amelyekkel felfegyverkezve például (23.15a)-t (23.18)-ba alakíthatjuk.

CONDON és SHORTLEY könyvükben<sup>2</sup> világosan tanúsítják az olyan explicit és általános képletek fontosságát, amelyekkel a (24.E.1) alakú mátrixelemek különböző  $J, J', \omega, m, m',$  és  $\tau$  értékekre érvényes értékeit össze lehet hasonlítani. Ilyen összehasonlításra szolgáló explicit és általános képleteket először RACAHA<sup>3</sup> adott meg. Az utóbbi időben a tárgyat még számos, e fejezetnél sokkal részletesebb monográfia tárgyalta.<sup>4</sup>

## A KOMPLEX KONJUGÁLT ÁBRÁZOLÁSOK

Az irreducibilis ábrázolások valóssági feltételei a most következő elemzésben fontos szerepet játszanak. Eredményeinket, amelyeket majd a 26. fejezetben használunk fel, az ábrázolások elméletének két megalapozója vezette le először.<sup>5</sup>

Az előző fejezetekben néhány módszert adtunk új ábrázolásoknak adott ábrázolásból vagy ábrázoláspárból történő származtatására. Ezekhez egy új és elég

<sup>2</sup> E. U. CONDON, G. H. SHORTLEY: The Theory of Atomic Spectra. (Cambridge University Press, 1935).

<sup>3</sup> G. RACAHA, Phys. Rev. **62**, 438 (1942); **63**, 367 (1943); U. FANO, G. RACAHA: Irreducible Tensorial Sets. (Academic Press, New York, 1959).

<sup>4</sup> M. E. ROSE: Angular Momentum. (John Wiley and Sons, New York, 1957); A. R. EDMONDS Angular Momentum in Quantum Mechanics. (Princeton University Press, 1957). Az utóbbi monográfia  $(L_\mu, S_\nu | LSJ_{\mu+\nu})$ -vel jelöli az  $S_{J\mu\nu}^{(LS)}$  mennyiséget.

<sup>5</sup> G. FROBENIUS, I. SCHUR, Berl. Ber. 1906. 186 o.

nyilvánvaló járul most: az áttérés a komplex konjugáltra. Ha  $\mathbf{D}(R)$  valamely csoport ábrázolása, akkor ugyanez vonatkozik  $(\mathbf{D}(R))^*$ -ra is; e mátrixok elemei  $\mathbf{D}(R)$  elemeinek komplex konjugáltjai. Világos, hogy  $\mathbf{D}(R)^*\mathbf{D}(S)^*=\mathbf{D}(RS)^*$  következik  $\mathbf{D}(R)\mathbf{D}(S)=\mathbf{D}(RS)$ -ből. Ha továbbá  $\mathbf{D}(R)$  irreducibilis, akkor ugyanez érvényes a komplex konjugált  $\mathbf{D}(R)^*$  ábrázolásra is. Ha az  $S$  transzformáció az összes  $\mathbf{D}(R)$ -et a 94. oldalon található redukált alakba viszi át, akkor  $\mathbf{S}^*\mathbf{D}(R)^*$ -ot hasonló alakba fogja átvinni.

A komplex konjugálással lényeges megkülönböztetés tehető az irreducibilis ábrázolások között: a  $\mathbf{D}(R)^*$  vagy ekvivalens  $\mathbf{D}(R)$ -rel, vagy nem.  $\mathbf{D}(R)^*$  karaktere  $\mathbf{D}(R)$   $\chi(R)$  karakterének komplex konjugáltja. Két ábrázolás akkor ekvivalens, ha karaktereik azonosak. Ezeket tudva  $\mathbf{D}(R)$  akkor ekvivalens a komplex konjugált  $\mathbf{D}(R)^*$ -gal, ha karaktere valós, vagyis ha az összes  $\chi(R)$  szám valós. Máskülönben  $\mathbf{D}(R)$  és  $\mathbf{D}(R)^*$  nem ekvivalensek.

A (15.26) és a (15.28) képlet azt mutatja, hogy a háromdimenziós forgáscsoport és a két-dimenziós unitér unimoduláris csoport összes irreducibilis ábrázolásának karakterei valósak. Ugyanez érvényes minden olyan csoportra, amelynek bármely eleme ugyanabba az osztályba tartozik, mint az inverze. Ezt legegyszerűbben unitér alakú ábrázolást vizsgálva láthatjuk be. Ekkor

$$\mathbf{D}(R^{-1})=\mathbf{D}(R)^\dagger \quad (24.2)$$

következménye, hogy  $R$  és  $R^{-1}$  karakterei egymás komplex konjugáltjai. Ha  $R$  és  $R^{-1}$  ugyanabba az osztályba tartoznak, akkor  $P$  és  $R^{-1}$  karakterei egyenlőek egymással, tehát valósak is. Ez a helyzet a háromdimenziós forgáscsoport, a kétdimenziós unitér csoport és minden kétdimenziós, valós, ortogonális mátrix esetében. Nem igaz azonban a kétdimenziós valódi forgáscsoportra, amelynek valóban vannak olyan ábrázolásai, amelyekben komplexek és olyanok, amelyekben valósak a karakterek (14. fejezet).

Ha  $\mathbf{D}(R)$  unitér és karaktere valós, akkor van olyan  $\mathbf{C}$  unitér mátrix, amely  $\mathbf{D}(R)^*$ -ot  $\mathbf{D}(R)$ -be transzformálja át. Így

$$\mathbf{C}\mathbf{D}(R)=\mathbf{D}(R)^*\mathbf{C}. \quad (24.3)$$

Ha  $\mathbf{D}(R)$  irreducibilis, akkor (24.3)-ban  $\mathbf{C}$  egy állandó tényezőtől eltekintve egyértelműen meg van határozva. *Mi több,  $\mathbf{C}$  vagy szimmetrikus, vagy antiszimmetrikus.* Eme állítást bizonyítandó, (24.3) komplex konjugáltját szorozzuk meg  $\mathbf{C}$ -vel balról:

$$\mathbf{C}\mathbf{C}^*\mathbf{D}(R)^*=\mathbf{C}\mathbf{D}(R)\mathbf{C}^*=\mathbf{D}(R)^*\mathbf{C}\mathbf{C}^*. \quad (24.3a)$$

Az utolsó lépésben ismét felhasználtuk (24.3)-at. Ha  $\mathbf{D}(R)^*$  irreducibilis, akkor a vele felcserélhető  $\mathbf{C}\mathbf{C}^*$  mátrixnak az egységmátrix többszörösének kell lennie  $\mathbf{C}\mathbf{C}^*=c\mathbf{1}$ . Mivel  $\mathbf{C}$  még unitér is,  $\mathbf{C}'\mathbf{C}^*=\mathbf{1}$ . Ebből következik, hogy  $\mathbf{C}=c\mathbf{C}'$ . Ezt az egyenletet transzformálva  $\mathbf{C}'=c\mathbf{C}$ , tehát  $\mathbf{C}=c^2\mathbf{C}$ , vagyis  $c=\pm 1$ . Eszerint

$$\mathbf{C}=\pm\mathbf{C}'. \quad (24.3b)$$

Arról is könnyen meggyőződhetünk, hogy ha  $\mathbf{C}$  valamely  $\mathbf{D}(R)$  ábrázolásra szimmetrikus, akkor az ezzel ekvivalens összes  $\mathbf{S}^{-1}\mathbf{D}(R)\mathbf{S}$  ábrázolásra is az. Hasonló állítás érvényes akkor is, ha  $\mathbf{C}$  antiszimmetrikus, tehát a (24.3b) nyújtotta két lehetőség a valós karakterű irreducibilis ábrázolások osztályozását teszi lehetővé aszerint, hogy  $\mathbf{C}=\mathbf{C}'$  vagy pedig  $\mathbf{C}=-\mathbf{C}$ .

Az eddigi eredmények a következőképpen foglalhatók össze. *Ha  $\mathbf{D}(R)$  unitér irreducibilis ábrázolás, akkor  $\mathbf{D}(R)^*$ -ra ugyanez igaz. A  $\mathbf{D}(R)$  és  $\mathbf{D}(R)^*$  ábrázolások inekvivalensek, ha  $\chi(R)$  valamilyen  $R$ -re komplex. Az ilyen irreducibilis ábrázolást komplexnek nevezzük. Ha  $\chi(R)$  valós, akkor  $\mathbf{D}(R)$  ekvivalens  $\mathbf{D}(R)^*$ -gal. A  $\mathbf{C}$  unitér mátrix, amely ezeket egymásba transzformálja vagy szimmetrikus, vagy antiszimmetrikus. Az első esetben azt mondjuk, hogy az ábrázolás potenciálisan valós, a másodikban pedig, hogy pszeudoreális.*

Eme elnevezések oka az, hogy ha (24.3)-ban  $\mathbf{C}$  szimmetrikus, akkor  $\mathbf{D}(R)$  tulajdonképpen valóssá tehető. Ez a következő lemma folyománya<sup>6</sup>; *Ha  $\mathbf{C}$  mind szimmetrikus, mind pedig unitér, akkor feltehető, hogy sajátvektorai valósak.* Ugyanis  $\mathbf{C}^{-1}=\mathbf{C}^\dagger=\mathbf{C}^*$ , így a

$$\mathbf{C}\mathbf{v}=\omega\mathbf{v} \quad (24.4)$$

egyenletet balról szorozva  $\mathbf{C}^{-1}$ -gyel kapjuk, hogy  $\mathbf{v}=\omega\mathbf{C}^*\mathbf{v}$ . Mivel azonban unitér mátrix karakterisztikus értékének abszolútértéke 1, azért eme egyenlet komplex konjugáltja

$$\mathbf{C}\mathbf{v}^*=\omega\mathbf{v}^*. \quad (24.4a)$$

Ha  $\mathbf{v}$  és  $\mathbf{v}^*$  különbözőek, akkor helyettesíthetők akár a valós, akár a képzetes részükkel. Ha  $\mathbf{v}$  és  $\mathbf{v}^*$  egymástól csupán állandó tényezőben különböznek, akkor a valós, vagy pedig a képzetes részükkel helyettesíthetők. Ebből azonban következik, hogy a  $\mathbf{c}$  szimmetrikus, unitér mátrix a

$$\mathbf{C}=\mathbf{r}^{-1}\omega\mathbf{r} \quad (24.4b)$$

alakba írható, ahol  $\mathbf{r}$  valós ortogonális mátrix;  $\mathbf{r}'\mathbf{r}=\mathbf{1}$  és  $\omega$  diagonális mátrix.  $\omega$ -t egy másik  $\omega_1$  diagonális mátrix négyzeteként írjuk fel;  $\omega_1$  diagonális elemeinek abszolútértéke 1 és  $\omega_1^{-1}=\omega_1^*$ . Így (24.3) átírható:

$$\mathbf{r}^{-1}\omega_1^2\mathbf{r}\mathbf{D}(R)=\mathbf{D}(R)^*\mathbf{r}^{-1}\omega_1^2\mathbf{r}.$$

Ezt balról  $\omega_1^{-1}\mathbf{r}=\omega_1^*\mathbf{r}$ -rel és jobbról  $\mathbf{r}^{-1}\omega_1^{-1}=\mathbf{r}^{-1}\omega_1^*$ -gal szorozva kapjuk, hogy

$$\omega_1\mathbf{r}\mathbf{D}(R)\mathbf{r}^{-1}\omega_1^*=\omega_1^*\mathbf{r}\mathbf{D}(R)^*\mathbf{r}^{-1}\omega_1. \quad (24.4c)$$

<sup>6</sup> Ez a lemma az ütközési mátrix elméletében játszik fontos szerepet.

A bal és jobb oldalak egymás komplex konjugáltjai, tehát mindketten valósak. Ebből következik, hogy ha  $\mathbf{D}(R)$ -et  $\mathbf{r}^{-1}\boldsymbol{\omega}^*=(\boldsymbol{\omega}_1 r)^{-1}$ -gyel transzformáljuk, akkor az valóssá válik. Fordítva, ha  $\mathbf{D}(R)$  valós ábrázolásba transzformálható, akkor  $\mathbf{C}$ -nek szimmetrikusnak kell lennie.  $\mathbf{C}$  nyilvánvalóan szimmetrikus (tudniillik a konstans mátrix), ha  $\mathbf{D}(R)$  valós, következésképpen az ábrázolás minden alakjában is az. Az is következik, hogy ha  $\mathbf{C}$  (24.3)-ban antiszimmetrikus, akkor  $\mathbf{D}(R)$  hasonlósági transzformációval nem tehető valóssá.

Végül határozzuk meg azt a  $\mathbf{C}^{(j)}$  mátrixot, amely a háromdimenziós forgáscsoport  $\mathbf{D}^{(j)}$  ábrázolását a  $\mathbf{D}^{(j)*}$  komplex konjugált ábrázolásba transzformálja. A  $\mathbf{C}^{(j)}$  mátrixok a kvantumtérelméletben is fontos szerepet játszanak. (24.3) minden forgatásra érvényes, alkalmazzuk tehát először  $Z$  körül végzett  $\alpha$  szögű forgatásra. Ebben az esetben  $\mathbf{D}^{(j)}$  átlós mátrix, így (24.3) bal és jobb oldalának  $nm$  elemére

$$\mathbf{C}_{nm}^{(j)} e^{im\alpha} = e^{-im\alpha} \mathbf{C}_{nm}^{(j)}. \quad (24.5)$$

Ennek minden  $\alpha$ -ra igaznak kell lennie, tehát a  $\mathbf{C}_{nm}^{(j)}$  mátrixelem eltűnik, hacsak  $n+m=0$  nem teljesül:

$$\mathbf{C}_{nm}^{(j)} = c_m^{(j)} \delta_{n,-m}. \quad (24.5)$$

Ezután alkalmazzuk (24.3)-at tetszőleges csoportelemre, de csupán (24.3)  $-j, \mu$  elemét írjuk fel. A megfelelő  $\mathbf{D}^{(j)}$ -k különösen egyszerűek.

$$c_j^{(j)} \mathbf{D}^{(j)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{j\mu} = \mathbf{D}^{(j)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{-j-\mu}^* c_\mu^{(j)}, \quad (24.5b)$$

azaz (15.27a) és (15.27b) miatt

$$\begin{aligned} c_s^{(j)} \sqrt{\binom{2j}{j-\mu}} e^{ij\alpha} \cos^{j+\mu} \frac{1}{2} \beta \sin^{j-\mu} \frac{1}{2} \beta e^{i\mu\gamma} = \\ = (-1)^{j-\mu} \sqrt{\binom{2j}{j+\mu}} e^{ij\alpha} \cos^{j+\mu} \frac{1}{2} \beta \sin^{j-\mu} \frac{1}{2} \beta e^{i\mu\gamma} c_\mu^{(j)}, \end{aligned}$$

ahonnan

$$c_\mu^{(j)} = c_j^{(j)} (-1)^{j-\mu}, \quad (24.5c)$$

mivel  $j-\mu$  mindig egész.<sup>7</sup> (24.3)  $\mathbf{C}$ -t csak egy szorzó erejéig határozza meg, tehát  $c_j^{(j)}=1$  választható, így (24.5a)-ból

$$\mathbf{C}_{nm}^{(j)} = (-1)^{j-m} \delta_{n,-m} = (-1)^{j+n} \delta_{n,-m}. \quad (24.6)$$

<sup>7</sup>  $(-1)$ -nek kitevője e könyvben egész szám.



A mellékátló elemein kívül  $\mathbf{C}^{(j)}$  minden eleme zérus. Ezek értéke felváltva  $+1$  vagy  $-1$ , és a jobb felső sarokban  $+1$  áll. A bal alsó sarokelem  $+1$ , ha  $j$  egész és  $-1$ , ha  $j$  félegész.

$$\mathbf{C}^{(j)} = \begin{pmatrix} 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 0 \\ 0 & \dots & 1 & 0 & 0 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}. \quad (24.6a)$$

Ily módon  $\mathbf{C}$  egész  $j$ -re szimmetrikus, félegészre pedig antiszimmetrikus. Az előbbi ábrázolások potenciálisan valósak, az utóbbiak pszeudoreálisak. Megjegyezzük még, hogy két potenciálisan valós, vagy pszeudoreális ábrázolás direkt szorzata csak potenciálisan valós, irreducibilis komponenseket tartalmaz. Potenciálisan valós és pszeudoreális ábrázolás direkt szorzatában minden irreducibilis rész pszeudoreális.<sup>8</sup> Az, hogy egész  $j$  mellett  $\mathbf{D}^{(j)}$  valós alakba transzformálható, már onnan is kitűnik, hogy (15.5)-ben a gömbharmonikusok  $Y_m^l + Y_{-m}^l$  és  $i(Y_m^l - Y_{-m}^l)$  valós lineáris kombinációit is alkalmazhatjuk, így  $\mathbf{D}^{(l)}$  megfelelő alakja valóssá válik.  $\mathbf{C}$  most meghatározott alakját behelyettesítve (24.3) így fest:

$$\mathbf{D}^{(j)}(R)_{m'm}^* = (-1)^{m-m'} \mathbf{D}^{(j)}(R)_{-m'-m} \quad (24.7)$$

ami szintén közvetlenül is bebizonyítható. Természetesen  $\mathbf{C}^{(j)}$  alakja függ attól, hogy  $\mathbf{D}^{(j)}$ -t milyen alakúnak tételezzük fel, szimmetrikus, vagy aszimmetrikus volta azonban nem.

## A VEKTORCSATOLÁSI EGYÜTTHATÓK SZIMMETRIKUS ALAKJA

(17.16)-ban a vektorcsatolási együtthatókat eredetileg úgy definiáltuk, mint olyan  $\mathbf{S}$  mátrix elemeit, amely két ábrázolás direkt szorzatát a (17.15) redukált alakba transzformálja. (17.18)-ban azt is felismertük — s ez legfontosabb szerepük —, hogy eme együtthatók segítségével  $\mathbf{D}^{(l)}$  sorához és  $\mathbf{D}^{(l)}$   $\nu$  sorához tartozó  $\psi_\mu$ , illetőleg  $\psi_\nu$  függvények szorzataiból az irreducibilis  $\mathbf{D}^{(L)}$  ábrázolás  $m$  sorához

<sup>8</sup> Ezen összefüggések további vizsgálatával és az irreducibilis ábrázolások más jellemvonásaival kapcsolatban lásd E. P. WIGNER, Am. Jour. Math., 63, 57 (1941), G. W. MACKAY ugyanott 73, 576 (1951).

tartozó függvényeket képezhetünk. Ugyanezt a feladatot teljesítik (22.27)-ben is, ahol a  $J, m$  kvantumszámokhoz tartozó hullámfüggvényt a

$$\Psi_m^J = \sum_{\mu} s_{J\mu m - \mu}^{(SL)} \Xi_{m - \mu, \mu}^{SL} \quad (24.8)$$

alakban kapjuk meg a  $\Xi$  hullámfüggvényekből, amelyek a  $\mathbf{Q}_R$ -ek és a  $\mathbf{P}_R$ -ek szempontjából  $\mathbf{D}^{(S)}$ , illetőleg  $\mathbf{D}^{(L)}$  szerint transzformálódnak és eme ábrázolások  $m - \mu$ , illetőleg  $\mu$  sorához tartoznak. Ezekben a  $\mathbf{D}^{(L)}$ ,  $\mathbf{D}^{(l)}\mathbf{D}^{(\bar{l})}$  vagy pedig a  $\mathbf{D}^{(J)}$ ,  $\mathbf{D}^{(S)}$ ,  $\mathbf{D}^{(L)}$  ábrázolások nem jelennek meg szimmetrikus módon; még a (17.22) képlet, vagyis

$$\int \mathbf{D}^{(l)}(R)_{\mu' \mu} \mathbf{D}^{(\bar{l})}(R)_{\nu' \nu} \mathbf{D}^{(L)}(R)_{\mu' + \nu'; \mu + \nu}^* dR = \quad (24.8a)$$

$$= \frac{h s_{L\mu' \nu'}^{(\bar{l})} s_{L\mu \nu}^{(\bar{l})}}{2L + 1}$$

közelíti ezt meg leginkább, itt  $h = \int dR$  a csoporttérfogat. Ez lesz kiindulópontunk. (24.8a)-nak valamivel szimmetrikusabb alakja a következő:

$$\int \mathbf{D}^{(l)}(R)_{\mu' \mu} \mathbf{D}^{(\bar{l})}(R)_{\nu' \nu} \mathbf{D}^{(L)}(R)_{m' m}^* dR = \quad (24.8b)$$

$$= \frac{h s_{Lm'; \mu' \nu'} s_{Lm; \mu \nu}}{2L + 1},$$

ahol  $\mathbf{S}$  a  $\mathbf{D}^{(l)} \times \mathbf{D}^{(\bar{l})}$ -t a redukált alakba transzformáló eredeti mátrix. (17.20a) és (17.20b) szerint

$$S_{Lm; \mu \nu} = \delta_{m, \mu + \nu} s_{L\mu \nu}^{(\bar{l})}. \quad (24.8c)$$

A (24.8b) integrál és az  $S$  együtthatók eltűnnek, hacsak  $m' = \mu' + \nu'$  és  $m = \mu + \nu$  nem teljesül. Tekintve, hogy  $\mathbf{C}^\dagger \mathbf{D}^* \mathbf{C} = \mathbf{C}' \mathbf{D}^* \mathbf{C} = \mathbf{D}$ , ezért ha (24.8b)-t  $C_{m' \lambda'} C_{m \lambda}$ -val megszorozzuk és  $m'$ -re, valamint  $m$ -re összegezzük, akkor a bal oldal  $l, \bar{l}, L$ -ben szimmetrikus lesz.  $\mathbf{C}$  értékét (24.6)-ból helyettesítjük a jobb oldalon:

$$\int \mathbf{D}^{(l)}(R)_{\mu' \mu} \mathbf{D}^{(\bar{l})}(R)_{\nu' \nu} \mathbf{D}^{(L)}(R)_{\lambda' \lambda} dR = \quad (24.8d)$$

$$= \frac{h (-1)^{L - \lambda'} s_{L, -\lambda'; \mu \nu} (-1)^{L - \lambda} s_{L, -\lambda; \mu \nu}}{2L + 1}.$$

Ily módon, ha

$$\frac{(-1)^{L - \lambda} s_{L, -\lambda; \mu \nu}}{\sqrt{2L + 1}} \sim \begin{pmatrix} l & l & L \\ \mu & \nu & \lambda \end{pmatrix},$$

$l, l$  és  $L$  szimmetrikusan jelenik meg. Később tisztázandó okból legyen

$$\begin{pmatrix} l & l & L \\ \mu & \nu & \lambda \end{pmatrix} = (-1)^{l-\bar{l}-L} \frac{(-1)^{L-\lambda} S_{L, -\lambda; \mu, \nu}}{\sqrt{2L+1}}. \quad (24.9)$$

A  $(-1)^{l-\bar{l}-L}$  tényező eltűnik, ha ezt (24.8b)-be helyettesítjük, mert mindkét  $S$  mátrixegyütthatóban szerepel és mert  $l-l-L$  szükségképpen egész;  $L$  egész vagy félegész attól függően, hogy  $l+l$  vagyis  $l+l-2l=l-l$  egész vagy félegész. A (24.9) kifejezés neve „három- $j$ -szimbólum”, definíciója kissé szimmetrikusabb alakban az  $s$  segítségével a következő:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j_1-j_2-m_3}}{\sqrt{2j_3+1}} S_{j_3 m_1 m_2}^{(j_1 j_2)} \delta_{m_1+m_2+m_3, 0}. \quad (24.9a)$$

Tekintve, hogy az  $s$ -ek csak abban az esetben definiáltak, ha  $j_1, j_2$  és  $j_3$  vektorháromszöget alkotnak, vagyis ha összegük egész és ha  $|j_1-j_2| \leq j_3 \leq j_1+j_2$  (vagy ami ugyanaz, egyikük sem nagyobb, mint a másik kettő összege), a három- $j$ -szimbólumok is csak e feltételek mellett vannak meghatározva. A későbbi számításokat egyszerűsíti, ha megállapodunk abban, hogy a három- $j$ -szimbólumok eltűnnek, ha a  $j$ -k nem alkotnak vektorháromszöget. Hasonlóképpen nem lesz szükségünk az összegezési határok megadására, ha az olyan három- $j$ -szimbólumokat, amelyekben bármely  $m$  abszolútértéke nagyobb, mint a megfelelő  $j$ -é, zérusnak tekintjük. E megállapodásokat tehát betartjuk.

A (24.9a)-ban meghatározott három- $j$ -szimbólumok nem teljesen szimmetrikusak. Teljes szimmetriát nem valósíthatunk meg, mert ha például a  $j$ -k közül kettő egyenlő, akkor az  $s$ -ek az  $m$  sorindexeknek nonszimmetrikus függvényei. Mindazonáltal a három- $j$ -szimbólumok kielégítik a következő összefüggéseket:

$$\begin{aligned} (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & j_2 \\ m_1 & m_3 & m_2 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} j_3 & j_2 & j_1 \\ m_3 & m_2 & m_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ m_2 & m_1 & m_3 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (24.10)$$

vagyis ha két  $j$ -t a megfelelő  $m$ -ekkel együtt felcserélünk (ez két oszlop felcserélése), a szimbólum változatlan marad, ha  $j_1+j_2+j_3$  páros, és előjelet vált, ha páratlan. Ebből arra következtethetünk, hogy a szimbólum nem változik meg, ha a  $j$ -ket a megfelelő  $m$ -ekkel együtt ciklikus permutációnak vetjük alá:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_2 & j_3 & j_1 \\ m_2 & m_3 & m_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_3 & j_1 & j_2 \\ m_3 & m_1 & m_2 \end{pmatrix}. \quad (24.10a)$$

Végül, ha az összes  $m$  előjelét megfordítjuk, akkor

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}. \quad (24.10b)$$

Tehát általában (vagyis mind a három  $j$  különböző és legalább az egyik  $m$  nem zérus), egy szimbólumból közvetlenül megkapható tizenegy másiknak az értéke is. Ha bizonyos  $j$ -k egyenlők egymással, vagy ha minden  $m$  zérus, akkor a fenti egyenletek értelmében a szimbólum eltűnhet.

(24.10), (24.10a) és (24.10b) a következőképpen igazolható. A három- $j$ -szimbólumokat (24.8d)-be helyettesítve kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} & \mathbf{D}^{(j_1)}(R)_{n_1 m_1} \mathbf{D}^{(j_2)}(R)_{n_2 m_2} \mathbf{D}^{(j_3)}(R)_{n_3 m_3} dR = \\ & = h \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ n_1 & n_2 & n_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (24.11)$$

A bal oldal változatlan marad, ha bármely két  $j$ -t és az őket kísérő  $n$ ,  $m$  indexeket egymással felcseréljük. Ennek a jobb oldalra is igaznak kell lennie, mégpedig az  $n$ -ek tetszőleges értéke mellett. Ha az  $n$ -eket a megfelelő  $m$ -ekkel tesszük egyenlővé, akkor a jobb oldal egy három- $j$ -szimbólum négyzete lesz. Ez változatlan marad, ha bármely két  $j$ -t a megfelelő  $m$  indexszel együtt felcseréljük. Az előjeltől eltekintve ugyanez érvényes magára a három- $j$ -szimbólumra is. Hogy az előjelek összefüggését is megállapíthassuk, legyen  $n_1 = -j_1$ ,  $n_2 = j_1 - j_3$ ,  $n_3 = j_3$ . Ez olyan választás, amely mellett a három- $j$ -szimbólum nagyon könnyen kiszámítható, hiszen a megfelelő  $s$ -re vonatkozó (17.27) összegből csupán a  $\kappa = 0$  tag különbözik zérustól. Voltaképpen csak

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -j_1 & j_1 - j_3 & j_3 \end{pmatrix} \quad (24.E.2)$$

előjelre van szükségünk. (24.9) és (17.27) alapján ez  $(-1)^{j_1-j_2-j_3}$  és  $(-1)^{j_2+j_1-j_3}$  szorzata, tehát (24.E.2) előjele  $(-1)^{2j_1-2j_3}$ . Hasonlóképpen

$$\begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ j_1 - j_3 & -j_1 & j_3 \end{pmatrix} \quad \text{és} \quad \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -j_1 & j_3 & j_1 - j_3 \end{pmatrix} \quad (24.E.3)$$

előjelei  $(-1)^{j_2-j_1-j_3}$ , illetve  $(-1)^{-j_3-j_1-j_2}$ . Így (24.E.2)-ben az első két oszlop felcserélése a szimbólumot a  $(-1)^{j_2-j_1-j_3}/(-1)^{2j_1-2j_3} = (-1)^{j_1+j_2+j_3}$  szorzóval megváltoztatja. Tekintve, hogy (24.11)-ben a két szimbólum szorzatának e két oszlop felcserélésekor változatlanok kell maradnia, a második szimbólumnak ugyanilyen szorzóval kell megváltoznia. Hasonlóképpen az utolsó két oszlop felcserélése a  $(-1)^{-j_3-j_1+j_2}/(-1)^{2j_1-2j_3} = (-1)^{-3j_1+j_2+j_3} = (-1)^{j_1+j_2+j_3}$  tényezőt szolgáltatja (mert  $(-1)^{4j} = 1$ ). Eszerint az utolsó oszlop felcserélése a három- $j$ -szimbólumot szintén a  $(-1)^{j_1+j_2+j_3}$  szorzóval változtatja meg. Így bebizonyítottuk (24.10) első, második és utolsó részének egyenlőségét. (24.10) fennmaradó része és (24.10a) ebből következik. A  $(-1)^{j_1-j_2-m_3}$  tényezőt azért vezettük be, hogy (24.10) és (24.10a) érvényesek legyenek.

(24.10b) igazolására megjegyezzük, hogy (24.10) jobb oldala valós. Így a bal oldal a komplex konjugáltjával helyettesíthető. Fejezzük ki ezután a  $\mathbf{D}^*$ -okat (24.7) alapján a  $\mathbf{D}$ -ekkel. Ez egy

$(-1)^{n_1+n_2+n_3-m_1-m_2-m_3}$  tényezőt is ad, amely azonban elhagyható, mert mindkét oldal eltűnik, hacsak  $n_1+n_2+n_3=0$  és  $m_1+m_2+m_3=0$  nem teljesül. Így

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -n_1 & -n_2 & -n_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} = \\ & = \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ n_1 & n_2 & n_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (24.12)$$

Legyen ismét  $n_1=-j_1$ ,  $n_2=j_1-j_3$ ,  $n_3=j_3$ . A jobb oldalon az első szimbólum előjele  $(-1)^{2j_1-2j_3}$ . A bal oldalon a szimbólum ugyancsak (24.E.2) alakú lesz, ha az első és az utolsó oszlopot felcseréljük. Ezért ennek előjele  $(-1)^{j_1+j_2+j_3}(-1)^{2j_3-2j_1}=(-1)^{-j_1+j_2-j_3}$ . Így az első tényezők hányadosának előjele  $(-1)^{j_1+j_2+j_3}$ . Így igazoltuk (24.10b)-ben az előjelet; ha az  $n$ -eket a megfelelő  $m$ -ekkel helyettesítjük, akkor látszik, hogy az abszolútértékek is megegyeznek. Eme összefüggések elvontabb levezetése a 8. hivatkozás cikkében található meg.

## KOVARIÁNS ÉS KONTRAVARIÁNS VEKTORCSATOLÁSI EGYÜTTTHATÓK

A pályaimpulzus-momentumnak és a spinimpulzus-momentumnak (24.8)-ban megadott összecsatolása a teljes impulzumomentummá átirható a három- $j$ -szimbólumok segítségével:

$$\Psi_m^J = \sum_{\mu} (-1)^{L+\mu+(m-\mu-S)} \sqrt{2J+1} \begin{pmatrix} L & S & J \\ \mu & m-\mu & m \end{pmatrix} \Xi_{m-\mu}^{SL} \quad (24.13)$$

$(-1)$  kitevőjét azért írtuk a jelzett módon, mert  $L+\mu$  és  $m-\mu-S$  mindketten egészek. A  $\mu$ -re történő összegezés határait nem kell feltüntetni, ha azt a megállapodást alkalmazzuk, hogy minden olyan három- $j$ -szimbólum zérus, amelyben egy alsó index abszolútértéke meghaladja a megfelelő ábrázolási indexet. (24.10) segítségével a három- $j$ -szimbólum első és utolsó oszlopa felcserélhető. Ha ugyanekkor az összes alsó index előjelét is megváltoztatjuk, akkor semmilyen előjelváltozás nem lesz. Továbbá az  $m-v$  számot  $v$ -vel helyettesítjük, és az összegezést kifejezhetjük  $v$ -re is; a három- $j$ -szimbólum ugyanis eltűnik, ha  $\mu+v-m$  nem zérus. Ilyen módon (24.13) átirható:

$$\Psi_m^J = \sum_{v\mu} (-1)^{L+\mu+(v-S)} \sqrt{2J+1} \begin{pmatrix} J & S & L \\ m-v & -\mu & m \end{pmatrix} \Xi_{v\mu}^{SL}. \quad (24.13a)$$

Végül helyettesítsük  $\Psi_m^J$ -et  $(-1)^{2L}\Psi_m^J$ -mel és a kitevőket a mínusz egyszerűségeikkel — ez lehetséges, mert egészek — így

$$\Psi_m^J = \sum_{v\mu} (-1)^{L-\mu} (-1)^{S-v} \sqrt{2J+1} \begin{pmatrix} J & S & L \\ m-v & -\mu & m \end{pmatrix} \Xi_{v\mu}^{SL}. \quad (24.13b)$$

A jelölésen még tovább javíthatunk, ha bevezetjük a hullámfüggvény és a három- $j$ -szimbólumok kovariáns és kontravariáns komponenseit.<sup>9</sup> Az e célra természetesen kínálkozó kovariáns metrikus tenzor a (24.3)-ban definiált  $C_{mn}^{(j)}$ , amelyet (24.6) szolgáltat expliciten. Az ilyen metrikus tenzor lehetővé teszi, hogy a vektor indexeit lehúzva kovariáns  $f_m^J$  komponenseket kapjunk oly vektorból, amelynek az  $f_J^{m'}$ -k a kontravariáns komponensei:

$$f_m^J = \sum_{m'} C_{mm'}^{(j)} f_J^{m'}. \quad (24.14)$$

Meg kell jegyeznünk, hogy  $C_{mm'}^J = (-1)^{J+m} \delta_{m', -m}$  csak egész  $J$ -re szimmetrikus, tehát az  $m, m'$  indexek nem cserélhetők fel. Hasonlóan a kovariáns komponensekről a kontravariánsokra a következőképpen térünk át:

$$f_J^n = \sum_{n'} C_J^{nm'} f_{n'}^J, \quad (24.14a)$$

ahol<sup>10</sup>

$$C_J^{nm'} = (-1)^{J-n} \delta_{n, -n'} = (-1)^{J+n'} \delta_{n, -n'}. \quad (24.14b)$$

A hullámfüggvényeknek csak kovariáns komponenseit, míg a három- $j$ -szimbólumoknak mind ko-, mind kontravariáns komponenseit használjuk majd. A három- $j$ -szimbólum utolsó indexében kontravariáns komponense például

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & m \\ m_1 & m_2 & j \end{pmatrix} = \sum_{m'} C_j^{mm'} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m' \end{pmatrix} = (-1)^{j-m} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix}. \quad (24.15)$$

E jelölés segítségével (24.13b) természetesen így írható:

$$\Psi_m^J = \sqrt{2J+1} \begin{pmatrix} J & \nu & \mu \\ m & S & L \end{pmatrix} \Xi_{\nu\mu}^{SL}, \quad (24.15a)$$

vagy még tömörebben

$$\Psi_m^J = \sqrt{2J+1} (J_m S^\nu L^\mu) \Xi_{\nu\mu}^{SL}. \quad (24.15b)$$

(24.15a)-ban és (24.15b)-ben az általános relativitáselmélet szokásos összegezési megállapodását alkalmaztuk a sorindexekre (vagyis a  $\nu, \mu$  stb. indexekre, amelyek az ábrázolás sorát jelölik ki): ismétlődő indexekre összegezés értendő. Az ilyen összegezésben szereplő indexpár egyike mindig kovariáns (alsó), a másik mindig kontravariáns (felső). A szabad sorindexeknek (tehát amelyekre nincs összegezés) az egyenlet mindkét oldalán kovariánsoknak, vagy mindkét oldalon kontravarián-

<sup>9</sup> Ezt C. HERRING javasolta először.

<sup>10</sup> (24.14b) előjelét így jegyezhetjük meg: az  $n$  első index negatív előjellel szerepel az exponensben, a kontravariáns metrikus tenzorban.

saknak kell lenniük. Mivel a kovariáns indexek mindkét oldalon ugyanazzal a metrikus tenzorral húzhatók fel, azért szabad kovariáns indexek bármely egyenlet mindkét oldalán helyettesíthetők szabad kontravariáns indexekkel és viszont. Ennek eredményeként a szabad indexek tulajdonképpen elhagyhatók mindkét oldalon. (24.15a)-hoz és (24.15b)-hez hasonló „relativisztikus alakú” egyenletek akkor is érvényben maradnak, ha az ábrázolások nem a 15. fejezetben megadott alakúak, hanem csak ekvivalensek azokkal. Érdemes lehet megjegyeznünk, hogy a 17. fejezet  $s$ -ei kevert három- $j$ -szimbólumok:

$$s_{L\mu\nu}^{(\bar{i})} = \sqrt{2L+1}(-1)^{l-\bar{l}+L} \begin{pmatrix} l & l & \mu+\nu \\ \mu & \nu & L \end{pmatrix} = \quad (24.16)$$

$$= \sqrt{2L+1}(-1)^{l-\bar{l}-L} \begin{pmatrix} L & \mu & \nu \\ \mu+\nu & l & l \end{pmatrix}.$$

Annak ellenére, hogy a jelölések a relativitás elméletében használtakhoz hasonlóak, mégis lényeges fogalmi különbség van közöttük. A relativitáselméletben a vektorok és tenzorok indexei a 0, 1, 2, 3 értékeket vehetik csak fel; ezek a téridő tengelyeire vonatkoznak. Az  $m, n, \mu$  stb. indexek valamilyen ábrázoláshoz kapcsolódnak és eme irreducibilis ábrázoláshoz tartozó különböző „partnerekre” vonatkoznak. Minden index annyi értéket vehet fel, ahány sora van a hozzákapcsolódó ábrázolásnak. Az összegezés („kontrakció”) olyan indexekre történik, amelyek ugyanahhoz az ábrázoláshoz kapcsolódnak. Az egyenlet mindkét oldalán a szabad indexek — ilyen  $m$  (24.15)-ben — ugyanarra az ábrázolásra vonatkoznak (ebben az esetben  $\mathbf{D}^{(J)}$ -re). Ennek folytán nem egy metrikus tenzor van, hanem minden ábrázolásnak megvan a maga metrikus tenzora. A más és más ábrázolásokhoz kapcsolódó indexek között a különbség a tenzorok szimmetrikus vagy antiszimmetrikus jellegében is megmutatkozik; (24.10)-ben és (24.10a)-ban megadott összefüggések csak akkor függetlenek az ábrázolások alakjától, ha a felcserélt indexek ugyanahhoz az ábrázoláshoz tartoznak. Ebben az esetben azonban *függetlenek* az ábrázolás alakjától:

$$\begin{pmatrix} J & j & j \\ m & \nu & \mu \end{pmatrix} = (-1)^{J+2j} \begin{pmatrix} J & j & j \\ m & \nu & \mu \end{pmatrix} \quad (24.17)$$

érvényes lesz az ábrázolás használt alakjától függetlenül. Ez a körülmény sugallta a három- $j$ -szimbólumok előjelére vonatkozó megállapodásunkat.

A (24.17) összefüggésnek egy közvetlen és érdekes folyománya van: ha két olyan részecskét csatolunk össze, amelyek hullámfüggvényei ugyanazon ábrázoláshoz tartozó „partnerek” (ekvivalens pályák), és belőlük teljes  $J$  impulzummomentumú állapotot képezünk,

$$\Psi_m^J(1, 2) = (J_m^j j^\mu) \psi_\nu^j(1) \psi_\mu^j(2), \quad (24.17a)$$

(1 és 2 a két részecske változóit jelölik), akkor az eredményül kapott állapot a két részecske felcserélésére nézve szimmetrikus, ha  $J+2j$  páros és antiszimmetrikus, ha  $J+2j$  páratlan. Így két  $2p$  elektron szimmetrikus  $S$  és  $D$ , antiszimmetrikus  $P$  állapotot ad. Ez felel meg a  $j=1$  (amelyet ebben az esetben  $l$ -nek neveznek) és a szimmetrikus helyzetben a  $J=0,2$  (ennek neve most  $L$ ), az antiszimmetrikus helyzetben a  $J=1$  esetnek. Hasonlóan, két elektronspin csatolódása szimmetrikus  $S=1$  állapotot és antiszimmetrikus  $S=0$  állapotot ad.

Számoljuk ki végül a három- $j$ -szimbólum teljesen kontravariáns alakját:

$$\begin{aligned} (J^m, S^v, L^\mu) &= C_J^{mm'} C_S^{vv'} C_L^{\mu\mu'} (J_{m'}, S_{v'}, L_{\mu'}) = \\ &= (-1)^{J-m+S-v+L-\mu} (J_{-m}, S_{-v}, L_{-\mu}). \end{aligned} \quad (24.18)$$

A  $(-1)^{-m-v-\mu}$  szorzó elhagyható, mert a három- $j$ -szimbólum eltűnik, ha  $m+v+\mu \neq 0$ . Így (24.10b) folytán

$$(J^m, S^v, L^\mu) = (J_m, S_v, L_\mu). \quad (24.18a)$$

*A teljesen kovariáns és teljesen kontravariáns három- $j$ -szimbólumok egyenlők egymással.* Ez a tétel az ábrázolásoknak a 15. fejezetben elfogadott alakjától függ. Lehetővé teszi azonban azt, hogy (24.11)-et kovariáns alakba írjuk. Először is megjegyezzük, hogy noha az ábrázolás indexeit alulra írjuk, az első index valójában kontravariáns index. Ez már az alapvető

$$\mathbf{O}_R \psi_m^j = \sum_{m'} \mathbf{D}^{(j)}(R)_{m'm} \psi_{m'}^j$$

képletből is világos. Az  $m'$ -re történő összegezés azt mutatja, hogy ennek felső indexnek kellene lennie. Így (24.11) helyett természetesebb azt írni, hogy

$$\begin{aligned} &\int \mathbf{D}^{(j_1)}(R)_{n_1 m_1} \mathbf{D}^{(j_2)}(R)_{n_2 m_2} \mathbf{D}^{(j_3)}(R)_{n_3 m_3} dR = \\ &= h \begin{pmatrix} n_1 & n_2 & n_3 \\ j_1 & j_2 & j_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (24.18b)$$

Számoljuk ki  $\mathbf{D}^{(j)}(R)_{nm}$  kovariáns—kontravariáns komponensét:

$$C_{m'n}^j C_j^{mm'} \mathbf{D}^{(j)}(R)_{n'm'} = (\mathbf{C} \mathbf{D}^{(j)} \mathbf{C}^{-1})_{n'}^m, \quad (24.18c)$$

hiszen a kontravariáns metrikus tenzor a kovariáns inverze. Tekintve, hogy  $\mathbf{C}' = (-1)^{2j} \mathbf{C}$  és  $\mathbf{C}^{-1} \mathbf{D}$ -t  $\mathbf{D}^*$ -ba transzformálja át, azt kapjuk, hogy  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$  kovariáns—kontravariáns  $n, m$  komponense  $\mathbf{D}^{(j)}(R)$  kontravariáns—kovariáns  $n, m$  komponens-



sének (amely a szokásos  $D^{(j)}(R)_{nm}$ ) komplex konjugáltja, szorozva  $(-1)^2$ -vel. Így a három ábrázolási együttható szorzatának integráljára kapjuk, hogy

$$\int D^{(j_1)}(R)_{n_1 m_1} D^{(j_2)}(R)_{n_2 m_2} D^{(j)}(R)_{nm}^* dR =$$

$$= (-1)^{2j} h \begin{pmatrix} n_1 & n_2 & j \\ j_1 & j_2 & n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & m \\ m_1 & m_2 & j \end{pmatrix}. \quad (24.18d)$$

Természetesen (24.18d)-t közvetlenül is megkaphattuk volna.

Az a tétel, hogy a három- $j$ -szimbólum teljesen kovariáns és teljesen kontra-variáns komponensei egyenők, a (17.28) ortogonalitási összefüggéseknek invariáns alakot biztosít:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_1 & m_2 & m' \\ j_1 & j_2 & j \end{pmatrix} = \frac{\delta_{jj'} \delta_{mm'}}{2j+1}. \quad (24.19)$$

$m=m'$  esetén ez (17.28)-ban az első egyenlettel ekvivalens. Ha  $m \neq m'$ , akkor az összeg minden tagja eltűnik, mert  $m_1+m_2$  nem lehet egyszerre  $-m$ -mel és  $-m'$ -vel egyenlő. A másik ortogonalitási összefüggés olyan formában, mely az ábrázolás alakjától független, a következő:

$$\sum_j \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m'_1 & m'_2 & m \\ j_1 & j_2 & j \end{pmatrix} = \frac{\delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2}}{2j+1}. \quad (24.19a)$$

Az  $m$ -re történő összegezést megállapodásunk miatt nem írtuk ki külön. A kovariáns jelölés nemcsak azért — és talán nem főleg azért — hasznos, mert olyan egyenleteket szolgáltat, amelyek nem változnak meg, ha az egyenleteket hasonlósági transzformációknak vetjük alá, hanem fő szerepe az egyenletek memorizálásában keresendő. Ezenkívül további nagyon tömör jelöléseket is sugalmaz; ezeket a következő szakaszban vezetjük be.

## A RACA-H-EGYÜTTHATÓK

Az előző számolások a vektorcsatolási együtthatók szimmetrikusabb alakjához vezettek el, azonban nem adtak olyan egyszerű képleteket, amelyek segítségével az előző fejezet képleteit minimális számolással és erőlködés nélkül megkaphattuk volna. Amint azt már az első szakaszban említettük, léteznie kell általános összefüggéseknek a vektorcsatolási együtthatók között, amelyek a *Hönl—Kronig*-képletek, a *Landé*-intervallumszabály és más hasonló kifejezések kiszámítását teljesen világossá teszik. Sokféle lehetőség van a kérdéses képletek levezetésére. Ezek közül egyeseket már az előző fejezet tartalmaz.

Fenti összefüggésekhez a legtermészetesebb módon a gömbszimmetrikus erőterben mozgó három részecske vizsgálata vezet el.<sup>11</sup> Az első részecske energiájához a  $\psi_{\kappa}$  hullámfüggvények tartoznak;  $\kappa = -j_1, -j_1+1, \dots, j_1-1, j_1$ , a  $\psi_{\kappa}$ -k „partnerek” és a  $\mathbf{D}^{(j_1)}$  ábrázoláshoz tartoznak. A második részecske energiájának megfelelő hullámfüggvények a  $\varphi_{\lambda}$ -k; ezek a  $\mathbf{D}^{(j_2)}$  ábrázoláshoz tartoznak, a harmadik részecskére ezek megfelelője  $\chi$  és  $\mathbf{D}^{(j_3)}$ . A teljes rendszer hullámfüggvénye a

$$\psi_{\kappa}(1)\varphi_{\lambda}(2)\chi_{\mu}(3) \quad (24.E.4)$$

függvények lineáris kombinációja; 1, 2 és 3 a három részecske koordinátáit jelöli. Mivel  $\psi$  változói mindig az első részecske koordinátáit jelölik majd, azért az (1)-et mostantól elhagyjuk. Hasonlóan  $\varphi_{\lambda}$ -t és  $\chi_{\mu}$ -t írunk  $\varphi_{\lambda}(2)$  és  $\chi_{\mu}(3)$  helyett. A szemügyre vett helyzet nagymértékben vázlatos és nem felel meg semmilyen valódi fizikai rendszernek. Vizsgálata azonban a keresett összefüggések levezetésében újít hasznot.

A (24.E.4) hullámfüggvényekből olyan lineáris kombinációkat képezünk, amelyek mindhárom részecske koordinátáinak együttes elforgatásakor a  $J$  irreducibilis ábrázolás szerint transzformálódnak. Ilyen hullámfüggvényeket három különböző módon kaphatunk. Először az első két részecske impulzusmomentumát eredő  $j$  impulzusmomentummá (24.15a) szerint csatoljuk össze:

$$\chi_m^j(1, 2) = \sqrt{2j+1} \begin{pmatrix} j & \kappa & \lambda \\ m & j_1 & j_2 \end{pmatrix} \psi_{\kappa} \varphi_{\lambda} \quad (24.20)$$

Majd a harmadik részecskét csatoljuk ehhez az eredő  $j$  impulzusmomentumhoz, s így képezzük a  $J$  teljes impulzusmomentumot:

$$\begin{aligned} \chi_M^J(1, 2, 3) &= \sqrt{2J+1} \begin{pmatrix} J & \mu & m \\ M & j_3 & j \end{pmatrix} \chi_{\mu} \chi_m^j(1, 2) = \\ &= \sqrt{2J+1} \sqrt{2j+1} \begin{pmatrix} J & \mu & m \\ M & j_3 & j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j & \kappa & \lambda \\ m & j_1 & j_2 \end{pmatrix} \psi_{\kappa} \varphi_{\lambda} \chi_{\mu}. \end{aligned} \quad (24.21)$$

A  $j$  index jelöli az 1 és 2 részecske teljes impulzusmomentumát, s ebből állítottuk elő a  $\chi_M^J$  állapotot. A (24.21) hullámfüggvényt tekintenénk a természetesnek, ha az 1 és 2 részecske között a kölcsönhatás például erősebb volna, mint bármelyik és a 3 részecske között.

A  $J$  impulzusmomentumú állapot előállítására másik lehetőség az volna, hogy először a 2 és 3 részecskét, majd az eredő állapotot és az 1 részecskét csatolnánk össze. Esetleg először az 1 és 3 részecskét, majd az így kapott hullámfüggvényt és

<sup>11</sup> G. RACAHA, idézett cikk, L. C. BIEDENHARN, J. M. BLATT és M. E. ROSE, Rev. Mod. Phys. 24, 249 (1952), A. R. EDMONDS, idézett mű, 6. fejezet.

a 2 részecskét csatolva kapnánk a végső állapotot. Ez annak felelne meg, hogy a 2 és 3, illetőleg az 1 és 3 részecske között legerősebb a kölcsönhatás, de ezzel az indítékkal a továbbiakban nem foglalkozunk. Az így kapott hullámfüggvények:

$$\Psi_M^{jJ}(1, 2, 3) = \sqrt{2J+1}\sqrt{2j+1} \begin{pmatrix} J & \kappa & m \\ M & j_1 & j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j & \lambda & \mu \\ m & j_2 & j_3 \end{pmatrix} \psi_{\kappa\varphi\lambda\chi\mu} \quad (24.21a)$$

és

$$\Phi_M^{jJ}(1, 2, 3) = \sqrt{2J+1}\sqrt{2j+1} \begin{pmatrix} J & \lambda & m \\ M & j_2 & j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j & \kappa & \mu \\ m & j_1 & j_2 \end{pmatrix} \psi_{\kappa\varphi\lambda\chi\mu}. \quad (24.21b)$$

(24.21a)-ban a  $j$  index a 2 és 3 részecske, s ehhez hasonlóan (24.21b)-ben  $j$  az 1 és 3 részecske összecsatolt impulzumomentumát jelöli.

A  $\Psi_M^{jJ}$ ,  $\Psi_M^{j'J}$  és  $\chi_M^{jJ}$  állapotok nem azonosak egymással, noha a teljes impulzumomentum és annak  $Z$  komponense mindháromnál  $J\hbar$ , illetőleg  $M\hbar$ . Minden (24.E.4) állapot kifejezhető lineárisan a  $\Phi_{M'}^{j'J}$ -kkel csakúgy, mint a  $\Psi_M^{jJ}$  és a  $\chi_M^{jJ}$  függvényekkel. Továbbá például a

$$\chi_M^{jJ} = \sum_{j'} \sum_{J'} c(jJM; j'J'M') \Phi_{M'}^{j'J'} \quad (24.22)$$

kifejezésben eltűnnek  $\Phi_{M'}^{j'J'}$  ama együtthatói, amelyekben  $J'=J$  és  $M'=M$ , mert ezek a  $\Phi$ -k vagy a  $\mathbf{D}^{(J)}$ -től különböző ábrázoláshoz, vagy ugyanezen ábrázolás más sorához tartoznak. Ezért a  $J'$ ,  $M'$ -re való összegezés elhagyható és ezeket az indexeket  $J$ ,  $M$ -mel helyettesíthetjük. Továbbá a  $c(jJM; j'JM)$  együtthatók függetlenek  $M$ -től, mert  $\chi_M^{jJ}$ , és  $\Phi_M^{j'J}$  ugyanazon  $\mathbf{D}^{(J)}$  ábrázoláshoz tartozó partnerek tehát a  $(\chi_M^{jJ}, \Phi_M^{j'J})$  skalárszorzatok  $M$ -től nem függenek. Így (24.33) az alábbi összefüggést adja (a  $\sqrt{2J+1}$ -et elhagyva):

$$\sqrt{2j+1} \begin{pmatrix} J & \mu & m \\ M & j_3 & j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j & \kappa & \lambda \\ m & j_1 & j_2 \end{pmatrix} \psi_{\kappa\varphi\lambda\chi\mu} = \quad (24.22a)$$

$$= \sum_{j'} c^J(j; j') \sqrt{2j'+1} \begin{pmatrix} J & \lambda & m \\ M & j_2 & j' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j' & \kappa & \mu \\ m & j_1 & j_3 \end{pmatrix} \psi_{\kappa\varphi\lambda\chi\mu},$$

mindkét oldalon összegezés értendő az  $m$ ,  $\kappa$ ,  $\lambda$ ,  $\mu$  indexekre. A  $\psi_{\kappa\varphi\lambda\chi\mu}$ -k lineáris függetlensége miatt ezeknek együtthatói a két oldalon megegyeznek egymással:

$$\begin{pmatrix} J & \mu & m \\ M & j_3 & j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j & \kappa & \lambda \\ m & j_1 & j_2 \end{pmatrix} = \quad (24.23)$$

$$= \sum_{j'} (-1)^{2j_1} (2j'+1) \begin{Bmatrix} J & j_2 & j' \\ j_1 & j_3 & j \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} J & \lambda & m \\ M & j_2 & j' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j' & \kappa & \mu \\ m & j_1 & j_3 \end{pmatrix}.$$

$$\begin{Bmatrix} J & j_2 & j' \\ j_1 & j_3 & j \end{Bmatrix} = \frac{(-1)^{2j_1} c^J(j; j')}{\sqrt{2j+1}\sqrt{2j'+1}}, \quad (24.23a)$$

ezeket hat- $j$ -szimbólumoknak vagy *Racah*-együtthatóknak,<sup>12</sup> esetleg átcsatolási együtthatóknak nevezzük. Az utóbbi elnevezés a fenti levezetésre vonatkozik, amelyben  $\chi$  hullámfüggvényekről a  $\Phi$ -kre térünk át. Az előbbiben az 1 és 2, az utóbbiban az 1 és 3 részecske csatolódik erősen. A levezetésből következik, hogy a hat- $j$ -szimbólumok függetlenek  $\kappa, \lambda, \mu$ -tól (ezek csak akkor kerültek elő, amikor (24.22a)-ból (24.23)-at kihoztuk) és függetlenek  $M$ -től is (amint arra rámutattunk). Ezt alább még egyszer bebizonyítjuk. Ily módon (24.23)  $\kappa, \lambda, \mu$ -ben azonosság. A hat- $j$ -szimbólum kizárólag a benne szereplő hat  $j$  függvénye, tehát e hat szám teljesen meghatározza annak (számszerű) értékét. Megjegyezzük, hogy (24.23) mindkét oldalán  $m$ -re is összegezés van. Mivel azonban (24.23)-ban az utolsó három- $j$ -szimbólum csak akkor nem tűnik el, ha  $m = \kappa + \mu$  minden  $j$ -re, azért csak egyetlen tag nem zérus, és a jobb oldal így csak  $j$ -re való összegezést tartalmaz. Mi több, a jobb oldali három- $j$ -szimbólum miatt még az  $m = \kappa + \mu$  tag is csak akkor nem zérus, ha  $M = \lambda + m = \kappa + \lambda + \mu$ . A bal oldal csak egyetlen tagot tartalmaz, ebben  $m = \kappa + \lambda$ , és eltűnik, hacsak  $M = \mu + m = \kappa + \lambda + \mu$  nem teljesül. Így (24.23) trivialis, ha  $M \neq \kappa + \lambda + \mu$ . Ez nem meglepő, hiszen mind  $X_M^{j_j}$ , mind pedig  $\Phi_M^{j_j}$  csak olyan  $\psi_{\kappa\lambda\mu}$ -t tartalmaz, amelyre  $\kappa + \lambda + \mu = M$ , tehát más  $\psi_{\kappa\lambda\mu}$ -k egyúttartóinak összehasonlítása nem nyújthat információt.

A (24.23) egyenlet tartalmazza a keresett összefüggést. Ennek most még néhány más alakot is adunk, és még szimmetrikusabban írjuk fel. E célból a kontravariáns  $\kappa, \lambda, \mu$  indexeket mindkét oldalon helyettesítsük a kovariánsakkal és hajtsunk végre ciklikus permutációt mindkét oldal második három- $j$ -szimbólumában. Különböző típusú  $j$ -ket még átjelölve kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} j_1 & l_2 & \lambda \\ \mu_1 & \lambda_2 & l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & j_2 & l \\ \lambda_1 & \mu_1 & \lambda \end{pmatrix} = \\ & \sum_j (-1)^{2l_1} (2j+1) \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ l_1 & l_2 & l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & \mu \\ \mu_1 & \mu_2 & j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & j \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \mu \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (24.24)$$

Ebben az egyenletben négy három- $j$ -szimbólum s ennek megfelelően négy olyan  $j$  és  $l$  hármas van, amelynek vektorháromszöget kell alkotnia. Minden hármas három tagja (például  $l_1 j_2 l$ ) szerepel a hat- $j$ -szimbólum különböző soraiban; vagy mindhárom a felső sorban, vagy kettő az alsóban és egy a felsőben. Fordítva, a hat- $j$ -szimbólumot csak akkor definiáltuk, ha mind négy  $j_1 j_2 j; j_1 l_2 l; l_1 j_2 l; l_1 l_2 j$  triplett vektorháromszöget alkot. Legyen a többi hat- $j$ -szimbólum zérus. Meglehetősen

<sup>12</sup> Valójában RACA  $W$  mennyisége a mi hat- $j$ -szimbólumunkkal így függ össze:

$$W(j_1 j_2 l_2 l_1; j_3 l_3) = (-1)^{j_1 + j_1 + l_2 + l_2} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{Bmatrix}.$$

nehéz (24.24)-ben a hat- $j$ -szimbólumban valamennyi  $j$  és  $l$  helyzetét emlékeztetbe vésni. Ám nyomban megmutatjuk, hogy minden olyan hat- $j$ -szimbólum egyenlő egymással, amely ugyanabból a hat  $j$ -ből épül fel, és amelyben ugyanazon tripletteknek kell vektorháromszöget alkotniuk. Ennek eredményeként elég könnyű lesz (az előjeltől eltekintve) (24.24)-re visszaemlékezni. Világosan látszik majd az átmenet a  $j_1 j_2$  (és  $l_1 l_2$ ) csatolásról a  $j_1 j_2$  és  $l_1 l_2$  csatolásra. Mindezek lehetnek akár egészek, akár félegészek.

Most bevezetjük az előző szakasz végén említett tömör jelölést. Ez lényegében az összes sorindex elhagyásából áll. A *szabad* sorindexek mindkét oldalon ugyanazok, és bármilyen értéket felvehetnek, ezeket tehát nem kell kiírni. Nem szükséges továbbá azt sem jelezni, hogy kovariánsak-e, vagy kontravariánsak, ha nem tévesztjük szem elől, hogy  $e$  jellegük a két oldalon megegyezik. A *kontrahált* indexeket sem kell kiírni, hiszen ezekre úgymint összegezni kell. Ekkor azonban fel kell tüntetnünk, hogy melyik a kovariáns és melyik a kontravariáns index. Ezt egy alsó, illetőleg felső ponttal jelezzük. *Ha a két pontot felcseréljük két olyan  $j$ -n, amelyeknek indexeire összegezni kell, akkor a  $(-1)^{2j}$  szorzó jelenik meg, mert*

$$\begin{aligned} f_{\mu}^j g_j^{\mu} &= C_{uv}^j C_{j\lambda}^{\mu\nu} f_{\lambda}^{\nu} g_{\mu}^j = \\ &= (-1)^{j+\mu} f_j^{-\mu} (-1)^{j-\mu} g_{-\mu}^j = (-1)^{2j} f_j^{\mu} g_{\mu}^j. \end{aligned}$$

Így (24.24) a

$$(j_1 l_2 l') (l_1 j l) = (-1)^{2l} \sum_j (2j+1) \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ l_1 & l_2 & l \end{Bmatrix} (j_1 j_2 j) (l_1 l_2 j), \quad (24.24a)$$

tömör alakba írható. Ha a bal oldalon a pontok helyzetét megfordítjuk, akkor a  $(-1)^{2l} = (-1)^{2l_1+2j_2}$  szorzó, ha pedig a jobb oldalon, akkor a  $(-1)^{2j} = (-1)^{2j_1+2j_2}$  szorzó jelenik meg.

A (24.19) ortogonalitási összefüggések tömör írásmódban:

$$(j_1, j_2, j) (j_1, j_2, j') = (2j+1)^{-1} \delta(j, j'), \quad (24.25)$$

ahol  $\delta(j, j')$  zérus, ha  $j \neq j'$  vagy ha a megfelelő indexek nem egyenlők és egy, ha  $j = j'$  és a megfelelő indexek egyenlők és a bal oldalon olyan helyzetűek, amelyet a jobb oldalon jeleznek. Ily módon

$$\delta(j, j') = (-1)^{2j} \delta(j, j'). \quad (24.25a)$$

Természetesen a tömör jelölést nem lehet mindig alkalmazni, főleg ha ugyanaz a  $j$  az egyenlet egyik oldalán kétszer fordul elő, de indexére nincs összegezés. Ebben az esetben a másik oldalon is előfordul ugyanez a  $j$  kétszer és nincs támpont arra, hogy melyik index melyik  $j$ -vel azonosítható. Ez az oka annak, hogy a tömör jelölés

a relativisztikus számolásokban nem előnyös: ott minden index ugyanarra a térre vonatkozik. Esetünkben a tömör jelölés sok számolást világosabbá tesz.

Mivel a jobb oldalon összegezés van  $j$ -re, azért (24.24) a hat- $j$ -szimbólumra nem ad explicit kifejezést. Ilyet úgy kaphatunk, hogy (24.24a)-t megszorozzuk  $(l_1 l_2 j_3)$ -mal és kontrahálunk  $l_1$  és  $l_2$  indexeire:

$$\begin{aligned} & (j_1 l_2 l_3)(l_1 j_2 l_3)(l_1 l_2 j_3) = \\ & = (-1)^{2l_1} \sum_j (2j+1) \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ l_1 & l_2 & l \end{Bmatrix} (j_1 j_2 j)(l_1 l_2 j)(l_1 l_2 j_3). \end{aligned}$$

A bal oldalon az  $l_1$ -ek pontjainak a felcserélésével a jobb oldali  $(-1)^{2l_1}$  kiesik. A jobb oldal utolsó két tényezője (24.25) miatt a  $2j+1$  tényezőt és az összegezést eltünteteti;  $j$  helyébe  $j_3$ -at kell írni; ahol  $j$ -nek szabad indexe szerepel, az ugyanolyan helyzetű lesz, mint  $j_3$  indexe. Így

$$(j_1 l_2 l_3)(l_1 j_2 l_3)(l_1 l_2 j_3) = \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{Bmatrix} (j_1 j_2 j_3). \quad (24.24b)$$

Ez valószínűleg a *Racah*-együtthatókra vonatkozó legfontosabb összefüggés; a következő szakaszban az irreducibilis tenzoroperátorok mátrixelemeinek kiszámítására fogjuk majd felhasználni. A három- $j$ -szimbólumok ciklikus szimmetriája miatt máris kitűnik, hogy a hat- $j$ -szimbólumok oszlopai ciklikusan felcserélhetők. Hasonlóan (24.24)-ben  $j_1$ -et  $j_2$ -vel és  $l_1$ -et  $l_2$ -vel felcserélve a bal oldal  $(-1)^{j_1+j_2+l_1+l_2}$ -vel, a jobb oldal pedig  $(-1)^{2l_2-2l_1+j_1+j_2+l_1+l_2+2j}$ -vel szorozódik meg. A két oldal három- $j$ -szimbólumának aránya tehát  $(-1)^{2l_2-2l_1+2j}$  tényezővel változik, ami  $+1$ , hiszen az  $l_1 l_2 j$  vektoroknak vektorháromszöget kell alkotniuk. E két eredmény összevetése azt mutatja, hogy a *hat- $j$ -szimbólum értéke nem változik meg oszlopainak tetszőleges felcserélésekor*. Végül  $j_1$ -et  $l_1$ -gyel és  $j_2$ -t  $l_2$ -vel felcserélve (24.24) bal oldala  $(-1)^{2l}$ -el (mert a kovariáns és kontravariáns  $\lambda$ -kat cseréltük fel), a jobb oldal pedig  $(-1)^{2j_1-2l_1+2j}$ -vel szorozódik meg; e két tényező aránya ismét  $+1$ , mert a  $j_1 j$  és az  $l_1 l$  párok mindegyike vektorháromszöget alkot  $j_2$ -vel. Így a hat- $j$ -szimbólum változatlan marad, ha első két oszlopát a feje tetejére állítjuk. Ezt az előző eredménnyel összevetve az adódik, hogy a *hat- $j$ -szimbólum nem változik meg, ha bármely két oszlopát állítjuk a feje tetejére*. A  $j$ -knek összesen 24 olyan permutációja van, amely a hat- $j$ -szimbólumot változatlanul hagyja, ez az összes olyan permutáció, amely a négy vektorháromszög-hármaszt tetszőleges módon felcseréli<sup>13</sup>. Még sok más összefüggés is van a hat- $j$ -szimbólumok között. A szimmetria-összefüggések még nyilvánvalóbbá tehetők, ha (24.24b)-t a teljesen kontravariáns  $(j_1 j_2 j_3)$  három- $j$ -szimbólummal szorozzuk meg, és kontrahálunk az ezekhez tartozó összes indexre.

<sup>13</sup> További részleteket illetően lásd A. R. EDMONDS, idézett mű; L. C. BIEDERMAN, J. M. BLATT, M. E. ROSE, idézett cikk.

A hat- $j$ -szimbólum kiszámítására szolgáló legegyszerűbb általános képlet (24.24b)-ben rejlik. Ennek kiértékelésére  $\mu_1, \mu_2$  és  $\mu_3$  különleges értékei használatosak. A  $\mu_1 = -j_1, \mu_2 = j_1 - j_3, \mu_3 = j_3$  választás adja a három- $j$ -szimbólumok legegyszerűbb kifejezéseit. A hat- $j$ -szimbólumokat a  $\mu$ -k hasonló megválasztásával számoltuk ki impliciten a Hönl—Kronig-képletek levezetésénél. RACAHERedeti cikkében kissé eltérő kifejezést adott meg.<sup>14</sup> Mindazonáltal a számolás fáradságos marad. A hat- $j$ -szimbólumokra vagy más ekvivalens mennyiségekre azonban kiterjedt táblázatok állnak a rendelkezésünkre. SHARP, KENNEDY, SCARS és HOYLE táblázata<sup>15</sup> talán a legjobban hozzáférhető. Itt csupán három, meglehetősen triviális esetet említünk meg: ha  $j_2 = 0$ , úgy az  $l_1, j_2, l_3$  vektorok csak akkor alkotnak vektorháromszöget, ha  $l_3 = l_1$ . Hasonlóan  $j_1 = j_3$  a  $j_1 j_2 j_3$  háromszögből következik. Így ha  $j_2 = 0$ , akkor valamennyi nem eltűnő hat szimbólum ilyen alakú:

$$\begin{Bmatrix} j_1 & 0 & j_1 \\ j_2 & j & j_2 \end{Bmatrix} = \frac{(-1)^{j+j_1+j_2}}{\sqrt{2j_1+1}\sqrt{2j_1+1}}. \quad (24.26)$$

A hat- $j$ -szimbólumok szimmetriája miatt a 0 bármely helyzetbe átvihető. Ha  $j_2 = \frac{1}{2}$ , akkor két típus van:

$$\begin{Bmatrix} j_1 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & j_1 \\ j_2 & j & j_2 & -\frac{1}{2} \end{Bmatrix} = (-1)^J \left[ \frac{(J+1)(J-2j)}{2j_1(2j_1+1)2j_2(2j_2+1)} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (24.26a)$$

$$\begin{Bmatrix} j_1 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & j_1 \\ j_2 & -\frac{1}{2} & j & j_2 \end{Bmatrix} = (-1)^{J-\frac{1}{2}} \left[ \frac{(J-2j_1+\frac{1}{2})(J-2j_2+\frac{1}{2})}{2j_1(2j_1+1)2j_2(2j_2+1)} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (24.26b)$$

ahol  $J = j_1 + j_2 + j$ .

Végül ha  $j_2 = 1$ , akkor négy típus van:

$$\begin{Bmatrix} j_1-1 & 1 & j_1 \\ j_2 & j & j_2^{-1} \end{Bmatrix} = (-1)^J \left[ \frac{J(J+1)(J-2j-1)(J-2j)}{(2j_1-1)2j_1(2j_1+1)(2j_2-1)2j_2(2j_2+1)} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (24.26c)$$

$$\begin{Bmatrix} j_1-1 & 1 & j_1 \\ j_2-1 & j & j_2 \end{Bmatrix} = (-1)^{J-1} \left[ \frac{(J-2j_1)(J-2j_1+1)(J-2j_2)(J-2j_2+1)}{(2j_1+1)2j_1(2j_1+1)(2j_2-1)2j_2(2j_2+1)} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (24.26d)$$

<sup>14</sup> G. RACAHERedett cikk.

<sup>15</sup> Tables of Coefficients for Angular Distribution Analysis, CRT—556, Atomic Energy of Canada, Ltd., (1954). Továbbá SIMON, VAN DER SLUIS, L. C. BIEDENHARN, Oak Ridge National Laboratory Report 1679 (1954); OBI, Ishidzu, HORIE, YANAGOWA, TANABLE, SATO, Ann. Tokyo Astron. Obs., 1953—55; ROTENBERG, BIVINS, METROPOLIS, WOOTEN: The 3- $j$  and 6- $j$  Symbols. Technology Press, Cambridge, Mass.; K. M. HOWELL: Tables of 6- $j$  Symbols. University of Southampton.

$$\begin{Bmatrix} j_1 & 1 & j_1 \\ j_2-1 & j & j_2 \end{Bmatrix} = (-1)^J \left[ \frac{2(J+1)(J-2j)(J-2j_1)(J-2j_2+1)}{2j_1(2j_1+1)(2j_1+2)(2j_2-1)2j_2(2j_2+1)} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (24.26e)$$

$$\begin{Bmatrix} j_1 & 1 & j_1 \\ j_2 & j & j_2 \end{Bmatrix} = (-1)^J \frac{j(j+1)-j_1(j_1+1)-j_2(j_2+1)}{[j_1(2j_1+1)(2j_1+2)j_2(2j_2+1)(2j_2+2)]^{\frac{1}{2}}}. \quad (24.26f)$$

Az utolsó képlet a  $j_1=L$ ;  $j_2=S$ ;  $j=J$  jelölés mellett a *Landé*-intervallumszabállyal bizonyul majd ekvivalensnek.

A hat- $j$ -szimbólumok nem függenek attól, hogy az irreducibilis ábrázolásoknak milyen az alakjuk, ezért lehet kiszámolni azokat az ábrázolásokat karaktereinek segítségével. Ez ugyan nem egészen igaz, mert e szimbólumok definíciójában néhány előjel-megállapodás szerepel, azonban van a hat- $j$ -szimbólumoknak olyan kifejezése, amely e megállapodásoktól független, ilyen például a négyzetük. Ezt valóban egy háromszoros integrál szolgáltatja:

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{Bmatrix} = h^{-3} \int \int \int \chi_1(R_1) \chi_2(R_2) \chi_3(R_3) \chi'(R_2 R_3^{-1}) \times \\ \times \chi'_2(R_3 R_1^{-1}) \chi'_3(R_1 R_2^{-1}) dR_1 dR_2 dR_3;$$

Itt  $\chi_i$  a  $\mathbf{D}^{(j_i)}$ ,  $\chi'_i$  pedig a  $\mathbf{D}^{(l_i)}$  ábrázolás karaktere. E képlet levezetését nem részletezzük.

A fentiek mellett a hat- $j$ -szimbólumok még számos más összefüggést is kielégítenek. Nevezetesen megmutatható, hogy az

$$\mathbf{R}_{lj} = \sqrt{2l+1} \sqrt{2j+1} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ l_1 & l_2 & l \end{Bmatrix}$$

mátrix ortogonális. A hat- $j$ -szimbólum oszlopainak felcserélhetősége miatt minden ilyen mennyiség — a  $(2l+1)^{1/2}(2j+1)^{1/2}$ -hez hasonló tényezőktől eltekintve — három valós ortogonális mátrix egyikének valamely eleme.

Hat- $j$ -szimbólum elég sokféle csoportra definiálható. Felmerül a matematikai kérdés, hogy vajon értékeik meghatározzák-e a csoportot. Ez a probléma még nincs megoldva.

## SPINMENTES TENZOROPERÁTOROK MÁTRIXELEMEI

A tenzoroperátor mátrixelemeire vonatkozó (21.19) képletet ugyan át lehetne írni a három- $j$ -szimbólumok segítségével, azonban ugyanilyen egyszerű azt újra levezetni. Mivel a kérdéses operátor a spinkoordináták forgatása szempontjából skalár, azért annak az összes koordináta elforgatására vonatkozó  $\omega$  foka egyenlő a helykoordináták elforgatására vonatkozó  $p$  fokával. A lényegtelen kvantumszámokat,  $N$ -et,  $N'$ -t most elhagyjuk. Így

$$(\Psi_m^J, \mathbf{T}^\sigma \Psi_m^{J'}) = (\mathbf{O}_R \Psi_m^J, \mathbf{O}_R \mathbf{T}^\sigma \mathbf{O}_R^{-1} \mathbf{O}_R \Psi_m^{J'}) \quad (24.27)$$



azért, mert  $\mathbf{O}_R$  unitér.  $\Psi_m^{J'}$  és  $\Psi_m^J$  a  $D^{(J')}$ , illetőleg a  $D^{(J)}$  ábrázoláshoz tartozik,  $\mathbf{T}^\sigma$  pedig  $p$ -edfokú tenzoroperátor (lásd (21.16b)-t), így

$$\begin{aligned} (\Psi_m^{J'}, \mathbf{T}^\sigma \Psi_m^{J'}) &= \\ &= \sum_{\tau} \sum_{\mu\mu'} D^{(J)}(R)_{\mu m}^* D^{(p)}(R^{-1})_{\sigma\tau} D^{(J')}(R)_{\mu' m'} (\Psi_{\mu}^J, \mathbf{T}^\sigma \Psi_{\mu'}^{J'}), \end{aligned}$$

mert az uniteritás miatt  $D^{(p)}(R^{-1})_{\sigma\tau} = D^{(p)}(R)_{\tau\sigma}^*$ . Az egész csoportra integrálva a bal oldalon az  $\int dR = h$  tényező, a jobb oldalon pedig egy kétszer kontravariáns és egyszer kovariáns, valamint egy egyszer kontravariáns és kétszer kovariáns három- $j$ -szimbólum jelenik meg. Így

$$(\Psi_m^{J'}, \mathbf{T}^\sigma \Psi_m^{J'}) = (J^m, p^\sigma, J'_m) T_{JJ'}, \quad (24.27a)$$

ahol

$$T_{JJ'} = \sum_{\tau} \sum_{\mu\mu'} (-1)^{2J+2p} (J_\mu, p_\tau, J'^{\mu'}) (\Psi_\mu^J, \mathbf{T}^\sigma \Psi_{\mu'}^{J'}),$$

amely  $m, m', \sigma$ -tól független. A képlet csupán annyit követel, hogy  $J$  és  $J'$  jó kvantumszám legyen, és hogy az irreducibilis  $\mathbf{T}$  tenzoroperátornak az összes koordináták elforgatására vonatkozó foka  $\omega = p$  legyen. (24.27a)-ban  $T_{JJ'}$  (21.19) megfelelő mennyiségének  $(-1)^{J-p-J'} \sqrt{2J'+1}$ -szerese; különben a két egyenlet teljesen ekvivalens. Vegyük észre, hogy a skalárszorzat első tényezőjéből származó kovariáns komponens voltaképpen kontravariáns komponens szerepét játsza. Ennek az az oka, hogy amikor a skalárszorzatot számítjuk ki, akkor az első tényezőnél komplex konjugáltat kell venni.

Tegyük fel most, hogy a *Russell—Saunders*-csatolás érvényes, és hogy mind  $\Psi_m^J$ , mind pedig  $\Psi_m^{J'}$  (24.15b) mintájára oly  $\Xi_{\nu\mu}^{SL}$ , illetőleg  $\Xi_{\nu'\mu'}^{S'L'}$  segítségével állítható elő, amelyek külön spin- és külön pályakvantumszámmal rendelkeznek.  $\mathbf{T}^\sigma$  spinmentes operátor, vagy legalábbis skalár a spinkoordináták forgatásakor, tehát a (24.27) mátrixelem csak akkor nem tűnik el, ha  $S=S'$ ; így (24.15b) segítségével kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} (\Psi_m^J, \mathbf{T}^\sigma \Psi_m^{J'}) &= \\ &= \sqrt{2J+1} \sqrt{2J'+1} (J_m, S^\nu, L^\mu) (J'_m, S^{\nu'}, L'^{\mu'}) (\Xi_{\nu\mu}^{SL}, \mathbf{T}^\sigma \Xi_{\nu'\mu'}^{S'L'}). \end{aligned} \quad (24.28)$$

A jobb oldalon a skalárszorzat független  $J$ -től és  $J'$ -től, tehát nemcsak adott  $J$ -vel és  $J'$ -vel rendelkező állapotok, hanem két multipllett tetszőleges állapotainak a mátrixelemei is összehasonlíthatók egymással. A kérdéses állapotoknak nemcsak az  $m$  és  $m'$  mágneses kvantumszámjai, hanem a teljes impulzusmomentumot is különbözhhetnek;  $|J|S-L$ -től  $S+L$ -ig,  $J'$  pedig  $|S-L'|$ -től  $S+L'$ -ig minden értéket felvehet.

(24.28)-ban az első három- $j$ -szimbólum a skalárszorzat első tényezőjéből származik. Az egyenletnek „relativisztikus alakot” adhatunk, ha a kovariáns indexekből kontravariánsokat csinálunk és vizont. (24.18a)-hoz vezető számolás mintájára

$$(J_m, S^p, L^\mu) = (-1)^{2J}(J^m, S_p, L_\mu). \quad (24.28a)$$

( $(-1)^{2J}$  helyett  $(-1)^{2S+2L}$ -et is írhattunk volna; vagy a kovariáns, vagy a kontravariáns vektorok jelennek meg az exponensben.)  $T^\sigma$  a helykoordináták elforgatására nézve is  $p$ -ed fokú tenzor, így (24.27a)-t ismét alkalmazva

$$(\Xi_{\nu\mu}^{SL}, \mathbf{T}^\sigma \Xi_{\nu'\mu'}^{SL'}) = \delta_{\nu\nu'}(L^\mu, p^\sigma, L'_\mu) T_{SL, SL'}. \quad (24.29)$$

$T_{SL; SL'}$  nem csupán  $\mu, \sigma, \mu'$ -től független, hanem  $\nu$ -től is, hiszen  $\mathbf{T}^\sigma$  a spinváltozók tekintetében skalár. (24.27a), (24.29) és (24.28) összevetéséből adódik, hogy

$$\begin{aligned} (J^m, p^\sigma, J'_{m'}) T_{JJ'} = \\ = (-1)^{2J} \sqrt{2J+1} \sqrt{2J'+1} (J^m, S_p, L_\mu) (J'_{m'}, S^p, L'^{\mu'}) \times \\ \times (L^\mu, p^\sigma, L'_\mu) T_{SL; SL'}. \end{aligned} \quad (24.29a)$$

Ennek  $m, m'$  és  $\sigma$  vonatkozásában azonosságnak kell lennie. Így a (24.24b) azonosság felhasználásával és az előjelek figyelembevételével kapjuk, hogy

$$T_{JJ'} = (-1)^{2J-L+S+J'+p} \begin{Bmatrix} J & p & J' \\ L & S & L \end{Bmatrix} \sqrt{2J+1} \sqrt{2J'+1} T_{SL; SL'}. \quad (24.30)$$

Ez az általános képlet, amely a *Russel—Saunders*-csatolás esetén alkalmazható, megadja egy operátor két multipliett valamennyi állapotára vett mátrixelemeinek az arányát, ha ez az operátor a helykoordináták forgatására nézve  $p$ -ed fokú tenzor és a spinkoordináták forgatásakor invariáns.  $p=1$  esetén ezek a *Hönl—Kronig*-képletek. Hasonló képlet érvényes  $L$  és  $S$  szerepét felcserélve olyan operátorra is, amely a helykoordináták forgatásakor invariáns, azonban a spinkoordináták forgatásakor  $q$ -adfokú tenzorként transzformálódik. Ilyen operátor a spin és a külső mágneses tér kölcsönhatása ( $q=1$ ). A (23.24) *Landé*-képlet szorzója lényegében egy *Racah*-együttható, vagyis hat- $j$ -szimbólum. E tárgyat azonban nem részletezzük tovább, mert a legfontosabb eredményeket már az előző fejezetben közvetlenebb számolással megkaptuk.

## ÁLTALÁNOS KÉTOLDALÚ TENZOROPERÁTOROK

A hat- $j$ -szimbólumok tulajdonságai elvi szempontból igen érdekesek. Gyakorlati hasznuk attól függ, hogy hány részletproblémát egyszerűsítenek, mennyire fontosak ezek a problémák, és hogy milyen könnyedséggel lehet e szimbólumokat kezelni. A hat- $j$ -szimbólumok táblázatai nehezkesebbek, mint a legtöbb matema-

tikai táblázat, mert hat változótól függenek. Ebben a vonatkozásban még a vektorcsatolási együtthatóknál is nehézkesebbek, mert ez utóbbiak lényegében csak öt változótól függenek. A jelen szakasz problémája elvezet az úgynevezett kilenc- $j$ -szimbólumokhoz, ezek kilenc változótól függenek és a fenti megjegyzések még inkább érvényesek rájuk.<sup>16</sup>

Tekintsük most a  $\mathbf{T}^{\sigma\tau}$  kétoldalú tenzoroperátort, vagy ahogy azt már jeleztük (24.1)-ben, inkább a

$$\mathbf{T}_\omega^\tau = (\omega^\tau, q_\sigma, p_\sigma) \mathbf{T}_{qp}^{\sigma\tau} \quad (24.31)$$

irreducibilis tenzort, amely (24.1a) szerint transzformálódik mind a spin-, mind pedig a helykoordináták transzformációjakor.<sup>17</sup> A Russel—Saunders-csatolást feltéve  $\Psi_m^J$ -et és  $\Psi_{m'}^{J'}$ -t (24.15b) alapján ismét kifejezzük a megfelelő  $\Xi$ -ekkel. A tömör jelöléssel kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} & (\Psi_m^J, \mathbf{T}_\omega^\tau \Psi_{m'}^{J'}) = \\ & = \sqrt{2J+1} \sqrt{2J'+1} (J_m S \cdot L) (\omega^\tau q p) \times \\ & \times (J_{m'}^{J'}, S' \cdot L') (\Xi^{SL} \mathbf{T}_{qp} \Xi^{S'L'}). \end{aligned} \quad (24.32)$$

A hullámfüggvények kontravariáns komponenseit nem definiáltuk, így azok indexei mind alsók. Az utolsó mátrixelem így írható:

$$(\Xi_{\nu\mu}^{SL} \mathbf{T}_{qp} \Xi_{\nu'\mu'}^{S'L'}) = (S^\nu, q^\sigma, S_{\nu'}^\sigma) (L^\mu, p^\sigma, L_{\mu'}^\sigma) T_{SL; S'L'}, \quad (24.32a)$$

amely (24.27a), illetőleg (24.29) hasonmása. Írható még, hogy

$$(\Psi_m^J, \mathbf{T}_\omega^\tau \Psi_{m'}^{J'}) = (J^m, \omega^\tau, J_{m'}^{J'}) T_{JJ'}. \quad (24.32b)$$

Ez az egyenlet továbbra is érvényes, hiszen csak attól függ, hogy  $J$  és  $J'$  jó kvantumszámok-e. Számoljuk ki ismét  $T_{JJ'}$ -t  $T_{SL; S'L'}$  segítségével, és bizonyítsuk be, hogy (24.32) és (24.32b) jobb oldalai egyformán függenek  $m$ ,  $m'$ ,  $\tau$ -tól. (24.32) és (24.32b) jobb oldalait összekötő egyenlet alakja akkor lesz „relativisztikus”, ha (24.32) első három- $j$ -szimbólumában valamennyi index helyzetét megváltoztatjuk. Erre mindig szükség van olyan szimbólumoknál, amelyek skalárszorzat első tényezőjéből származnak; így esetünkben a  $(-1)^{2J}$  tényező jelenik meg:

$$\begin{aligned} (J, \omega, J') T_{JJ'} &= (-1)^{2J} \sqrt{2J+1} \sqrt{2J'+1} (JS \cdot L) \times \\ & \times (\omega q p) (J' S' \cdot L') (S \cdot q S') (L \cdot p L) T_{SL; S'L'}. \end{aligned} \quad (24.33)$$

<sup>16</sup> K. SMITH, J. W. STEVENSON, Argonne National Laboratory report 5776.

<sup>17</sup> Figyeljük meg, hogy (24.31)-ben az operátor a (24.1)-től az  $(-1)^{q-p-\omega} \sqrt{2\omega+1}$  tényezőben különbözik; ez (24.16)-ban szerepel.

A jobb oldal öt három- $j$ -szimbólumát összeszorozva, majd összegezve és elosztva a bal oldal három- $j$ -szimbólumával kapjuk lényegében a

$$\begin{Bmatrix} J & S & L \\ \omega & q & p \\ J' & S' & L' \end{Bmatrix} \quad (24.E.5)$$

kilenc- $j$ -szimbólumot. A kilenc- $j$ -szimbólum eltűnik, ha bármely sorának vagy bármely oszlopának három vektora nem alkot vektorháromszöget. A kilenc- $j$ -szimbólumok meghatározását és tulajdonságait nem taglaljuk. Inkább megmutatjuk, hogy (24.33) jobb oldalán a kifejezés miként tömöríthető hat- $j$ -szimbólumok segítségével olyan kifejezéssé, amelyben egyetlen három- $j$ -szimbólum van. Ez az eljárás minden ilyen kifejezésre alkalmazható, s egyetlen három- $j$ -szimbólumot tartalmazó invariáns egyenletet ad.

(24.33) jobb oldalán az első és az utolsó három- $j$ -szimbólum szorzata ugyanolyan alakú, mint a (24.24a)-ban szereplő szorzat, eltekintve a  $j$ -k egy ciklikus permutációjától. Ezt azonban (24.10a) segítségével rendbehozhatjuk:

$$(pL'L')(JSL) = (-1)^{2j} \sum_j (2j+1) \begin{Bmatrix} p & S & j \\ J & J' & L \end{Bmatrix} (pSj)(JL'j). \quad (24.34)$$

Vegyük észre, hogy (24.33) jobb oldalán a második három- $j$ -szimbólum tartalmazza  $p$ -t, a negyedik  $S$ -et, és mindkettő tartalmazza  $q$ -t. Így egy átcsatolási egyenlettel  $p$  és  $S$  közös három- $j$ -szimbólumba vihető át:

$$(S'Sq) \overset{\#}{(p\omega q)} = (-1)^{2p} \sum_j (2j+1) \begin{Bmatrix} S' & \omega & j \\ p & S & q \end{Bmatrix} (S'\omega j)(pSj). \quad (24.34a)$$

A két utolsó egyenlet szorzata  $p$  és  $S'$  indexeire történő megfelelő összegezéssel a (24.25) ortogonalitási összefüggés segítségével kontrahálható:

$$\begin{aligned} (p'L'L')(JS'L')(S'S.q')(p.\omega q.) = \\ = (-1)^{2j+2p} \sum_j (2j+1) \begin{Bmatrix} p & S & j \\ J & L' & L \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} S' & \omega & j \\ p & S & q \end{Bmatrix} (JL'j)(S'\omega j). \end{aligned} \quad (24.35)$$

E kifejezés felismerhető (24.33) jobb oldalán, de még  $S$  indexeinek helyzetét meg kell változtatni, így még a  $(-1)^{2S}$  tényező is megjelenik. Ha ezután még  $(J'S'L) = (S'L'J')$ -vel szorzunk és  $S'$  és  $L'$  indexeire kontrahálunk, akkor megkapjuk (24.33) öt három- $j$ -szimbólumának szorzatát:

$$(-1)^{2j+2p+2S} \sum_j (2j+1) \begin{Bmatrix} p & S & j \\ J & L' & L \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} S' & \omega & j \\ p & S & q \end{Bmatrix} (JL'j)(S'\omega j)(S'L'J').$$

Ez (24.24b) felhasználásával így írható:

$$(-1)^{2J+2\omega} \sum_j (-1)^{2j}(2j+1) \begin{Bmatrix} p & S & j \\ J & L' & L \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} S' & \omega & j \\ p & S & q \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J & \omega & J' \\ S' & L' & j \end{Bmatrix} (J\omega J').$$

$j$  és  $S'$  indexeinek helyzetét meg kellett változtatni, és ez még egy  $(-1)^{2j+2S'}$  tényezőt hozott be. Az exponens azonban egyszerűsíthető a kvantumszámokra vonatkozó feltételekkel, mely szerint ezeknek vektorháromszögeket kell alkotniuk. Végül kapjuk, hogy

$$T_{JJ'} = (-1)^{2\omega} \sqrt{2J+1} \sqrt{2J'+1} \times \sum_j (-1)^{2j}(2j+1) \begin{Bmatrix} p & S & j \\ J & L' & L \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} S' & \omega & j \\ p & S & q \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J & \omega & J' \\ S' & L' & j \end{Bmatrix} T_{SL,S'L'}. \quad (24.36)$$

Meg kell jegyeznünk, hogy (24.33) jobb oldalának tényezőit három lényegesen különböző módon csoportosíthatjuk, és ennek megfelelően a kilenc- $j$ -szimbólumot három különböző módon állíthatjuk elő mint három hat- $j$ -szimbólum szorzatainak az összegét. Azért választottuk a fenti csoportosítást, mert a következő számolást egyszerűbbé teszi.

Érdekes esethez jutnak, ha  $\omega=0$  vagyis a  $T$  operátor invariáns a spin- és helykoordináták együttes elforgatásakor. Erre példa a spin és a pályamenti mozgás kölcsönhatásának energiája. Ha  $\omega=0$ , akkor  $p=q$  és  $J=J'$ . Továbbá a második három- $j$ -szimbólum csak akkor nem tűnik el, ha  $S'$ ,  $\omega$  és  $j$  vektorháromszöget alkotnak, ezért az összegből csak a  $j=S'$  tag marad meg. A második és harmadik hat- $j$ -szimbólum kifejezését (24.26)-ból véve a hat- $j$ -szimbólum átrendezése után azt kapjuk, hogy

$$T_{JJ'} = (-1)^{J+L'+S+p} \frac{\sqrt{2J+1}}{\sqrt{2p+1}} \begin{Bmatrix} L & J & S \\ S' & p & L \end{Bmatrix} T_{SL,S'L'}. \quad (24.36a)$$

$p=1$  szolgáltatja a *Landé*-intervallumszabályt, a  $p=2$  eset a spin—spin-kölcsönhatásnak felel meg. A hat- $j$ -szimbólumok a spektroszkópia más részein is felbukkannak, így például a komplex spektrumokban a hullámfüggvények meghatározásánál, a magfizikában a  $\beta$ -bomlásnál, a kibocsátott részecskék vagy  $\gamma$ -kvantumok szögeloszlásában, a magreakciók elméletében és végül, de nem utolsón, az atommag hullámfüggvényének meghatározásánál is fontos szerepet játszanak. Részletesebb már korábban ismertettük e fejezetben.

## 25. AZ ÉPÍTKEZÉSI ELV

1. Az építkezési elv<sup>1</sup> lehetővé teszi, hogy az atomok energiaszintjeinek elhelyezkedését megbecsüljük. Megfigyelve a felhasadást a külső erőterekben, a kiválasztási szabályokat stb., elvileg meghatározhatók az egyes szintek jellemzői, mint például a pályaimpulzus-momentum kvantumszáma. Az olyan utalás azonban, hogy egy adott típusú vonal a spektrum melyik tartományában keresendő, ugyancsak hasznos lehet. Az építkezési elv ezt a célt szolgálja.

Az építkezési elv elsődleges jelentősége azonban nem abban rejlik, hogy felhasználható bonyolult színképek elemzésében, hanem abban, hogy az energiaszintek elhelyezkedése az atom legfontosabb fizikai és kémiai tulajdonságait határozza meg. Így például az alkálielemek erős elektropozitív jellege annak az eredménye, hogy atomjaik viszonylag kis energia felvételével képesek egy elektront leadni, vagyis az alapállapotuk nincs nagyon messze a legalacsonyabb ionizált állapot alatt. Fordítva, a nemesgázok tehetetlenségét a kémiai reakciókkal szemben az magyarázza, hogy ionizált és gerjesztett állapotaik és az alapállapot között különösen nagy az energiakülönbség. Ezt a gondolkodásmódot, amely egyébként az atomfizika legnagyobb részét jellemzi, N. BOHR indította el azzal, hogy megmagyarázta az elemek periódusos rendszerének legfontosabb vonásait. Az építkezési elv felfedezésének talán a legfontosabb állomásai a következők voltak: A *Landé—Sommerfeld*-vektormodell, a normális csatolásnak RASSELLTŐL és SAUNDERSTŐL származó megfogalmazása és az azonos pályák *Pauli*-féle kizárási elve. Az építkezési elv végleges megfogalmazása F. HUND kutatásainak eredménye.

Annak érdekében, hogy az energiaszintek elhelyezkedését, vagyis a

$$\sum_k \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_k} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_k^2} \right) - \frac{Ze^2}{r_k} \right\} \psi + \frac{1}{2} \sum_{i \neq k} \frac{e^2}{r_{ik}} \psi = E\psi \quad (25.1)$$

*Schrödinger*-egyenlet sajátértékeit megbeszélhessük, induljunk ki az egyszerűbb

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_0\psi &= (\mathbf{H}_1 + \mathbf{H}_2 + \dots + \mathbf{H}_n)\psi = E\psi \\ \mathbf{H}_k &= -\frac{\hbar^2}{2m_k} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_k^2} \right) - \frac{Ze^2}{r_k} \end{aligned} \quad (25.1a)$$

<sup>1</sup> Lásd a 17. fejezet 10. lábjegyzetét.

egyenletből ( $Z$  a magtöltés). Az utóbbiban az elektronok

$$W = \sum_{K=2}^n \sum_{i=1}^{k-1} \frac{e^2}{r_{ik}} \quad (25.1b)$$

kölcsönhatási energiáját elhanyagoltuk,<sup>2</sup> ennek hatását majd perturbációs eljárással vesszük figyelembe.

Az eljárás csak akkor jogosult, ha a mag potenciális energiája nagy a  $W$  kölcsönhatási energiához képest. Ez a feltétel akkor teljesül a legjobban, ha a  $Z$  magtöltés nagy és az elektronok száma kicsiny, vagyis ha az atom erősen ionizálva van. Az itt alkalmazásra kerülő közelítő eljárás alapvetően különbözik a 22. és 23. fejezetekben használt eljárástól; semmi köze sincs az

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137,0}$$

finomszerkezeti állandó kicsinségéhez, amely pedig oly kritikus szerepet játszott korábbi közelítéseink jogosult voltában. Ahogy az dimenziós meg gondolásokból belátható, az  $e$ ,  $\hbar$ ,  $m$  alapvető állandók (25.1) sajátértékében és annak minden közelítésében az

$$\frac{me^4}{\hbar^2} \quad (25.E.1)$$

alakban jelennek meg. Ez ugyanis az egyetlen energiadimenziójú kifejezés, amely  $m$ ,  $e$ ,  $\hbar$ -ból képezhető. (Az egyszerű *Schrödinger*-egyenletekben a  $c$  fénysebesség nem jelenik meg.) Ezért a közelítés, amelyet most vizsgálunk meg, nem vezet az energiának a finomszerkezeti állandó, vagy a természet bármely más kicsiny állandója szerint haladó sorfejtéséhez, eltekintve talán az erősen ionizált atomoktól, amikor  $1/Z$  szerinti sorfejtésnek tekinthető.

A (25.1) *Schrödinger*-egyenlet megoldását tűzük ki célul a jelen fejezetben. Ez képezte az előző fejezetek meg gondolásainak kiindulópontját (ez a „nem perturbált probléma”, másként a „durvaszerkezet”). Ebben a vonatkozásban azok a feltételek, amelyek mellett elvárható, hogy (25.1a) jó közelítést adjon (25.1)-nek, éppen ellentétesek azokkal a feltételekkel, amelyek mellett (25.1)-nek az előző fejezetekben tárgyalt *módosításai* pontosaknak tekinthetők. (25.1a) megoldásai szolgálnak megbízható kiindulásul (25.1) megoldásainak felkutatásához, ha (25.1b)-ben a  $W$  perturbáció kicsiny. Ekkor azonban (25.1) sajátértékei, amelyekre (25.1a) sajátértékei felhasadnak, egymáshoz közel helyezkednek el. Ezzel szemben a finomszerkezeti felhasadás számítása akkor válik a legfontosabbá, ha (25.1) sajátértékei egymástól távol vannak.

Ezek az előző fejezetek és a jelen fejezet közelítéseinek viszonyára vonatkozó megjegyzések csak tájékoztatóként szolgálnak; számos olyan eset fordulhat elő,

<sup>2</sup> Amint arra alább rámutatunk, ez túlságos egyszerűsítés.

amikor mindkét közelítés hasznos és jogosult, és számos olyan, amikor egyik sem az.

Van egy körülmény, amely igen előnyös az atomszintek építkezési elv segítségével történő kiszámításában, mégpedig az, hogy az elektronok kölcsönhatási energiájának nagy részét a mag potenciáljának módosításával figyelembe lehet venni. Ha például, a Li-atomban két úgynevezett  $K$ -elektront ( $N=1$ ) és egy erősen gerjesztett elektront tekintünk, akkor az utóbbi majdnem teljesen az  $e/r$  magpotenciál hatása alatt kering, mert a valódi  $3e/r$  potenciált a két  $K$ -elektron „leárnyékolja”, mivel ez utóbbiak majdnem biztosan a mag közvetlen szomszédságában tartózkodnak. Ily módon helyesebb (25.1a)-ban a  $Ze^2/r$  *Coulomb*-potenciál helyett a módosított potenciált használni. Természetesen, ha (25.1a)-ban ilyen helyettesítést csinálunk, akkor (25.1b)-t is megfelelőképpen meg kell változtatni ahhoz, hogy (25.1a)-val együtt ismét (25.1)-et kapjuk vissza. A leárnyékolás elméletét a kvantummechanikába először HARTREE illesztette bele. Ez az energiaszintekre és más atomi tulajdonságokra meglepően pontos értékeket szolgáltatott.<sup>3</sup>

Az építkezési elvnek általunk adott levezetése SLATER-től ered.<sup>4</sup> Noha sem a nem perturbált (25.1a) probléma, sem pedig a (25.1b) perturbáció nem tartalmazza a spinkoordinátákat semmilyen formában, SLATER mégis bevezeti azokat már a kezdet kezdetén. Ez a látszólagos bonyodalom voltaképpen nagymértékben egyszerűsíti a megfontolásokat, mivel kezdettől fogva az antiszimmetrikus sajátfüggvényekre korlátozhatjuk a figyelmünket. Ily módon sajátfüggvényeknek nem a  $\psi_{\nu,\mu}^{SL}$  függvényeket tekintjük (ezek az elektronok *Descartes*-koordinátáinak felcseréléseiből álló szimmetrikus csoport valamely  $\bar{\mathbf{A}}^{(S)}$  ábrázolásának bizonyos sorához tartoznak), hanem a 22. fejezetben bevezetett  $\bar{\mathcal{E}}_{\nu\mu}^{SL}$  függvényeket, amelyek a spinkoordinátákat is tartalmazzák, és az elektronok összes koordinátáinak permutációival szemben antiszimmetrikusak. A  $\bar{\mathcal{E}}_{\nu\mu}^{SL}$ -k multiplett rendszere a spinkoordináták  $\mathbf{Q}_R$  forgatásai során öltének testet: a  $\bar{\mathcal{E}}_{\nu\mu}^{SL}$ -k a  $\Phi_R$  transzformációk vonatkozásában  $\mathbf{D}^{(S)}$   $\nu$  sorához tartoznak.

2. Jelölje a  $\mathbf{H}_k$  operátor sajátfüggvényeit (lásd 17. fejezet 2. szakasz) az egyetlen  $b$  index:

$$\mathbf{H}_k \psi_b(x_k, y_k, z_k) = E_b \psi_b(x_k, y_k, z_k). \quad (25.2)$$

A  $b$  „pálya” így az  $N$  főkvantumszámot, az  $l$  pálya impulzusmomentumot és a  $\mu$  mágneses kvantumszámot jelenti. Feltesszük, hogy az árnyékolás feloldja a véletlen elfajulásokat, vagyis azonos  $N$ -hez, de különböző  $l$ -hez tartozó sajátértékek egybeesését (ilyen a hidrogénatom tisztán centrális *Coulomb*-terében fordul elő).

<sup>3</sup> D. R. HARTREE: Proc. Cambridge Phil. Soc. **24**, 89 (1928); J. C. SLATER: Phys. Rev. **35**, 210 (1930); V. FOCK: Z. Physik. **61**, 126 (1930); D. R. HARTREE: The Calculation of Atomic Structures. Wiley, New York, 1957.

<sup>4</sup> J. C. SLATER: Phys. Rev. **34**, 1293 (1929).



Így a különböző  $l$ -hez tartozó szintek még azonos  $N$  esetében is elkülönülnek. Mind a részletes elmélet, mind pedig a kísérletek azt mutatják, hogy az egyforma  $N$ -hez tartozó szintek közül a kisebb  $l$ -űek alacsonyabban helyezkednek el, mint a nagyobb  $l$ -ű szintek.  $\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2, \dots, \mathbf{H}_k$  csak abban különböznek egymástól, hogy más változókra hatnak, így sajátértékeik számszerűen ugyanazok és a sajátfüggvényeik is megegyeznek attól eltekintve, hogy más és más változók szerepelnek bennük.

Az  $s$  spinkoordináta bevezetésével minden  $\psi_b(x_k, y_k, z_k)$  függvényből két sajátfüggvény képezhető:

$$\psi_{b\sigma}(x_k, y_k, z_k, s_k) = \psi_b(x_k, y_k, z_k) \delta_{s_k\sigma}. \quad (25.3)$$

Tehát  $\mathbf{H}_0$ -nak az összes  $x_1, y_1, z_1, s_1, \dots, x_n, y_n, z_n, s_n$  változótól függő sajátfüggvényei  $\mathbf{H}_k$  sajátfüggvényeinek a szorzataként állnak elő:

$$\psi_{b_1\sigma_1 b_2\sigma_2 \dots b_n\sigma_n} = \psi_{b_1\sigma_1}(x_1, y_1, z_1, s_1) \psi_{b_2\sigma_2}(x_2, y_2, z_2, s_2) \dots \psi_{b_n\sigma_n}(x_n, y_n, z_n, s_n). \quad (25.4)$$

Bármely két sajátfüggvény,  $\psi_{b_1\sigma_1 \dots b_n\sigma_n}$  és  $\psi_{b'_1\sigma'_1 \dots b'_n\sigma'_n}$  ortogonális, ha valamiben is különböznek: ha  $b_i \neq b'_i$ , akkor a skalárszorzat az  $x_i, y_i, z_i$  változókra történő integrálás miatt, ha  $\sigma_i \neq \sigma'_i$ , akkor az  $s_i$ -re történő összegezés miatt tűnik el. (25.4) sajátfüggvények a  $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots, \sigma_n$  értékek valamennyi — azaz  $2^n$  számú — rendszerére az

$$E = E_{b_1} + E_{b_2} + \dots + E_{b_n} \quad (25.4a)$$

sajátértékhez tartoznak.

A *Hamilton*-operátor invariáns továbbá az elektronok  $\mathbf{O}_P$  permutációival szemben; az összes olyan sajátfüggvény, amelyet úgy kapunk, hogy az  $\mathbf{O}_P$  operátorokat alkalmazzuk  $\psi_{b_1\sigma_1 \dots b_n\sigma_n}$ -re, ugyancsak a (25.4a) sajátértékhez fog tartozni:

$$\mathbf{O}_P \psi_{b_1\sigma_1 \dots b_n\sigma_n}(1', 2', \dots, n') = \psi_{b_1\sigma_1}(1) \dots \psi_{b_n\sigma_n}(n). \quad (25.5)$$

Itt  $P$  az  $\begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ 1' & 2' & \dots & n' \end{pmatrix}$  permutáció,  $k$  pedig az  $x_k, y_k, z_k, s_k$  változókat jelöli.

A tényezők átrendezése (25.5) jobb oldalát  $\psi_{b_1\sigma_1}(1') \dots \psi_{b_n\sigma_n}(n')$ -be viszi át. Ha tehát  $1', 2', \dots, n'$  helyébe  $1, 2, \dots, n$ -et írunk, akkor

$$\mathbf{O}_P \psi_{b_1\sigma_1 \dots b_n\sigma_n}(1, 2, \dots, n) = \psi_{b_1\sigma_1}(1) \dots \psi_{b_n\sigma_n}(n). \quad (25.5a)$$

Világos, hogy (25.5a)

$$E_{b_1} + E_{b_2} + \dots + E_{b_n}$$

sajátértéke azonos a (25.4a) sajátértékkel.

Gyűjtsük össze a (25.4a) sajátértékhez tartozó ama sajátfüggvényeket, amelyek egymásból az elektronok permutációjával adódnak:

$$\psi_{b_1\sigma_1\dots b_n\sigma_n}, \mathbf{O}_{P_1}\psi_{b_1\sigma_1\dots b_n\sigma_n}, \mathbf{O}_{P_2}\psi_{b_1\sigma_1\dots b_n\sigma_n}, \dots \quad (25.6)$$

Az ilyen függvénycsaládot *konfigurációnak* nevezzük. A konfigurációt tehát  $n$  számú  $(b_k\sigma_k)$  szimbólum jellemzi:

$$(b_1\sigma_1)(b_2\sigma_2)\dots(b_n\sigma_n)=(N_1l_1\mu_1\sigma_1)(N_2l_2\mu_2\sigma_2)\dots(N_nl_n\mu_n\sigma_n), \quad (25.E.2)$$

a szimbólumok *sorrendje mellékes*. Világos, hogy bármelyik olyan (25.5a) sajátfüggvényből, amelyben már alkalmaztunk egy permutációt, pontosan azokat a sajátfüggvényeket kapjuk meg a változók permutációjával, mint  $\psi_{b_1\sigma_1\dots b_n\sigma_n}$ -ből. Ezért a konfiguráció (25.E.2) szimbólumában a  $b$ -k tetszőleges sorrendje előírható, így például az is, amelyben

$$N_i \leq N_{i+1}, \quad (25.7)$$

$$l_i \leq l_{i+1}, \quad \text{ha } N_i = N_{i+1},$$

$$\mu_i \leq \mu_{i+1}, \quad \text{ha } N_i = N_{i+1}, l_i = l_{i+1},$$

$$(25.7a)$$

$$\sigma_i \leq \sigma_{i+1}, \quad \text{ha } N_i = N_{i+1}, l_i = l_{i+1}, \mu_i = \mu_{i+1}.$$

Minden sajátfüggvény csak egyetlen konfigurációhoz tartozhatik hozzá, és a különböző konfigurációk sajátfüggvényei egymásra ortogonálisak, mivel két különböző (25.4) alakú függvény ortogonális egymásra.

Ha adott konfiguráció függvényeire az  $\mathbf{O}_P$  operátort alkalmazzuk, akkor az eredményül kapott függvények a konfiguráció eredeti függvényeinek a lineáris kombinációjaként kifejezhetők; ezek valójában maguk a konfigurációt alkotó függvények. Ily módon a (25.6) sorozathoz az  $\mathbf{O}_P$ -k csoportjának, tehát az  $n$ -edfokú szimmetrikus csoportnak valamilyen ábrázolása tartozik. Az eme ábrázolást redukáló mátrix segítségével a (25.6) függvények oly lineáris kombinációi képezhetők, amelyek az  $\mathbf{O}_P$ -k csoportjának irreducibilis ábrázolásaihoz tartoznak. Megfordítva, a (25.6) függvények eme „irreducibilis” függvények lineáris kombinációiként írhatók fel. A *Pauli*-elv miatt eme irreducibilis lineáris kombinációk közül csak az *antiszimmetrikusakra*, vagyis  $\mathbf{O}_{P\kappa}\psi_{b_1\sigma_1\dots b_n\sigma_n}$  antiszimmetrikus komponenseire van szükségünk. Ezeket (12.6) szerint így képezhetjük:

$$\sum_P \varepsilon_P \mathbf{O}_P \mathbf{O}_{P\kappa} \psi_{b_1\sigma_1\dots b_n\sigma_n} = \sum_P \varepsilon_P \mathbf{O}_{PP\kappa} \psi_{b_1\sigma_1\dots b_n\sigma_n}. \quad (25.8)$$

Itt  $\varepsilon_P$  értéke  $+1$  vagy  $-1$  aszerint, hogy  $P$  páros vagy páratlan permutáció; ez a (12.6)-ban szereplő  $D(R)_{\kappa\kappa}^*$  az antiszimmetrikus ábrázolásra. Egy konfiguráció va-

lamennyi függvényének (25.8) antiszimmetrikus komponense előjeltől eltekintve ugyanaz a függvény; ha  $P_{\pi} = E$  akkor (25.8) éppen a

$$\sqrt{n!} \cdot \chi_{b_1\sigma_1 \dots b_n\sigma_n} = \begin{vmatrix} \psi_{b_1\sigma_1}(1) & \psi_{b_1\sigma_1}(2) & \dots & \psi_{b_1\sigma_1}(n) \\ \psi_{b_2\sigma_2}(1) & \psi_{b_2\sigma_2}(2) & \dots & \psi_{b_2\sigma_2}(n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{b_n\sigma_n}(1) & \psi_{b_n\sigma_n}(2) & \dots & \psi_{b_n\sigma_n}(n) \end{vmatrix} \quad (25.8a)$$

determináns.<sup>5</sup>

Az  $\mathbf{O}_P \psi_{b_1\sigma_1 \dots b_n\sigma_n}$  függvény  $\psi_{b_1\sigma_1 \dots b_n\sigma_n}$ -től csak abban különbözik, hogy a változók fel vannak cserélve, tehát a megfelelő antiszimmetrikus lineáris kombináció (25.8)-tól csak abban különbözik, hogy az  $x_k, y_k, z_k, s_k$  változók függvényei nem a  $k$ -edik oszlopban állnak. Így az eredeti függvényhez az oszlopok átrendezésével juthatunk el, ami legfeljebb előjelváltással jár együtt.

Fordítva: a (25.6) függvényekből antiszimmetrikus kombináció csak (25.8a) alakban képezhető. Ha ugyanis  $F$  antiszimmetrikus, akkor az

$$F = \sum_P c_P \mathbf{O}_P \psi_{b_1\sigma_1 \dots b_n\sigma_n}$$

egyenlőség két oldalának antiszimmetrikus részét egymással egyenlővé téve azt kapjuk, hogy  $F$  egy állandótól eltekintve nem egyéb, mint  $\chi_{b_1\sigma_1 \dots b_n\sigma_n}$ , hiszen a jobb oldal minden tagjának antiszimmetrikus komponense  $\chi_{b_1\sigma_1 \dots b_n\sigma_n}$ .

Így adott konfiguráció függvényeiből legfeljebb egy antiszimmetrikus lineáris kombináció képezhető, sőt még egy sem, ha a (25.E.2) családban olyan  $i, k$  pár fordul elő, amelyre  $\sigma_i = \sigma_k$  és  $b_i = b_k$  (vagyis  $N_i = N_k, l_i = l_k, \mu_i = \mu_k$ ), mert ebben az esetben (25.8a)-ban két sor megegyezik, tehát a determináns zérus.

*Minden olyan konfiguráció tehát, amelyben  $b_i = b_k$  és  $\sigma_i = \sigma_k$  együtt egyetlen  $i, k$  párra sem teljesül, olyan állapotot szolgáltat, amelyet a Pauli-elv megenged. Az olyan konfigurációt, amelyben bármelyik  $i, k$  párra  $b_i = b_k$  és  $\sigma_i = \sigma_k$ , a Pauli-elv kizárja. Ez a Pauli-féle ekvivalenciaelv eredeti megfogalmazásban, amelyet a kvantummechanika kifejtése előtt csak a (25.1a) nem perturbált problémára, tehát olyan Hamilton-függvényre mondtak ki, amelyben az elektronok kölcsönhatása nem volt figyelembe véve, s amely így minden elektronhoz egy pályát rendelt hozzá. A kvantummechanikában a Pauli-elv eredeti formája csupán különleges esete annak az általános követelménynek, amely szerint minden elektronokból álló rendszer hullámfüggvényének antiszimmetrikusnak kell lennie.<sup>6</sup>*

A Pauli-elv eredeti alakjából következik, hogy olyan  $b_1, b_2, \dots, b_n$  sorozatok, amelyekben három pálya azonos,  $b_i = b_j = b_k$ , nem tartozhatnak megengedett kon-

<sup>5</sup> A  $\sqrt{n!}$  tényező a  $\chi_{b_1\sigma_1 \dots b_n\sigma_n}$  normálására szolgál. (A 25.8a) alakú kifejezést gyakran Slater-determinánsnak nevezik.

<sup>6</sup> W. HEISENBERG és P. A. M. DIRAC mutatott erre először rá. Megállapításaik a spektrálmélet csoportelméleti tárgyalásának alapjául szolgáltak.

figurációhoz, mert megengedett konfigurációban ekkor szükségképpen  $\sigma_i \neq \sigma_k$ ,  $\sigma_i \neq \sigma_j$  és  $\sigma_j \neq \sigma_k$ , ami lehetetlen, tekintve hogy a  $\sigma$ -k csak a  $-1, +1$  értékeket vehetik fel. Egy pályán legfeljebb két elektron tartózkodhatik.

3. Most már meghatározhatjuk ama megengedett állapotok számát, amelyeknek energiája (25.4a) volna, ha az elektronok között a kölcsönhatás eltűnnék. Ha a  $\mathbf{H}_k$ -knak (mint  $x_k, y_k, z_k$  függvényeinek)  $E_k$  sajátértékei mind egyszeresek lennének, akkor a  $\sigma$ -k különböző értékrendszereihez tartozó  $2^n$  konfiguráció közül a megengedettek kellene csak leszámolni. Ha több függvény sajátértéke  $E_k$ , akkor az  $E = E_{b_1} + E_{b_2} + \dots + E_{b_n}$  energiához tartozó minden lehetséges  $b$  kombinációt is figyelembe kell venni.<sup>7</sup>

Nemcsak arra vagyunk kíváncsiak, hogy a (25.4a) energiájú állapotból az elektronok közötti kölcsönhatás folytán hány állapot keletkezik, hanem arra is, hogy ezek milyen jellegűek, vagyis milyen a multipllett rendszerük és milyen a pályakvantumszámuk. Ez utóbbinak csak akkor van értelme, ha a rendszer forgásszimmetrikus, ami a bennünket elsősorban érdeklő atomoknál így is van.

A következő megfontolásban csak a spin- és a *Descartes*-koordináták elforgatásával, vagyis  $\mathbf{Q}_R$ -rel és  $\mathbf{P}_R$ -rel szemben mutatott szimmetriát használjuk fel. Az elektronok permutációival szemben mutatott szimmetriát nem vizsgáljuk. A *Descartes*-koordináták elforgatása csak a gömbszimmetrikus esetben szimmetriaoperáció, a spinkoordinátáké azonban mindig az, hiszen sem a (25.1a) kiinduló probléma, sem a (25.1b) perturbáció nem tartalmazza a spinkoordinátákat. Így az egész probléma invariáns olyan operátorokkal szemben, amelyek csak a spinkoordinátákra hatnak. Korlátozzuk vizsgálódásainkat a  $\mathbf{Q}_R$  forgatásokra, hiszen ezek már elegendőek az egyes perturbált szintek multipllett szerkezetének a meghatározásához. A megvizsgálandó teljes szimmetria az  $\mathbf{O}_p$ -nek a direkt szorzata a  $\mathbf{Q}_R$ -ekkel és izotrop esetben még a  $\mathbf{P}_R$ -ekkel is.

4. Tekintsük először az anizotrop esetet. Ha a nem perturbált  $E$  szint  $\chi_{b_1\sigma_1 \dots b_n\sigma_n}$  antiszimmetrikus kombinációira a  $\mathbf{Q}_R$  operátor hat, akkor ismét antiszimmetrikus sajátfüggvény adódik ugyanazzal a sajátértékkel, ezek tehát az eredeti függvények lineáris kombinációiként kifejezhetők. Az együtthatók a forgáscsoport ábrázolását alkotják. Ha a  $\mathbf{Q}_R$ -ek csoportjának  $\mathbf{D}^{(S)}$  irreducibilis ábrázolását ez az ábrázolás  $A_S$ -szer tartalmazza, akkor  $A_S$  szolgáltatja az  $S$  multipllett rendszer azon antiszimmetrikus szintjeinek számát, amelyet a perturbáció hozott létre az  $E = E_{b_1} + \dots + E_{b_n}$  energiájú szintből. A forgáscsoport valamely ábrázolásának irreducibilis komponensei a  $Z$  körüli forgatások mátrixaiból határozhatók meg. Ha e mátrixok

<sup>7</sup> Általában felteszik, hogy a  $b$ -knek csak olyan kombinációi adnak ugyanolyan energiát, amelynél az

$$E_{b_1} + E_{b_2} + \dots + E_{b_n} = E_{c_1} + E_{c_2} + \dots + E_{c_n}$$

egyenletben az energiák külön-külön — a bal és jobb oldalon — páronként megegyeznek.

között a kétdimenziós forgáscsoport ( $\exp(im\varphi)$ ) ábrázolása  $a_m$ -szer fordul elő, akkor a  $\mathbf{D}^{(S)}$  irreducibilis ábrázolást az egész ábrázolás  $A_S = a_S - a_{S+1}$ -szer tartalmazza (lásd a 15. fejezet 1. szakaszát).

Legyen  $R$  egy  $\alpha$  szögű forgás  $Z$  körül. Ekkor a  $\mathbf{Q}_R$  operátor a (25.6) konfiguráció függvényeit egyszerűen  $\exp\left[\frac{1}{2}i(\sigma_1 + \dots + \sigma_n)\Phi\right]$ -vel szorozza meg. Ugyanez érvényes a  $\chi_{b_1\sigma_1 \dots b_n\sigma_n}$  antiszimmetrikus kombinációra is, ez tehát a  $Z$  körüli forgatásoknak az  $m = \frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2 + \dots + \sigma_n)$  mágneses kvantumszámú ábrázolásához tartozik. Ha az  $E$  sajátértéknél  $a_m$  olyan megengedett konfiguráció van, ahol  $\sigma_1 + \sigma_2 + \dots + \sigma_n = 2m$ , akkor a perturbáció e szintet  $a_S - a_{S+1}$  szintre hasítja fel; ezek a spinkoordináták forgatásaira nézve  $\mathbf{D}^{(S)}$ -hez tartoznak.

A megelőző paragrafusokban az anizotrop esettel foglalkoztunk, lássunk hát olyan példát, amelyben  $\mathbf{H}_k$ -nak  $E_k$  sajátértékei mind egyszeresek. Négy elektron esetében egy kétszeresen és két egyszeresen betöltött pályára

$$b_1 = b_2 \neq b_3 \neq b_4; \quad b_1 \neq b_4$$

és a  $\sigma$ -k következő kombinációi adnak egy-egy antiszimmetrikus sajátfüggvényt:

### VII. táblázat

Példa négy elektron antiszimmetrikus kombinációira

$\sigma_1$	$\sigma_2$	$\sigma_3$	$\sigma_4$	$\frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4)$
-1	+1	-1	-1	-1
-1	+1	-1	+1	0
-1	+1	+1	-1	0
-1	+1	+1	+1	+1

Tekintve, hogy  $b_1 = b_2$  a konfigurációk leszámolásánál feltehetjük, hogy  $\sigma_1 \equiv \sigma_2$  (lásd (25.7a)-t), de a *Pauli*-elv miatt  $\sigma_1 \neq \sigma_2$ , tehát csak  $\sigma_1 < \sigma_2$  fordulhat elő.

Így

$$a_0 = 2; \quad a_1 = 1; \quad a_2 = a_3 = \dots = 0$$

és  $a_1 = 1$  számú szint van, amelynek ábrázolása  $\mathbf{D}^{(1)}$ , és  $a_0 - a_1 = 1$  szint, amelyé  $\mathbf{D}^{(0)}$ .

Az oly szint, amelynek  $2S+1$  antiszimmetrikus függvénye a  $\mathbf{Q}_R$ -ekre nézve  $\mathbf{D}^{(S)}$  szerint transzformálódik, az  $S$  multipliett rendszerhez tartozik. Ha ugyanis bevezetjük a spinkölcsönhatást, akkor általában (az anizotrop esetben)  $2S+1$  finomszerkezeti komponensre hasad fel. Könnyen bebizonyítható, hogy a multipliett rendszer definíciója azonos a korábbival. *A 22. fejezet szerint az  $s$ -ek minden olyan függvényének, amely a  $\mathbf{Q}_R$ -ekre nézve  $\mathbf{D}^{(S)}$ -hez tartozik, a  $\mathbf{Q}_P$ -kre nézve  $\mathbf{A}^{(S)*}$ -*

hoz kell tartoznia. Továbbá minden oly  $F$  antiszimmetrikus sajátfüggvénynek, amely a  $\bar{\Phi}_P$ -kre nézve  $\mathbf{A}^{(S)*}$ -hoz tartozik (lásd (12.10)-et),

$$\sum_P \sum_{\kappa} A^{(S)}(P)_{\kappa\kappa} \mathbf{Q}_P F = \frac{n!}{g_S} F \quad (25.9)$$

a  $\mathbf{P}_P$ -kre nézve  $\bar{\mathbf{A}}^{(S)}$ -hez kell tartoznia. Ez pedig éppen a multipllett rendszer definíciója! Az utóbbi állítás (25.9)-ből,  $F$  antiszimmetrikus voltából, (vagyis  $\mathbf{O}_P F = \varepsilon_P F$ ), a  $\mathbf{Q}_P = \mathbf{P}_{P-1} \mathbf{O}_P$  azonosságból és a (22.17) egyenletből következik. Tehát

$$\begin{aligned} \sum_P \sum_{\kappa} A^{(S)}(P)_{\kappa\kappa} \mathbf{P}_{P-1} \mathbf{O}_P F &= \sum_P \sum_{\kappa} A^{(S)}(P^{-1})_{\kappa\kappa}^* \mathbf{P}_{P-1} \varepsilon_P F = \\ &= \sum_P \sum_{\kappa} \bar{A}^{(S)}(P^{-1})_{\kappa\kappa}^* \mathbf{P}_{P-1} F, \end{aligned} \quad (25.9a)$$

mivel  $\varepsilon_P = \varepsilon_{P-1}$  és  $\mathbf{A}^{(S)}$  unitér.

A  $\mathbf{W}$  perturbáció hatására a  $\chi_{b_1 \sigma_1 \dots b_n \sigma_n}$ -ek helyes lineáris kombinációi egyszerűen a 22. fejezet azon  $\mathcal{E}^S$  függvényei lesznek, amelyeket a (25.1) *Schrödinger*-egyenlet spinmentes sajátfüggvényeiből képeztünk.

A Slater-módszer jelentős vonása, hogy alkalmazásakor a (25.1) *Schrödinger*-egyenlet szimmetriáját a *Descartes*-koordináták permutációival szemben egyáltalán nem kell megvizsgálni, ehelyett a spinkoordináták  $\mathbf{Q}_R$  forgatásaival kapcsolatos invarianciát vesszük szemügyre. Tekintjük például azt a kiválasztási szabályt, amely az optikai átmenetknél a szintek multipllett rendszereivel kapcsolatos (ez az interkombinációs tilalom). Ez a szabály abból ered, hogy a különböző multipllett rendszerekhez tartozó sajátfüggvények a  $\mathbf{Q}_R$ -ek vonatkozásában különböző ábrázolásokhoz tartoznak, és hogy a szorzás  $(x_1 + x_2 + \dots + x_n)$ -nel a  $\mathbf{Q}_R$ -ekkel szemben szimmetrikus, hiszen ez a *Descartes*-koordinátákat nem érinti. (Korábban az interkombinációs tilalmat abból vettük le, hogy a különböző multipllett rendszerekhez tartozó sajátfüggvények a *Descartes*-koordináták  $\mathbf{P}_P$  permutációiból álló csoportnak a különböző ábrázolásaihoz tartoznak.) Nem alkalmaztuk a Slater-módszert a jelzett szélsőséges alakban, mert az összes szimmetriatulajdonság és ezek minden lehetséges alkalmazása érdekel bennünket.

Noha kell olyan helyzeteknek létezniük, amelyekben a *Descartes*-koordináták  $\mathbf{P}_P$  permutációinak vizsgálata szélesebb érvényű következtetésekhez vezet, mint egyedül a  $\mathbf{Q}_R$ -eké, mégis meg kell látni, hogy a  $\mathbf{Q}_R$ -ek csoportja milyen mértékben használható fel oly eredmények levezetésére, amelyek közvetlenül a  $\mathbf{P}_P$ -k csoportjával szembeni invarianciából következnek.

A Slater-módszer alkalmazhatóságának lényeges követelménye az, hogy a tekintett részecskék belső koordinátái csak két értéket vehetnek fel. Ha olyan részecskéket vizsgálunk, amelyeknek három lehetséges orientációja van (ilyen például a nitrogénmag, amelynek spinimpulzus-momentuma  $\hbar$  és nem  $\frac{1}{2}\hbar$ ), akkor a  $\mathbf{Q}_R$ -eket definiáló egyenletben (21.6b)  $\mathbf{D}^{(1)}$  szerepelne  $\mathbf{D}^{(1/2)}$  helyett. Ez a jelen fejezet megfontolásait alig befolyásolná. Azonban azok a következtetések, amelyeket az ilyen elméletben a forgásinvarianciából (tehát a  $\mathbf{Q}_R$ -ekkel szembeni invarianciából) vonhatnánk le, jóval korlátozottabbak lennének, mint azok, amelyek a  $\mathbf{P}_P$ -kre vonatkozó invarianciából adódnak. Valójában ebben az esetben a *Schrödinger*-egyenlet számos szintje egybeesnék, és ezt az egybeesést egyedül a  $\mathbf{Q}_R$ -ek vizsgálatával nem lehetne megmagyarázni. Ekkor vagy további operátorok bevezetésére van szükség, vagy pedig a  $\mathbf{P}_P$  operátorokkal szembeni szimmetriát kell

felhasználni csak úgy, ahogyan azt az építkezési elv első levezetésekor tettük.<sup>8</sup> Ez az oka annak, hogy miért taglaltuk e könyvben mind a részecskék *Descartes*-koordinátáinak permutációit, mind pedig szimmetrikus csoport ábrázolásait és hogy miért bizonyítottuk be elektronokra expliciten a  $\mathbf{Q}_R$ -ek és a  $\mathbf{P}_P$ -k ekvivalenciáját.

5. A gömbszimmetrikus és az aszimmetrikus eset között az a fő különbség, hogy a gömbszimmetrikus esetben a csupán  $x_k, y_k,$  és  $z_k$  függvényének tekintett  $\mathbf{H}_k E_{lk}^{N_k}$  sajátértékei nem egyszeresek, hanem  $(2l_k+1)$ -szeresek,<sup>9</sup> és nemcsak a multiplált rendszert, hanem a teljes *Hamilton*-operátor szintjeinek pályaimpulzusmomentumát is meg kell határozni. A nem perturbált szinteket a pályák fő- és pályakvantumszámainak megadásával jellemezzük:

$$N_1 l_1, N_2 l_2, \dots, N_n l_n. \quad (25.E.4)$$

A (25.E.4) nem perturbált szintek konfigurációit úgy kapjuk meg, hogy ezek szimbólumaiban még  $\mu$  és  $\sigma$  minden lehetséges értéket felvehetnek:

$$(N_1 l_1 \mu_1 \sigma_1)(N_2 l_2 \mu_2 \sigma_2) \dots (N_n l_n \mu_n \sigma_n) = \quad (25.E.2)$$

$$= (b_1 \sigma_1)(b_2 \sigma_2) \dots (b_n \sigma_n); \quad (|\mu_k| < l_k, \sigma_k = \pm 1).$$

(25.E.2)-ben  $N_k, l_k$  és  $\mu_k$  értékét (25.7) korlátozza. Mivel csak megengedett konfigurációkkal kívánunk dolgozni, azért (25.7a) helyett írhatjuk, hogy

$$\sigma_i < \sigma_{i+1} \quad \text{ha} \quad N_i = N_{i+1}, l_i = l_{i+1}, \mu_i = \mu_{i+1}. \quad (25.7b)$$

Minden megengedett konfigurációra csupán egyetlen antiszimmetrikus (25.8a) sajátfüggvény létezik.

Alkalmazzuk a  $\mathbf{Q}_R \mathbf{P}_{R'}$  operátorokat a (25.E.4) típusú sajátfüggvények antiszimmetrikus lineáris kombinációira, és az eredményül kapott függvényt fejezzük ki az eredetiekkel:

$$\begin{aligned} & \mathbf{Q}_R \mathbf{P}_{R'} \mathcal{N}_{N_1 l_1 \mu_1 \sigma_1 \dots N_n l_n \mu_n \sigma_n} = \quad (25.10) \\ & = \sum_{\mu' \sigma'} \Delta(R, R')_{\mu' \sigma' \dots \mu' \sigma'; \mu_1 \sigma_1 \dots \mu_n \sigma_n} \mathcal{N}_{N_1 l_1 \mu'_1 \sigma'_1 \dots N_n l_n \mu'_n \sigma'_n} \end{aligned}$$

A  $\Delta(R, R')$  mátrixok ekkor a  $\mathbf{Q}_R$ -ek és  $\mathbf{P}_{R'}$ -k csoportjainak direkt szorzatát ábrázolják. Ha  $\Delta(R, R')$  a  $\mathbf{D}^{(S)}(R) \times \mathbf{D}^{(L)}(R')$  irreducibilis ábrázolást  $A_{SL}$ -szer tartal-

<sup>8</sup> Lásd E. WIGNER: *Z. Physik*, **43**, 624 (1927) 21§–25§; M. DELBRÜCK, ugyanott **51**, 181 (1928). Valamely konfigurációból eredő szintek e cikkben szereplő módszerekkel gyorsabban határozhatók meg. A jelen szakasz módszere (amely SLATERTŐL származik) azonban szemléletesebb és jobban memorizálható.

<sup>9</sup> Ha  $\mathbf{H}_k$  valóban (25.1) alakú volna, akkor az  $E(N_k l_k)$  ( $l_k = 0, 1, 2, \dots, N_k - 1$ ) sajátértékek egybeesnének. Feltettük azonban, hogy a *Coulomb*-tér eléggé le van árnyékolva ahhoz, hogy a sajátértékek szétváljanak.

mazza, akkor a  $W$  perturbáció hatására a (25.E.4) szint  $A_{SL}$  számú  $S$  multipllett rendszerhez és  $L$  pályakvantumszámhoz tartozó szintre hasad fel. A  $\chi$ -k megfelelő kombinációi szolgálnak első közelítésül a 22. fejezetben  $\Xi_{\nu\mu}^{SL}$ -vel jelölt mennyiségek kiszámításához.

Látni fogjuk, hogy az  $A_{SL}$  számok kiszámolásához ismét elegendő azokat a  $\Delta(R, R')$  mátrixokat meghatározni, amelyekben  $R$  és  $R'$  elforgatások  $Z$  körül. Ha  $R$  egy  $\alpha$  szögű forgatás  $Z$  körül, akkor

$$\begin{aligned} Q_{\{z00\}} \chi_{N_1 l_1 \mu_1 \sigma_1 \dots N_n l_n \mu_n \sigma_n} &= \\ &= e^{\frac{i}{2} (\sigma_1 + \dots + \sigma_n) \alpha} \chi_{N_1 l_1 \mu_1 \sigma_1 \dots N_n l_n \mu_n \sigma_n}. \end{aligned} \quad (25.11)$$

$P_{\{z'00\}} \psi_{\mu_1 \sigma_1}^{N_1 l_1} \dots \psi_{\mu_n \sigma_n}^{N_n l_n}$  kiszámításában  $P_{\{z'00\}}$ -t az egyes tényezőkre külön-külön alkalmazzuk; eredményül a tényezőt kapjuk szorozva  $\exp(i\mu_k \alpha')$ -vel. Így

$$\begin{aligned} P_{\{z'00\}} \chi_{N_1 l_1 \mu_1 \sigma_1 \dots N_n l_n \mu_n \sigma_n} &= \\ &= e^{i(\mu_1 + \dots + \mu_n) \alpha'} \chi_{N_1 l_1 \mu_1 \sigma_1 \dots N_n l_n \mu_n \sigma_n}, \end{aligned} \quad (25.11a)$$

mert ez az

$$(N_1 l_1 \mu_1 \sigma_1) (N_2 l_2 \mu_2 \sigma_2) \dots (N_n l_n \mu_n \sigma_n)$$

konfiguráció minden sajátfüggvényére, tehát ezek tetszőleges lineáris kombinációjára is igaz. A (25.11a) egyenlet azt fejezi ki, hogy az egyes elektronok impulzusmomentumainak  $Z$  komponensei additívek. (25.11)-ből és (25.11a)-ból következik, hogy

$$\begin{aligned} Q_{\{z00\}} P_{\{z'00\}} \chi_{N_1 l_1 \mu_1 \sigma_1 \dots N_n l_n \mu_n \sigma_n} &= \\ &= e^{\frac{i}{2} (\sigma_1 + \sigma_2 + \dots + \sigma_n) \alpha} e^{i(\mu_1 + \mu_2 + \dots + \mu_n) \alpha'} \chi_{N_1 l_1 \mu_1 \sigma_1 \dots N_n l_n \mu_n \sigma_n}. \end{aligned} \quad (25.12)$$

Azok a  $\Delta(R, R')$  mátrixok, amelyek a spin- és a *Descartes*-koordinátának  $\alpha$ , illetőleg  $\alpha'$  szögű  $Z$  körüli elforgatásának felelnek meg, diagonálisak; a  $\chi_{N_1 l_1 \mu_1 \sigma_1 \dots N_n l_n \mu_n \sigma_n}$  sajátfüggvénynek megfelelő elemük  $\exp[i(\nu\alpha + \mu\alpha')]$ , ahol

$$\nu = \frac{1}{2} (\sigma_1 + \sigma_2 + \dots + \sigma_n) \quad \text{és} \quad \mu = (\mu_1 + \mu_2 + \dots + \mu_n).$$

E mátrix átlóját úgy kapjuk meg, hogy összegezzük  $\exp[i(\nu\alpha + \mu\alpha')]$ -t az összes megengedett konfigurációra.  $\Delta(R, R')$  így kapott karaktereit ( $R, R'$  forgatások  $Z$  körül olyan) táblázatba foglalhatjuk össze, amilyent a 198. oldalon találunk. Itt minden  $\nu$ -höz egy sor és minden  $\mu$ -höz egy oszlop tartozik, a metszésüknél annyi kereszt van, ahány megengedett konfiguráció létezik az  $\frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2 + \dots + \sigma_n) = \nu$   $\mu_1 + \mu_2 + \dots + \mu_n = \mu$  feltételek mellett.



Példaként lássunk két elektront, amelyek a  $p$  állapotban vannak ( $l=1$ ) és nem-perturbált energiáik egyenlők. A megengedett konfigurációkat a VIII. táblázat tartalmazza.

VIII. táblázat

Két elfajult  $P$  állapotú elektron megengedett konfigurációi

Konfiguráció	$\mu_1$	$\sigma_1$	$\mu_2$	$\sigma_2$	$\mu$	$\nu$
1	-1	-1	-1	1	-2	0
2	-1	-1	0	-1	-1	-1
3	-1	-1	0	1	-1	0
4	-1	-1	1	-1	0	-1
5	-1	-1	1	1	0	0
6	-1	1	0	-1	-1	0
7	-1	1	0	1	-1	1
8	1	1	1	-1	0	0
9	-1	1	1	1	0	1
10	0	-1	0	1	0	0
11	0	-1	1	-1	1	-1
12	0	-1	1	1	1	0
13	0	1	1	-1	1	0
14	0	1	1	1	1	1
15	1	-1	1	1	2	0

A fő- és pályakvantumszámot a konfigurációk szimbólumaiból elhagytuk; ezek értéke minden esetben 2, illetőleg 1. Tehát  $(2\ 1\ \mu_k\ \sigma_k)$  helyett csupán  $(\mu_k\ \sigma_k)$ -t írtunk.

Az utolsó két oszlop  $\mu_1 + \mu_2 = \mu$ -t, illetőleg  $\frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2) = \nu$ -t tartalmazza. A IX. táblázatban a megfelelő metszésnél a VIII. táblázat minden sora egy kereszttel szerepel.

IX. táblázat

Két ekvivalens  $P$  elektron spin- és pályaimpulzus-momentumának  $Z$  komponense

$\nu$	$\mu$				
	-2	-1	0	1	2
-1		+	+	+	
0	+	++	+++	++	+
1		+	+	+	

Ez a táblázat a  $\mathbf{Q}_{\{\alpha 00\}} \mathbf{P}_{\{\alpha' 00\}}$  csoportelemeknek a karaktereit foglalja össze a  $\Delta(R, R')$  ábrázolásban. Másrészt ezen elem karaktere a  $\mathbf{D}^{(S)} \times \mathbf{D}^{(L)}$  irreducibilis ábrázolásban

$$\sum_{\nu\mu} [\mathbf{D}^{(S)}(\{\alpha, 0, 0\}) \times \mathbf{D}^{(L)}(\{\alpha', 0, 0\})]_{\nu\mu; \nu\mu} = \sum_{\mu=-L}^L \sum_{\nu=-S}^S e^{i(\nu\alpha + \mu\alpha')} \quad (25.13)$$

Ezt a *IX. táblázat* formájában olyan négyszöggel ábrázolnánk, amelyben mindenütt egy kereszt volna és  $\nu$   $-S$ -től  $+S$ -ig,  $\mu$  pedig  $-L$ -től  $+L$ -ig terjedne. A *IX. táblázatban* szereplő karaktert irreducibilis karakterek összegeként, vagyis mint egyszeres keresztből álló négyszögek összegeként felfogva, a  $\nu\mu$  metszénél a keresztetek  $a_{\nu\mu}$  száma az  $A_{SL}$  számok összege lesz;  $A_{SL}$  a  $\Delta(R, R')$ -ben előforduló ama  $\mathbf{D}^{(S)} \times \mathbf{D}^{(L)}$  ábrázolások száma, amelyekre  $s \cong |\nu|$  és  $L \cong |\mu|$ :

$$a_{\nu\mu} = A_{S,L} + A_{S+1,L} + A_{S+2,L} + \dots \\ + A_{S,L+1} + A_{S+1,L+1} + \dots + A_{S,L+2} + A_{S+1,L+2} + \dots \quad (25.14)$$

Itt  $A_{SL}$  ama  $S$  multiplett rendszerű és  $L$  pályakvantumszámú szintek számát is jelenti, amelyek a perturbáció hatására a (25.E.4) szintből keletkeznek. (25.14) szerint

$$A_{SL} = a_{SL} - a_{S+1,L} - a_{S,L+1} + a_{S+1,L+1}. \quad (25.14a)$$

Eszerint a  $\Delta(R, R')$  ábrázolás irreducibilis komponenseit teljesen meghatározzák azon elemek karakterei, amelyekre  $R$  és  $R'$  elforgatások  $Z$  körül, hiszen ezek a karakterek a (25.13) irreducibilis karakterekre csak egyféleképpen bonthatók fel.<sup>10</sup>

A *VIII. táblázat* szintjeire (25.14a) azt adja, hogy  $A_{11}=1$ ;  $A_{02}=1$ ;  $A_{00}=1$  és a többi  $A_{SL}$  zérus. Két ekvivalens  $p$  elektron<sup>11</sup> tehát egy  ${}^3P$  egy  ${}^1D$  és egy  ${}^1S$  szintet szolgáltat. A *X. táblázatban* az  $\exp [i(\nu\alpha + \mu\alpha')]$  ábrázolási karakterrel rendelkező szintek szimbólumait tüntettük fel a kereszttek helyett.

<sup>10</sup> Ez azért van, mert a  $\mathbf{Q}_R$ -ek és a  $\mathbf{P}_R$ -k direkt szorzatának minden osztálya tartalmaz olyan elemet, amelyben mind  $R$ , mind  $R'Z$  körüli forgatás. Mivel minden ábrázolásban egy osztály valamennyi elemének egyforma a karaktere, eme elemek karaktere meghatározza a teljes karaktert.

<sup>11</sup> Az  $l=0, 1, 2, 3, \dots$  pályakvantumszámú pályák neve rendre  $s, p, d, f, \dots$ . Két pálya akkor ekvivalens, ha főkvantumszámuk megegyezik. Így a *IX. táblázatban* szemügyre vett konfiguráció  $(Np, Np)$  vagy másként  $(Np)^2$ . A teljes rendszer szintjeit  $S, P, D, \dots$  jelöli annak megfelelően, hogy  $L=0, 1, 2, \dots 2S+1$  értékét felső bal oldali,  $J$  értékét alsó jobb oldali indexszel jelölik:  ${}^3P_0, {}^3P_1, {}^3P_2$  stb. Lásd még a 8. fejezetet.

$\nu$	$\mu$				
	-2	-1	0	1	2
-1			$3P$	$3P$	
0	$1D$	$1D^3P$	$1S^1D^3P$	$1D^3P$	
1		$3P$	$3P$	$3P$	$1D$

6. Meghatározhatjuk az így kapott szintek paritását is. Az egyelektron-probléma sajátfüggvényeinek paritását a pályaimpulzus-momentum  $l$  kvantumszáma adja meg (19.17):  $w = (-1)^l$ . Ezért ( $\mathbf{O}_I = \mathbf{P}_I$  a tükrözést jelenti):

$$\begin{aligned} \mathbf{O}_I \psi_{\mu_1 \sigma_1}^{N_1 l_1}(1) \dots \psi_{\mu_n \sigma_n}^{N_n l_n}(n) &= \mathbf{P}_I \psi_{\mu_1 \sigma_1}^{N_1 l_1}(1) \dots \mathbf{P}_I \psi_{\mu_n \sigma_n}^{N_n l_n}(n) = \\ &= (-1)^{l_1 + l_2 + \dots + l_n} \psi_{\mu_1 \sigma_1}^{N_1 l_1}(1) \dots \psi_{\mu_n \sigma_n}^{N_n l_n}(n), \end{aligned} \quad (25.15)$$

$\mu_k$ -től és  $\sigma_k$ -től függetlenül. A (25.E.4) sajátérték minden sajátfüggvényének paritása  $(-1)^{l_1 + l_2 + \dots + l_n}$  és az összes perturbált szint paritása is ennyi. Tehát a (25.E.4)-ből származó összes szint paritása pozitív, ha az egyes pályák pályakvantumszámainak  $l_1 + l_2 + \dots + l_n$  összege páros; a paritás negatív, ha az összeg páratlan. Ebből következik többek közt, hogy az ugyanazon (25.E.4) perturbálatlan szintből származó szintek között elektromos dipól-átmenet a *Laporte*-szabály miatt tiltott.

7. Körvonalazzuk végül az energiaperturbáció első közelítésének kiszámolását.

Jelölje  $\chi_{\nu\mu_1}, \chi_{\nu\mu_2}, \chi_{\nu\mu_3}, \dots$  azokat a  $\chi_{N_1 l_1 \mu_1 \sigma_1 \dots N_n l_n \mu_n \sigma_n}$  függvényeket, amelyekre  $\mu_1 + \mu_2 + \dots + \mu_n = \mu$  és  $\sigma_1 + \sigma_2 + \dots + \sigma_n = 2\nu$ . Ezek szerepelnek egy-egy kereszttel a IX. táblázat  $\nu\mu$  metszésénél. Ama  $f_{\nu\mu_1}, f_{\nu\mu_2}, \dots$ , helyes lineáris kombinációk, amelyek valamely  $\mathbf{D}^{(S)} \times \mathbf{D}^{(L)}$  ábrázolás  $\nu\mu$  sorához tartoznak, a  $\chi_{\nu\mu_1}, \chi_{\nu\mu_2}, \chi_{\nu\mu_3}, \dots$ , függvények lineáris kombinációiként írhatók fel:

$$f_{\nu\mu\kappa} = \sum_{\lambda} \mathbf{u}_{\kappa\lambda} \chi_{\nu\mu\lambda}. \quad (25.16)$$

A transzformációs mátrix unitér, mert mind a  $\chi_{\nu\mu}$ -k mind pedig az  $f_{\nu\mu}$ -k ortogonális rendszert alkotnak:

$$\begin{aligned} \delta_{\kappa\kappa'} &= (f_{\nu\mu\kappa}, f_{\nu\mu\kappa'}) = \sum_{\lambda\lambda'} (\mathbf{u}_{\kappa\lambda} \chi_{\nu\mu\lambda}, \mathbf{u}_{\kappa'\lambda'} \chi_{\nu\mu\lambda'}) = \\ &= \sum_{\lambda\lambda'} \mathbf{u}_{\kappa\lambda}^* \mathbf{u}_{\kappa'\lambda'} \delta_{\lambda\lambda'} = \sum_{\lambda} \mathbf{u}_{\kappa\lambda}^* \mathbf{u}_{\kappa'\lambda}. \end{aligned} \quad (25.17)$$

Az  $f_{\nu\mu}$  sajátértékében az energiaperturbáció az első közelítésben ( $f_{\nu\mu}, \mathbf{W}f_{\nu\mu}$ ). A perturbáció: energiák összege minden  $\kappa$ -ra, vagyis az olyan szintekre, amelyekre  $S \equiv |\nu|$  és  $L \equiv |\mu|$  az  $\mathbf{u}$  ismerete nélkül is kiszámolható:

$$\begin{aligned} \sum_{\kappa} (f_{\nu\mu\kappa}, \mathbf{W}f_{\nu\mu\kappa}) &= \sum_{\kappa} \sum_{\lambda\lambda'} \mathbf{u}_{\kappa\lambda}^* \mathbf{u}_{\kappa\lambda'} (\chi_{\nu\mu\lambda}, \mathbf{W}\chi_{\nu\mu\lambda}) = \\ &= \sum_{\lambda\lambda'} \delta_{\lambda\lambda'} (\chi_{\nu\mu\lambda}, \mathbf{W}\chi_{\nu\mu\lambda}) = \sum_{\lambda} (\chi_{\nu\mu\lambda}, \mathbf{W}\chi_{\nu\mu\lambda}). \end{aligned} \quad (25.18)$$

Ebből a (25.E.4)-ből eredő  $S$  multiplett rendszerű és  $L$  pályakvantumszámú szintek perturbációs energiáinak összegére következik, hogy

$$\sum_{\kappa} \Delta E_{SL\kappa} = \sum_{\lambda} [(\chi_{SL\lambda}, \mathbf{W}\chi_{SL\lambda}) - (\chi_{S+1L\lambda}, \mathbf{W}\chi_{S+1L\lambda}) - \quad (25.18a)$$

$$- (\chi_{SL+1\lambda}, \mathbf{W}\chi_{SL+1\lambda}) + (\chi_{S+1L+1\lambda}, \mathbf{W}\chi_{S+1L+1\lambda})],$$

amely (25.14a) hasonmása.

Ha a perturbálatlan probléma (25.E.4) szintjéből csak egyetlen  $S$  multiplett rendszerű és  $L$  pályakvantumszámú szint keletkezik, akkor ennek energiáját (25.18a) közvetlenül szolgáltatja; ebben az esetben (25.18a) megoldása csak kvadrátúra kérdése.

Ami (25.18a)-ban a skálaszorzatok kiszámítását illeti,

$$\begin{aligned} &(\chi_{N_1 l_1 \mu_1 \sigma_1} \dots N_n l_n \mu_n \sigma_n}, \mathbf{W}\chi_{N_1 l_1 \mu_1 \sigma_1} \dots N_n l_n \mu_n \sigma_n}) = \\ &= \frac{1}{n!} \sum_{P P'} (\varepsilon_P \mathbf{O}_P \psi_{\mu_1 \sigma_1}^{N_1 l_1}(1) \dots \psi_{\mu_n \sigma_n}^{N_n l_n}(n) \mathbf{W} \varepsilon_{P'} \mathbf{O}_{P'} \psi_{\mu_1 \sigma_1}^{N_1 l_1}(1) \dots \psi_{\mu_n \sigma_n}^{N_n l_n}(n)). \end{aligned} \quad (25.19)$$

A  $\mathbf{W}$ -vel kommutáló unitér  $\varepsilon_P \mathbf{O}_P$  operátor  $\varepsilon_P \mathbf{O}_P^{-1}$  gyanánt a második tényező elé átvihető és  $\varepsilon_{P'} \mathbf{O}_{P'}$ -vel összeolvasztható. Az összegezést most  $P^{-1}P' = T$ -re lehet elvégezni  $P'$  helyett, így egy  $n!$  tényező is megjelenik. Így (25.19) jobb oldala így alakítható át:

$$\frac{1}{2} (\psi_{\mu_1 \sigma_1}^{N_1 l_1}(1) \dots \psi_{\mu_n \sigma_n}^{N_n l_n}(n), \sum_{i \neq k} \mathbf{W}_{ik} \sum_T \varepsilon_T \mathbf{O}_T \psi_{\mu_1 \sigma_1}^{N_1 l_1}(1) \dots \psi_{\mu_n \sigma_n}^{N_n l_n}(n)).$$

Itt  $\mathbf{W}$ -t az  $i$ -edik és a  $k$ -edik elektron kölcsönhatásának megfelelő  $\mathbf{W}_{ik}$  tagok összegére bontottuk fel.

Tekintsünk most egy  $\mathbf{W}_{ik}$ -nak megfelelő tagot. Ezt részletezve

$$\begin{aligned} &\sum_T \sum_{S_1 \dots S_n} \int \dots \int \psi_{\mu_1 \sigma_1}^{N_1 l_1}(1)^* \dots \psi_{\mu_n \sigma_n}^{N_n l_n}(n)^* \times \\ &\times \mathbf{W}_{ik} \varepsilon_T \mathbf{O}_T \psi_{\mu_1 \sigma_1}^{N_1 l_1}(1) \dots \psi_{\mu_n \sigma_n}^{N_n l_n}(n) dx_1 \dots dz_n. \end{aligned} \quad (25.20)$$

Ha  $T$  itt nemcsak az  $i$ -edik és a  $k$ -edik elektront érinti (vagyis  $T$  nem az azonosság, sem pedig az  $(ik)$  transzpozíció), hanem mondjuk  $j$ -t  $j'$ -be transzformálja, akkor (25.20) az  $x_j, y_j, z_j$ -re történő integrálás és az  $s_j$ -re történő összegezés során eltűnik, mert a  $\psi_{\mu_j \sigma_j}^{N_j l_j}$  és a  $\psi_{\mu_{j'} \sigma_{j'}}^{N_{j'} l_{j'}}$  sajátfüggvények ortogonálisak egymásra, és megengedett konfigurációban nem fordulhat elő egyszerre, hogy  $N_j = N_{j'}; l_j = l_{j'}, \mu_j = \mu_{j'}$  és  $\sigma_j = \sigma_{j'}$ . Így a  $\mathbf{W}_{ik}$ -s tag kiszámolásánál elegendő a  $T$  helyébe az azonosságot és az  $(ik)$  transzpozíciót tenni. Mindkét esetben az integrálás a *Descartes*-koordinátákra, az összegezés a spinkoordinátákra (az  $i$ -edikről és a  $k$ -adiktól különböző összes elektronnra kiterjesztve) 1-et ad. Végül (25.20) így alakul:

$$\sum_{S_i} \int_{S_k} \dots \int \psi_{\mu_i \sigma_i}^{N_i l_i}(i) * \psi_{\mu_k \sigma_k}^{N_k l_k}(k) * \mathbf{W}_{ik}[\psi_{\mu_i \sigma_i}^{N_i l_i}(i) \psi_{\mu_k \sigma_k}^{N_k l_k}(k) - \\ - \psi_{\mu_k \sigma_k}^{N_k l_k}(i) \psi_{\mu_i \sigma_i}^{N_i l_i}(k)] dx_i dy_i dz_i dx_k dy_k dz_k. \quad (25.20a)$$

Ha most behelyettesítjük, hogy  $\psi_{\mu_i \sigma_i}^{N_i l_i}(i) = \psi_{\mu_i \sigma_i}^{N_i l_i}(\mathbf{r}_i) \delta_{S, \sigma_i}$  (ahol  $\mathbf{r}_i$  az  $i$ -edik elektron  $x_i, y_i, z_i$  *Descartes*-koordinátáit jelöli), akkor az  $s_i, s_k$  összegezés elvégezhető:

$$\int \dots \int \psi_{\mu_i}^{N_i l_i}(\mathbf{r}_i) * \psi_{\mu_k}^{N_k l_k}(\mathbf{r}_k) * \mathbf{W}_{ik}[\psi_{\mu_i}^{N_i l_i}(\mathbf{r}_i) \psi_{\mu_k}^{N_k l_k}(\mathbf{r}_k) - \\ - \delta_{\sigma_i \sigma_k} \psi_{\mu_k}^{N_k l_k}(\mathbf{r}_i) \psi_{\mu_i}^{N_i l_i}(\mathbf{r}_k)] dx_i dy_i dz_i dx_k dy_k dz_k. \quad (25.21)$$

Összeadva a (25.21) integrálokat az  $\binom{n}{2}$  számú  $(ik)$  párra és az összes olyan  $(N_1 l_1 \mu_1 \sigma_1)(N_2 l_2 \mu_2 \sigma_2) \dots (N_n l_n \mu_n \sigma_n)$  konfigurációra, amelyeknél  $\mu_1 + \mu_2 + \dots + \mu_n$  és  $\sigma_1 + \sigma_2 + \dots + \sigma_n = 2v$ , megkapjuk az összes olyan (25.E.4)-ből keletkező szint perturbációs energiájának (25.18) összegét, amelyre  $S \equiv |v|$  és  $L \equiv |\mu|$ . (25.18a) megadja az energia megváltozását az első közelítésben összegezve adott  $S$ -hez és  $L$ -hez tartozó valamennyi szintre.

Ami a számolás további részleteit és a bizonyos esetekben explicit számítások nélkül elvégezhető (25.21) integrálok kiértékelését illeti, az olvasónak SLATER<sup>4</sup> eredeti munkáját kell felütnie; ott még érdekes numerikus példákat is találhat.

## 26. AZ IDŐTÜKRÖZÉS

### AZ IDŐTÜKRÖZÉS ÉS AZ ANTIUNITÉR OPERÁTOROK

Az elszigetelt rendszerek szimmetriacsoportja az előző fejezetekben megvizsgált elforgatásokon és tükrözéseken kívül térbeli és időbeli eltolásokat, továbbá mozgó koordináta-rendszerre történő átszállásokat is tartalmaz.<sup>1</sup> Az ilyen rendszer állapotainak száma végtelen, az energiaoperátor spektruma folytonos. Erről már korábban, a 17. fejezetben szót ejtettünk. Az összes állapot végtelen halmazából véges állapotsokaság választható ki: ezeknek impulzusa zérus és energiája valamilyen meghatározott érték. A zérus teljes impulzusú rendszerek vizsgálata felel meg a spektroszkópia nézőpontjának. Ekkor ugyanis az atomi vagy molekuláris rendszereknek csupán a belső energiájával foglalkozunk, a kinetikus energiával pedig nem. Voltaképpen azonban a spektroszkópiai mérések pontosságát gyakran korlátozza az atomok vagy molekulák mozgása. Ilyen esetekben mindent megtesznek e mozgások sebességének a lehető legnagyobb mérvű csökkentésére.

Azzal, hogy a zérus impulzus esetére korlátozzuk a vizsgálatainkat, a mozgó koordináta-rendszerekre történő átszállásokat kiküszöböltük. Lényegében az eltolásokat is elintéztük, mert a zérus impulzusú rendszer hullámfüggvénye invariáns a térbeli eltolásokkal szemben, a  $t$  időeltolásnak az időben pedig a triviális  $\exp(-iEt/\hbar)$  szorzó felel meg; itt  $E$  az állapot energiája. Ahogyan azt már korábban megemlítettük, a zérus impulzus feltevése helyettesíthető valamilyen statikus külső erőternek, például rögzített mag terének feltételezésével. Ezzel a translációs szimmetriát és a mozgó koordináta-rendszerre történő átszállást ugyancsak elhagytuk a szimmetriaelemek közül. Mindenesetre úgy tűnik, hogy így a problémának a már megvizsgáltakon kívül nincs más szimmetriája. Ez azonban nem teljesen igaz: a  $t \rightarrow -t$  transzformáció még egy további szimmetriaelem. Ez a  $\varphi$  állapotot olyan  $\Theta\varphi$  állapotba transzformálja, amelyben minden sebesség (beleértve az elektronok „pörgését” is)  $\varphi$  sebességeihez képest ellentétes irányú. (Ily módon a „mozgás irányának megfordítása” talán szerencsésebb, azonban hosszabalmasabb kifejezés, mint az időtükrözés.) Az időtükrözés és az idő múlásával a rendszerben

<sup>1</sup> Ennek és a következő szakasznak a vizsgálatai nagymértékben hasonlóak a szerzőnek a Göttinger Nachrichten, Math-Phys.-ben az 546. oldalon megjelent cikkével, (1932). Lásd G. LÜDERS; Z. Physik. 133, 325 (1952).

bekövetkező változások között igen fontos összefüggés van. Az időbeli viselkedést a

$$\partial\varphi/\partial t = -(i/\hbar)\mathbf{H}\varphi \quad (26.1)$$

időfüggő *Schrödinger*-egyenlet írja le. Jelöljük  $\Psi_k$ -val a stacionárius állapotokat és  $E_k$ -val a megfelelő sajátértékeket. A  $t$  időtartam elmúltával a  $\varphi_0 = \sum_k a_k \Psi_k$  állapot megváltozik:

$$\varphi_0 = \sum_k a_k \Psi_k \rightarrow \varphi_t = \sum_k a_k e^{-iE_k t/\hbar} \Psi_k. \quad (26.1a)$$

A (26.1a) által leírt transzformációt „ $t$  tartamú időeltolásnak” nevezzük; ez unitér operáció.

Tetszőleges állapoton egymásután végrehajtott következő négy operáció eredményeként a rendszer az eredeti állapotba tér vissza. Az első operáció időtükrözés, a második  $t$  tartamú időeltolás, a harmadik ismét időtükrözés, a negyedik pedig ismét  $t$  tartamú időeltolás. A négy operáció együttvéve visszaállítja a rendszer eredeti állapotát, hiszen az idő múlása a tükrözés után a rendszert az időben visszafelé tereli. Másrészt a két időtükrözés egymást kiegyenlíti a sebességek irányának vonatkozásában. Mondhatjuk tehát, hogy

( $t$  tartamú időeltolás)  $\times$  (időtükrözés)  $\times$  ( $t$  tartamú időeltolás)  $\times$  (időtükrözés) egyenértékű az egységoperátorral. Másképpen

$$\begin{aligned} & (t \text{ tartamú időeltolás}) \times (\text{időtükrözés}) = \\ & = (\text{időtükrözés}) \times (-t \text{ tartamú időeltolás}). \end{aligned} \quad (26.1b)$$

A (26.1b) két oldalának megfelelő operátorok egymástól legfeljebb 1 abszolútértékű numerikus tényezőben különbözhetnek, amelynek nincs fizikai jelentősége.

Mivel  $\Theta$  szimmetriaoperátor, bármely két  $\Psi$  és  $\Phi$  állapot között az átmeneti valószínűséget változatlanul hagyja:

$$|(\Psi, \Phi)| = |(\Theta\Psi, \Theta\Phi)|. \quad (26.2)$$

Ekkor a 20. fejezet függelékéből következik, hogy  $\Theta$  úgy normálható, hogy a két (20.29) egyenlet közül valamelyiket kielégítse. A 20. fejezet függelékének a vizsgálata már arra mutatott, hogy  $\Theta$  a két lehetőség közül a *másodikat* elégíti ki, vagyis azt, amelyet minden tisztán térbeli szimmetria esetén ki lehetett zárni. Erre (26.1a) alapján is következtethetünk, de a függelék gondolatmenetét követve közvetlenebbül látható be. Ez akkor a legegyszerűbb, ha a  $\Psi_1, \Psi_2, \dots$  ortogonális függvényrendszert a *Hamilton*-operátor sajátfüggvényeivel azonosítjuk; ekkor a  $\Psi_i$ -k a stacionárius állapotok. A  $\Theta\Psi_i$ -k ugyancsak stacionárius állapotok,  $\Psi_i$  és  $\Theta\Psi_i$  ugyanahhoz az energiaértékhez tartozik.

Ha (20.29)-ből az első lehetőség is érvényes volna, akkor  $\Theta$  lineáris operátor volna. Ez ellentmondáshoz vezet, amiből következik, hogy  $\Theta$ -ra (20.29)-ből a második lehetőség érvényes. Az ellentmondást úgy mutathatjuk ki, hogy tetszőleges állapotot kifejtünk a stacionárius állapotok szerint:

$$\Phi_0 = \sum a_n \Psi_n. \quad (26.3)$$

Tegyük fel, hogy  $\Theta$  lineáris, ekkor

$$\Theta \Phi_0 = \sum a_n \Theta \Psi_n. \quad (26.3a)$$

Mivel  $\Theta \Psi_n$  is  $E_n$  energiájú stacionárius állapot, azért a  $t$  időtartam során  $\exp(-iE_n t/\hbar) \Theta \Psi_n$ -ba megy át, ezért a  $\Theta \Phi_0$  állapot  $t$  idő elmúltával átmegy a

$$\Phi_t = \sum a_n e^{-iE_n t/\hbar} \Theta \Psi_n \quad (26.3b)$$

állapotba. Ennek azonban ugyanannak az állapotnak kell lennie, amelyet a

$$\Phi_{-t} = \sum a_n e^{iE_n t/\hbar} \Psi_n$$

állapotból kapunk, ha rá  $\Theta$ -t alkalmazzuk. Mivel  $\Theta$  lineáris, azért ez így írható:

$$\Theta \Phi_{-t} = \sum a_n e^{iE_n t/\hbar} \Theta \Psi_n, \quad (26.3c)$$

amely általában nem állandósorozosa (26.3b)-nek, mert a kitevők előjelében eltérés van. Így ellentmondáshoz vezet az a feltevés, hogy  $\Theta$  lineáris, és  $\Theta$  (20.29) második lehetőségét elégíti ki.  $\Theta \Phi_0$  állandó szorzótól eltekintve a következő:

$$\frac{a_1}{a_1^*} (a_1^* \Theta \Psi_1 + a_2^* \Theta \Psi_2 + a_3^* \Theta \Psi_3 + \dots).$$

$\Theta \Phi_0$  definíciójában az állandó tényezővel szabadon rendelkezhetünk. Ezt  $a_1^*/a_1$ -nek választva

$$\Theta \Phi_0 = \Theta \left( \sum a_n \Psi_n \right) = \sum a_n^* \Theta \Psi_n. \quad (26.4)$$

Az olyan operátort, amely adott teljes és ortogonális  $\Psi_k$  rendszer mellett (26.4)-et tetszőleges  $a_1, a_2, \dots$  sorozatra kielégíti, *antilineáris* operátornak nevezzük. Ez hasonló egyenletet elégíti ki bármely függvényrendszerre vonatkozóan. Ha például

$$\Phi_1 = \sum b_n \Psi_n,$$

akkor

$$\alpha \Phi_0 + \beta \Phi_1 = \alpha \sum a_n \Psi_n + \beta \sum b_n \Psi_n = \sum (\alpha a_n + \beta b_n) \Psi_n,$$

tehát

$$\begin{aligned} \Theta(\alpha \Phi_0 + \beta \Phi_1) &= \Theta \left( \sum (\alpha a_n + \beta b_n) \Psi_n \right) = \\ &= \sum (\alpha a_n + \beta b_n)^* \Theta \Psi_n = \alpha^* \sum a_n^* \Theta \Psi_n + \beta^* \sum b_n^* \Theta \Psi_n = \\ &= \alpha^* \Theta \Phi_0 + \beta^* \Theta \Phi_1. \end{aligned}$$



Az utóbbi egyenlet, mely szerint

$$\Theta(\alpha\Phi_0 + \beta\Phi_1) = \alpha^*\Theta\Phi_0 + \beta^*\Theta\Phi_1 \quad (26.5)$$

bármely  $\Phi_0$  és  $\Phi_1$  mellett bármely  $\alpha, \beta$  számra érvényes, az antilineáris operátor szokásos meghatározása. Ez az egyenlet annak a következménye, hogy a  $\Theta$  időtükrözési operátorra (20.29)-ből a második feltétel érvényes, és hogy  $\Theta(\Sigma a_n \Psi_n)$ -ra a (26.4) normálást választottuk.  $\Theta$  antilineáris, de ezen kívül tetszőleges függvénypár esetén még (26.2)-t is kielégíti. Azokat az operátorokat, amelyek (26.2)-t és (26.5)-öt kielégítik, *antiunitér* operátoroknak nevezzük. Ezekre az operátorokra normálalakot vezetünk le.

A legegyszerűbb antiunitér operáció az, amikor a komplex konjugáltra térünk át. Ezt az operációt  $\mathbf{K}$ -val jelöljük.  $\mathbf{K}$ -nak az a hatása, hogy az utána következő kifejezést annak komplex konjugáltjával helyettesíti:

$$\mathbf{K}\varphi = \varphi^*. \quad (26.6)$$

Világos, hogy a  $\mathbf{K}$  operátor antilineáris. Mivel

$$(\mathbf{K}\Psi, \mathbf{K}\Phi) = (\Psi^*, \Phi^*) = (\Psi, \Phi)^*, \quad (26.6a)$$

azért  $\mathbf{K}$  (26.2)-t is kielégíti, tehát antiunitér. További fontos tulajdonsága, hogy

$$\mathbf{K}^2 = 1. \quad (26.6b)$$

Valóban:

$$\mathbf{K}^2\Phi = \mathbf{K}(\mathbf{K}\Phi) = \mathbf{K}\Phi^* = (\Phi^*)^* = \Phi.$$

Vizsgáljuk meg a  $\mathbf{K}$  és a  $\Theta$  antiunitér operátor és  $\mathbf{U} = \Theta\mathbf{K}$  szorzatát. Ez lineáris:

$$\begin{aligned} \mathbf{U}(\alpha\Phi_0 + \beta\Phi_1) &= \Theta\mathbf{K}(\alpha\Phi_0 + \beta\Phi_1) = \Theta(\alpha^*\Phi_0^* + \beta^*\Phi_1^*) = \\ &= \alpha\Theta\Phi_0^* + \beta\Theta\Phi_1^* = \alpha\Theta\mathbf{K}\Phi_0 + \beta\Theta\mathbf{K}\Phi_1 = \alpha\mathbf{U}\Phi_0 + \beta\mathbf{U}\Phi_1. \end{aligned}$$

Továbbá  $\Theta\mathbf{K}$  a skalárszorzat abszolútértékét változatlanul hagyja, mert mindkét tényezője rendelkezik ezzel a tulajdonsággal. Ily módon kielégíti a 20. fejezet függelékének a feltevéseit, nevezetesen (20.29) első feltételét, tehát unitér. Következésképpen minden antiunitér operátor, tehát  $\Theta$  is egy unitér operátor és a komplex konjugálás operátorának szorzataként írható fel:

$$\Theta\mathbf{K} = \mathbf{U}; \quad \Theta = \mathbf{U}\mathbf{K}. \quad (26.7)$$

Ez az antiunitér operátorok normál alakja. Ebből következik, hogy  $\Theta$  kielégíti (26.4)-et és (26.5)-t és hogy

$$(\Theta\Phi, \Theta\Psi) = (\mathbf{U}\mathbf{K}\Phi, \mathbf{U}\mathbf{K}\Psi) = (\mathbf{K}\Phi, \mathbf{K}\Psi),$$

tehát (26.6a) minden antiunitér operátorra érvényes, vagyis

$$(\Theta\Phi, \Theta\Psi) = (\Phi, \Psi)^* = (\Psi, \Phi). \quad (26.8)$$

Megjegyezzük továbbá, hogy két antiunitér operátor szorzata unitér:

$$U_1 K U_2 K \Phi = U_1 K U_2 \Phi^* = U_1 (U_2 \Phi^*)^* = U_1 U_2^* \Phi,$$

vagyis

$$U_1 K U_2 K = U_1 U_2^*. \quad (26.9)$$

Hasonlóképpen unitér és antiunitér operátor szorzata antiunitér.

Az időtükrözés operátorának még egy fontos tulajdonsága van: bár  $\Theta \Phi$  általában nem ugyanaz az állapot, mint  $\Phi$ , mindazonáltal a  $\Theta^2 \Phi = \Theta \Theta \Phi$  megegyezik a  $\Phi$  állapottal. Ezért  $\Theta^2 \Phi$  csak állandó tényezőben különbözhet  $\Phi$ -től. Megmutatjuk, hogy ez a tényező vagy  $+1$  vagy pedig  $-1$ . Ha  $\Theta = UK$ , akkor

$$\Theta^2 = UKUK = UU^* = c\mathbf{1}. \quad (26.10)$$

$U$  unitér volta miatt  $UU^\dagger = \mathbf{1}$ , tehát (26.10) azt jelenti, hogy  $U^* = cU^\dagger$  vagy  $U = cU'$ , ennek transzponáltja  $U' = cU$ , tehát  $U = cU' = c^2U$ . Ez azt adja, hogy  $c = \pm 1$ , tehát  $U$  vagy szimmetrikus, vagy antiszimmetrikus és

$$\Theta^2 = \pm \mathbf{1}. \quad (26.10a)$$

Az olvasó fel fogja ismerni a (24.3b)-ben már alkalmazott indokolást. Később majd kitűnik, hogy a felső előjel érvényes az egyszerű *Schrödinger*-egyenletben, valamint a spint tekintetbe vevő elméletben akkor, ha az elektronok száma páros. Az első előjel érvényes az olyan elméletben, amely a spint figyelembe veszi és az elektronok, vagy még általánosabban a félegész spinű részecskék száma páratlan.

A (26.10a) összefüggés csak magára az időtükrözésre igaz, nem pedig az időtükrözésnek és más szimmetriaoperátornak a szorzatára. Ez az időtükrözésnek, mint fizikai operációnak az involúciós<sup>2</sup> természetéből következik. (Két egymásutáni időtükrözés helyreállítja az eredeti állapotot.) Ezt a tényt fejezi ki a  $\Theta^2 = c\mathbf{1}$  egyenlet. Az azonban, hogy  $c$  csak  $+1$  vagy  $-1$  lehet,  $\Theta$  antiunitér jellegének matematikai következménye. A helyzet teljesen különböző attól, amellyel a forgatásokról találkoztunk. Ha  $R$  egy  $\pi$  szögű forgatás, akkor mint fizikai operáció involúciós. Tekintve, hogy  $O_R$ -ben egy tényező szabadon marad, úgy lehetne  $O_R$ -et normálni, hogy  $O_R^2 = \mathbf{1}$  teljesüljön. Valójában a 20. fejezetben végrehajtott normálás folytán páros elektronra  $O_R^2 = \mathbf{1}$ , páratlan  $O_R^2 = -\mathbf{1}$ . Ez azonban a normálás eredménye, míg (26.10a) automatikusan teljesül. Valóban, ha  $\Theta$  helyett  $\omega\Theta$ -t használunk, ahol  $|\omega| = 1$  (amely megengedett), akkor sem változik meg  $\Theta^2$ :  $\omega\Theta\omega\Theta = \omega\omega^*\Theta\Theta = \Theta^2$ .

<sup>2</sup> Involúciónak vagy involutorikusnak akkor nevezzük az operátort, ha négyzete az egységoperáció.

## AZ IDŐTÜKRÖZÉS OPERÁTORÁNAK MEGHATÁROZÁSA

Az időtükrözés szempontjából a fizikai mennyiségeknek két fontos osztályát különböztetjük meg. A helykoordináták, a teljes energia és a kinetikus energia tartozik az első osztályba. Annak valószínűsége, hogy e mennyiségek valamilyen  $\lambda$  értéket vegyenek fel,  $\varphi$ -re és  $\Theta\varphi$ -re egyforma, akármilyen legyen is  $\varphi$ . E mennyiségek nem függenek az időtől, vagy pedig az időváltozónak csak páros hatványát tartalmazzák. Ennek eredményeként a mozgás irányának a megváltoztatása nem érinti ezeket a mennyiségeket. A sebesség, az impulzus, az impulzusmomentum és a spinnek adott irányú komponense tartozik az operátorok második osztályába. Ha  $\varphi$ -re ezek valamelyikének értéke  $\lambda$ , akkor  $\Theta\varphi$ -re ez  $-\lambda$  lesz. E mennyiségek az időváltozónak páratlan hatványát tartalmazzák. Elképzelhetők természetesen olyan fizikai mennyiségek is — mint például egy koordináta plusz egy sebesség —, amelyek egyik osztályba sem sorolhatók. Ilyen mennyiségekkel azonban a továbbiakban nem foglalkozunk.

Az első osztályba tartozó mennyiségeknek megfelelő operátorok felcserélhetők  $\Theta$ -val. Valóban, ha  $\mathbf{q}$  ilyen operátor és  $\psi_n$  az az állapot, amelyben  $\mathbf{q}$  a  $\lambda_n$  értéket veszi fel, akkor  $\mathbf{q}\psi_n = \lambda_n\psi_n$ . Tekintve, hogy  $\Theta\psi_n$ -ra  $\mathbf{q}$  ugyancsak a  $\lambda_n$  értéket veszi fel, ezért  $\mathbf{q}\Theta\psi_n = \lambda_n\Theta\psi_n$ . Ha  $\varphi$  tetszőleges hullámfüggvény:  $\varphi = \sum a_n\psi_n$ , akkor  $\mathbf{q}$  lineáris volta miatt

$$\Theta\mathbf{q}\varphi = \Theta\mathbf{q} \sum a_n\psi_n = \Theta \sum a_n\lambda_n\psi_n = \sum a_n^*\lambda_n\Theta\psi_n. \quad (26.11a)$$

tekintve, hogy  $\lambda_n$  valós. Másrészt

$$\mathbf{q}\Theta\varphi = \mathbf{q}\Theta \sum a_n\psi_n = \mathbf{q} \sum a_n^*\Theta\psi_n = \sum a_n^*\mathbf{q}\Theta\psi_n = \sum a_n^*\lambda_n\Theta\psi_n. \quad (26.11b)$$

Következésképpen, ha  $\mathbf{q}$  az első osztály operátora, akkor

$$\Theta\mathbf{q} = \mathbf{q}\Theta. \quad (26.11)$$

Viszont, ha  $\mathbf{p}$  a második osztály operátora, akkor ugyanez a megfontolás ahhoz vezet, hogy

$$\Theta\mathbf{p} = -\mathbf{p}\Theta, \quad (26.12)$$

vagyis  $\Theta$  ezekkel az operátorokkal antikommutál. Az előző indokolás csak akkor érvényes szigorúan, ha  $\mathbf{q}$ -nak és  $\mathbf{p}$ -nek pontspektruma van, azonban bebizonyítható, hogy (26.11) és (26.12) az első, illetőleg a második osztály valamennyi operátorára teljesül.

Tekintsük először az egyszerű *Schrödinger*-elméletet, amelyben a spint nem

vesszük figyelembe. Legyen  $\Theta = \mathbf{UK}$  és  $x$  bármelyik helykoordináta, ekkor  $\Theta x = x\Theta$  következtében

$$\mathbf{UK}x\varphi = \mathbf{U}x\varphi^* = x\mathbf{UK}\varphi = x\mathbf{U}\varphi^*, \quad (26.13)$$

tehát  $\mathbf{U}$  felcserélhető az olyan operációval, amely *szorzás* egy helykoordinátával. A  $(\hbar/i)\partial/\partial x$  impulzusoperátor a második operátorosztályhoz tartozik, tehát (26.12) szerint

$$\begin{aligned} \mathbf{UK}(\hbar/i)\partial\varphi/\partial x &= -(\hbar/i)\mathbf{U}\partial\varphi^*/\partial x = \\ &= -(\hbar/i)(\partial/\partial x)\mathbf{UK}\varphi = -(\hbar/i)\partial(\mathbf{U}\varphi^*)/\partial x. \end{aligned} \quad (26.13a)$$

Az impulzusoperátorban  $i$  kiejti (26.12) mínusz előjelét, s így  $\mathbf{U}$  a bármely helykoordináta szerinti *differenciálás* operátorával is felcserélhető. Ebből arra következtetünk, hogy  $\mathbf{U}$  egyszerűen szorzás valamilyen  $1$  abszolútértékű állandóval. Ezt az állandót tetszés szerint választhatjuk meg; legyen hát  $1$ -gyel egyenlő. Így a spint figyelmen kívül hagyó elméletben

$$\Theta = \mathbf{K}; \quad \Theta\varphi = \varphi^*. \quad (26.14)$$

Ez azt mutatja, hogy a stacionárius állapotok hullámfüggvényei valamennyien valósak választhatók. Ez esetünkben meglehetősen nyilvánvaló következtetés, hiszen a *Hamilton*-operátor valós. Helyénvaló azonban megjegyeznünk, hogy (26.14) csak akkor érvényes, ha a koordináta operátorát  $x$ , az impulzus operátorát pedig  $(\hbar/i)\partial/\partial x$  alakúnak tételezzük fel (lásd a 4. fejezetet). Ha „impulzuskoordinátákat” használunk, tehát a koordinátaoperátorokat  $i\hbar\partial/\partial p$ -vel, az impulzusoperátorokat pedig a  $p$  változókkal való szorzással helyettesítjük, akkor ha  $\Theta = \mathbf{UK}$  jelölve  $\mathbf{U}$  nem az egységoperátor lesz, hanem  $p$  helyébe  $-p$ -t ír be:

$$\mathbf{U}\varphi(-p_1, -p_2, \dots, -p_f) = \varphi(p_1, p_2, \dots, p_f). \quad (26.14a)$$

Tekintsük most az elméletet, amely a spint is figyelembe veszi. Az  $\mathbf{U}$  operátornak (26.13)-at és (26.13a)-t most is ki kell elégítenie, de ezek az egyenletek nem elégségesek  $\mathbf{U}$  teljes meghatározásához, csupán arra utalnak, hogy  $\mathbf{U}$  nem hat a *Descartes*-(hely)-koordinátákra, a spinkoordinátákra azonban hathat. Ebben a vonatkozásban éppen ellentétes jellegű a 20. fejezet spinmentes operátoraival.  $\Theta = \mathbf{UK}$  meghatározása érdekében meg kell vizsgálnunk az  $s_{1x}, s_{1y}, s_{1z}, \dots, s_{nx}, s_{ny}, s_{nz}$  spinváltozók viselkedését időtükrözéskor. A spinváltozók, akár csak az impulzusmomentum, a második operátorosztályhoz tartoznak, tehát  $\Theta$ -val antikommutálnak. Az  $s_{ix}$ -ek az összes  $i(=1, 2, \dots, n)$  esetében valósak, tehát

$$\Theta s_{ix} = \mathbf{K} s_{ix} = \mathbf{U} s_{ix} \mathbf{K}.$$

Ennek  $-s_{ix}\Theta = -s_{ix}\mathbf{UK}$ -val kell egyenlőnek lennie, tehát  $s_{ix}$  *antikommutál*  $\mathbf{U}$ -val. Ugyanez igaz az  $s_{iz}$ -kre is, mert ezek is valósak. Ezzel szemben az imaginá-

rius  $s_{iy}$ -ok felcserélhetőek U-val. Tehát

$$\mathbf{U}s_{ix} = -s_{ix}\mathbf{U}; \mathbf{U}s_{iy} = s_{iy}\mathbf{U}; \mathbf{U}s_{iz} = -s_{iz}\mathbf{U}. \quad (26.13b)$$

Egy e követelményeket teljesítő operátor az összes imaginárius spinoperátor szorzata:

$$\mathbf{U} = \mathbf{s}_{1y}\mathbf{s}_{2y}\mathbf{s}_{3y}\dots\mathbf{s}_{ny}. \quad (26.15)$$

Ez U többszöröseitől eltekintve valójában az egyetlen olyan spinmentes operátor, amely a (26.13b) egyenletek közül bármely kettőt kielégíti. Tegyük fel, hogy ezen egyenleteknek létezik egy másik  $\mathbf{U}_1\mathbf{U}$  megoldása is. Ekkor következik, hogy  $\mathbf{U}_1$ -nek valamennyi  $s_{ix}$ ,  $s_{iy}$ ,  $s_{iz}$ -vel, tehát a

$$c_1\mathbf{s}_{1z} + c_2\mathbf{s}_{2z} + \dots + c_n\mathbf{s}_{nz} \quad (26.E.1)$$

kifejezéssel is felcserélhetőnek kell lennie a  $c$ -k tetszőleges értéke mellett. Az olyan mátrix azonban, amely az összes ilyen mátrixszal felcserélhető, diagonális, mert a  $c$ -k megfelelő választásával elérhető, hogy (26.E.1)-nek ne legyen két egyenlő diagonális eleme. Másrészt

$$(\mathbf{s}_{1y} + \mathbf{s}_{1z})(\mathbf{s}_{2y} + \mathbf{s}_{2z})\dots(\mathbf{s}_{ny} + \mathbf{s}_{nz}) \quad (26.E.2)$$

egyetlen mátrixeleme sem tűnik el, tehát csak az állandó mátrix cserélhető fel mind (26.E.1)-gyel, mind pedig (26.E.2)-vel. Mivel  $\Theta$ -ban van még egy szabadon választható állandó, azért írhatjuk, hogy

$$\Theta = \mathbf{s}_{1y}\mathbf{s}_{2y}\dots\mathbf{s}_{ny}\mathbf{K}, \quad (26.15a)$$

vagyis

$$\Theta\Phi(x_1, y_1, z_1, s_1, \dots, x_n, y_n, z_n, s_n) = \quad (26.15b)$$

$$= i^{-s_1-s_2-\dots-s_n}\Phi(x_1, y_1, z_1, -s_1, \dots, x_n, y_n, z_n, -s_n)^*.$$

Könnyen bebizonyítható, hogy  $\Theta^2 = 1$ , ha  $n$  páros;  $\Theta^2 = -1$ , ha  $n$  páratlan. Létezik  $\Theta$ -nak egy másik alakja is, amely abból adódik, hogy  $\mathbf{D}^{(1/2)}(\{0, \pi, 0\}) = i\mathbf{s}_y$ . Tekintve, hogy  $\mathbf{Q}_{\{0, \pi, 0\}}\mathbf{D}^{(1/2)}(\{0, \pi, 0\})$  alkalmazását jelenti az összes spinváltozóra, az összevetés (26.15a)-val azt mutatja, hogy

$$\Theta = (-i)^n\Phi_{\{0, \pi, 0\}}\mathbf{K}. \quad (26.15c)$$

Vezessük le végül az időtükrözés és a koordináta-rendszer elforgatásának megfelelő  $\mathbf{O}_R$  vagy  $\mathbf{O}_u$  operátorok szorzatai között fennálló összefüggéseket. A forgatások és az időtükrözés mint fizikai operációk egymással felcserélhetőek, tehát  $\mathbf{O}_R\Theta$  és  $\Theta\mathbf{O}_R$  egymástól csak egy  $c_R$  állandó szorzóban különbözhetnek, amely azonban függhet  $R$ -től. Tehát

$$\Theta^{-1}\mathbf{O}_R\Theta = c_R\mathbf{O}_R \quad \text{vagy} \quad \Theta^{-1}\mathbf{O}_u\Theta = c_u\mathbf{O}_u. \quad (26.16)$$

Két ilyen egyenlet szorzata  $\mathbf{O}_R \mathbf{O}_S = \mathbf{O}_{RS}$  miatt azt adja, hogy

$$c_R c_S \mathbf{O}_{RS} = \Theta^{-1} \mathbf{O}_R \Theta \Theta^{-1} \mathbf{O}_S \Theta = \Theta^{-1} \mathbf{O}_{RS} \Theta = c_{RS} \mathbf{O}_{RS}. \quad (26.16a)$$

Így a  $c_R$  számok a forgáscsoportnak (vagy az  $\mathbf{u}$ -k kétdimenziós unimoduláris unitér csoportjának) ábrázolását alkotják. Mivel a valódi forgáscsoportnak vagy az unitér csoportnak egyetlen egydimenziós ábrázolása az azonos ábrázolás, azért  $c_R = 1$ , tehát

$$\mathbf{O}_R \Theta = \Theta \mathbf{O}_R \quad \text{vagy} \quad \mathbf{O}_u \Theta = \Theta \mathbf{O}_u \quad (26.17)$$

bármely forgatásra. Ez az egyenlet közvetlen számolással is igazolható, hiszen egyenértékű a

$$\mathbf{D}^{(1/2)}(R) \mathbf{s}_y = \mathbf{s}_y \mathbf{D}^{(1/2)}(R)^* \quad (26.17a)$$

egyenlettel.

Az előző érvelés nem zárja ki annak lehetőségét, hogy (26.17) két oldala ellentétes előjelű, ha  $R$  nem valódi forgatás. A teljes forgáscsoport megfelelő  $c_R$  ábrázolásában (1) felel meg a valódi forgatásoknak,  $(-1)$  pedig azoknak, amelyeknek  $-1$  a determinánsa. Könnyen igazolható azonban, hogy (26.17) a tértükrözés  $\mathbf{O}_I$  operátorára is igaz. Ezért azonban igaz valamennyi eddig megvizsgált szimmetriaoperációra is.

Természetesen e szakasz megfontolásai még nem bizonyítják, hogy a kvantummechanika egyenletei invariánsak az időtükrözés operációjával szemben. Arra azonban rámutatnak, hogy ha invariánsak, akkor a  $\Theta = \mathbf{UK}$  időtükrözési operátort állandó tényezőtől eltekintve (26.14) vagy (26.15a) szolgáltatja az egyszerű, illetőleg a 20. fejezetben ismertetett elmélet kereteiben.

## A SAJÁTFÜGGVÉNYEK TRANSZFORMÁCIÓJA ANTIUNITÉR OPERÁTOROKRA

Az időtükrözési szimmetriának az atomszínképek elméletében nincs nagy horderejű következménye. Sokkal hatásosabb eszköz azonban az olyan alacsonyabb szimmetriájú rendszerek vizsgálatában, mint például a sokatomos molekulák vagy valamely kristály atomjai. Tulajdonképpen először a polarizációs sík elfordulásának vizsgálata során fedezték fel<sup>3</sup>; ez olyan jelenség, amely szimmetriasíkkal egyáltalán nem rendelkező rendszereknél figyelhető meg. Igen fontos az a felismerés, hogy a csoportok lineáris transzformációkkal történő ábrázolásának elmélete nem

<sup>3</sup> H. A. KRAMERS, Koninkl. Ned. Akad. Wetenschap., Proc. **33**, 959 (1930). Az időtükrözés jelentőségét a klasszikus elméletben csak nemrég fedezték fel: H. ZOCHER, C. TÖRÖK Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. **39**, 681 (1953).

biztosít elégséges matematikai alapot az olyan szimmetriacsoportok kezeléséhez, amelyek antiunitér operátorokat tartalmaznak, így szükség lesz a 11. fejezet néhány gondolatmenetének megismétlésére.

Ahogy arra már korábban, a legkifejezettebben a *Stark*-jelenség tárgyalásánál a 23. fejezetben rámutattunk, egy probléma szimmetriájából származó következmények levezetésénél szemügyre vett csoport nem a fizikai transzformációk csoportja, hanem e transzformációkat létesítő kvantummechanikai operátorok csoportja. Ha az elektronok száma páratlan, akkor az elforgatásokat létesítő kvantummechanikai operátorok az  $\mathbf{u}$  kétdimenziós unimoduláris unitér transzformációk csoportjával izomorfak és a forgáscsoporttal csak homomorfak. Hasonlóan  $\Theta^2$  ebben az esetben nem  $\mathbf{u}=\mathbf{1}$ -nek, hanem  $\mathbf{u}=-\mathbf{1}$ -nek felel meg. A teljes csoport az unitér  $\mathbf{O}_{\mathbf{u}}$  és az antiunitér  $\Theta\mathbf{O}_{\mathbf{u}}$  transzformációkból áll. A szorzási szabályok a következők

$$\begin{aligned} \mathbf{O}_{\mathbf{v}}\mathbf{O}_{\mathbf{u}} &= \mathbf{O}_{\mathbf{vu}}, & \Theta\mathbf{O}_{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{O}_{\mathbf{u}} &= \Theta\mathbf{O}_{\mathbf{vu}}, \\ \mathbf{O}_{\mathbf{v}} \cdot \Theta\mathbf{O}_{\mathbf{u}} &= \Theta\mathbf{O}_{\mathbf{vu}}, & \Theta\mathbf{O}_{\mathbf{v}} \cdot \Theta\mathbf{O}_{\mathbf{u}} &= \mathbf{O}_{\pm\mathbf{uv}}. \end{aligned} \quad (26.18)$$

A két utolsó egyenlet (26.17) következménye és az utolsóban a felső előjel érvényes páros, az alsó pedig páratlan számú elektronra. A (26.18) szorzási szabályokból kitévnik, hogy az unitér operátorok 2 indexű normális alcsoportot alkotnak, és az antiunitér operátorok alkotják eme alcsoport mellékosztályát. Ugyanez igaz minden olyan csoportra, amely mind unitér, mind pedig antiunitér operátorokat tartalmaz.

Idézzük fel a 11. fejezet fejtegetéseit az 5. szakasztól kezdődően. A (11.23) egyenlet a  $\Theta\mathbf{O}_{\mathbf{u}}$  antiunitér operátorokra is érvényes, mert csak azt fejezi ki, hogy  $\Theta\mathbf{O}_{\mathbf{u}}\psi_{\kappa}$  sajátfüggvény, ha  $\psi_{\kappa}$  is az:

$$\Theta\mathbf{O}_{\mathbf{u}}\psi_{\kappa} = \sum_{\lambda} D(\Theta\mathbf{O}_{\mathbf{u}})_{\lambda\kappa} \psi_{\lambda}. \quad (26.19)$$

Az is igaz, hogy  $\mathbf{D}(\Theta\mathbf{O}_{\mathbf{u}})$  unitér, ha a  $\psi_{\kappa}$ -k ortonormáltak. Ez annak a következménye, hogy (26.8) miatt

$$(\Theta\mathbf{O}_{\mathbf{u}}\psi_{\kappa}, \Theta\mathbf{O}_{\mathbf{u}}\psi_{\lambda}) = (\mathbf{O}_{\mathbf{u}}\psi_{\lambda}, \mathbf{O}_{\mathbf{u}}\psi_{\kappa}) = (\psi_{\lambda}, \psi_{\kappa}) = \delta_{\lambda\kappa} \quad (26.20)$$

csakúgy, mint unitér operátorokra.  $\mathbf{D}$  (11.32)-ben kifejezett unitér jellege az unitér operátorokra érvényes megfelelő egyenlet közvetlen következménye volt.

A  $\mathbf{D}(\Theta\mathbf{O}_{\mathbf{v}})$  és  $\mathbf{D}(\mathbf{O}_{\mathbf{u}})$  vagy  $\mathbf{D}(\Theta\mathbf{O}_{\mathbf{u}})$  mátrixok szorzata már nem  $\mathbf{D}(\Theta\mathbf{O}_{\mathbf{v}}\mathbf{O}_{\mathbf{u}}) = \mathbf{D}(\Theta\mathbf{O}_{\mathbf{vu}})$  vagy  $\mathbf{D}(\Theta\mathbf{O}_{\mathbf{v}}\Theta\mathbf{O}_{\mathbf{u}}) = \mathbf{D}(\mathbf{O}_{\pm\mathbf{uv}})$ . Nevezetesen ha (26.19)-re  $\Theta\mathbf{O}_{\mathbf{v}}$ -t alkalmazuk, akkor annak antiunitér jellege miatt

$$\begin{aligned} \Theta\mathbf{O}_{\mathbf{v}}\Theta\mathbf{O}_{\mathbf{u}}\psi_{\kappa} &= \sum_{\lambda} \Theta\mathbf{O}_{\mathbf{v}} D(\Theta\mathbf{O}_{\mathbf{u}})_{\lambda\kappa} \psi_{\lambda} = \\ &= \sum_{\lambda} D(\Theta\mathbf{O}_{\mathbf{u}})_{\lambda\kappa}^* \Theta\mathbf{O}_{\mathbf{v}}\psi_{\lambda} = \sum_{\lambda\mu} D(\Theta\mathbf{O}_{\mathbf{u}})_{\lambda\kappa}^* D(\Theta\mathbf{O}_{\mathbf{v}})_{\mu\lambda} \psi_{\mu}, \end{aligned}$$

tehát

$$\mathbf{D}(\Theta\mathbf{O}_v)\mathbf{D}(\Theta\mathbf{O}_u)^* = \mathbf{D}(\Theta\mathbf{O}_v\Theta\mathbf{O}_u) = \mathbf{D}(\Theta_{\pm\nu u}). \quad (26.21a)$$

Hasonlóképpen

$$\mathbf{D}(\Theta\mathbf{O}_v)\mathbf{D}(\mathbf{O}_u)^* = \mathbf{D}(\Theta\mathbf{O}_v\mathbf{O}_u) = \mathbf{D}(\Theta\mathbf{O}_{\nu u}), \quad (26.21b)$$

tehát a  $\mathbf{D}(\mathbf{O}_u)$ ,  $\mathbf{D}(\Theta\mathbf{O}_u)$  mátrixok többé nem ábrázolják az operátorok csoportját. Az ábrázolásokra érvényes

$$\mathbf{D}(\mathbf{O}_v)\mathbf{D}(\mathbf{O}_u) = \mathbf{D}(\mathbf{O}_v\mathbf{O}_u) = \mathbf{D}(\mathbf{O}_{\nu u}), \quad (26.21c)$$

$$\mathbf{D}(\mathbf{O}_v)\mathbf{D}(\Theta\mathbf{O}_u) = \mathbf{D}(\mathbf{O}_v\Theta\mathbf{O}_u) = \mathbf{D}(\Theta\mathbf{O}_{\nu u}) \quad (26.21d)$$

szorzási szabályok csak akkor érvényesek, ha az első tényező unitér operátornak felel meg, különben a második  $\mathbf{D}$  komplex konjugáltja jelenik meg. Nevezetesen ennek az a következménye, hogy

$$\mathbf{D}((\Theta\mathbf{O}_u)^{-1}) = (\mathbf{D}(\Theta\mathbf{O}_u)^*)^{-1} = \mathbf{D}(\Theta\mathbf{O}_u)', \quad (26.22)$$

tehát speciálisan  $\mathbf{D}(\Theta\mathbf{O}_u)$  szimmetrikus, ha  $\Theta\mathbf{O}_u$  antiunitér involúció:  $(\Theta\mathbf{O}_u)^2 = \mathbf{1}$ . Ez magára a  $\Theta$  időtükrözési operátorra igaz, ha az elektronok száma páros.  $\Theta\mathbf{O}_u$ -ra igaz viszont akkor, ha az elektronok száma páratlan és  $\mathbf{O}_u$  a  $\pi$  szögű elforgatásnak felel meg, tehát  $\mathbf{u}^2 = -1$ .

Ha  $\psi$ -t új lineáris kombinációval helyettesítjük az  $\alpha = \beta^{-1}$  transzformáció segítségével:

$$\psi'_\mu = \sum_v \alpha_{v\mu} \psi_v, \quad \psi_\kappa = \sum_\lambda \beta_{\lambda\kappa} \psi_\lambda$$

akkor az  $\mathbf{O}_u$  unitér transzformációnak megfelelő  $\mathbf{D}(\mathbf{O}_u)$  mátrixok helyébe (11.30) szerint

$$\bar{\mathbf{D}}(\mathbf{O}_u) = \alpha^{-1} \mathbf{D}(\mathbf{O}_u) \alpha. \quad (26.23a)$$

kerül. Ezzel szemben

$$\begin{aligned} \Theta\mathbf{O}_u \psi'_\mu &= \Theta\mathbf{O}_u \sum_v \alpha_{v\mu} \psi_v = \sum_v \alpha_{v\mu}^* \Theta\mathbf{O}_u \psi_v = \\ &= \sum_{\nu\kappa} \alpha_{v\mu}^* D(\Theta\mathbf{O}_u)_{\nu v} \psi_\kappa = \sum_v \sum_{\kappa} \sum_\lambda \alpha_{v\mu}^* D(\Theta\mathbf{O}_u)_{\nu v} \beta_{\lambda\kappa} \psi'_\lambda, \end{aligned}$$

tehát  $\mathbf{D}(\Theta\mathbf{O}_u)$  helyébe

$$\bar{\mathbf{D}}(\Theta\mathbf{O}_u) = \alpha^{-1} \mathbf{D}(\Theta\mathbf{O}_u) \alpha^* \quad (26.23b)$$

kerül. Erre (26.21a)-ból, vagy (26.21b)-ből is következtethetünk volna, hiszen  $\bar{\mathbf{D}}$  csak akkor elégíti ki ezeket az egyenleteket, ha az antiunitér operátoroknak megfelelő mátrixok transzformáltjaiban  $\alpha$  helyett  $\alpha^*$  szerepel.



A (26.11) és a (26.23) egyenletrendszerek azt mutatják, hogy a csoport operációi során a sajátfüggvényeket transzformáló mátrixok nem ábrázolják a csoportot, ha az antiunitér operátorokat is tartalmaz. A (26.21) egyenletek megoldásait az ábrázolások elmélete nem adja ki közvetlenül, hanem azokat speciális számolásokkal kell megkapnunk. Nevezetesen (26.21a)-ban és (26.21b)-ben a komplex konjugálás jelét nem küszöbölhetjük ki a  $\mathbf{D}(\Theta\mathbf{O}_u)$  mátrixok átdefiniálásával. Ha mind a hullámfüggvényekben, mind pedig a transzformációkban a valós és az imaginárius részeket különválasztanánk, akkor ezeket az egyenleteket természetesebb alakba önthetnénk. Az adott alak azonban könnyebben kezelhető.

A (26.21) egyenleteket kielégítő  $\mathbf{D}$  mátrixrendszer az  $\mathbf{O}_u$  unitér és a  $\Theta\mathbf{O}_u$  antiunitér operátorok csoportjának nem ábrázolása a szokásos értelemben. Mindazonáltal ezek azok az egyenletek, amelyek az időtükrözéssel kapcsolatos operációkra vonatkozó invariancia vizsgálata során felmerültek. Ezt a mátrixrendszert csillagos ábrázolásnak nevezzük, emlékeztetőül a (26.21)-ben található komplex konjugálás jelére. Természetesen a csillagos ábrázolás fogalmának csak az olyan operátorok csoportjánál van értelme, amelyeknek egy része antiunitér.

## A CSILLAGOS ÁBRÁZOLÁSOK KIREDUKÁLÁSA

A jelen szakasz tartalmazza a csillagos ábrázolások meghatározásának első lépését, nevezetesen a (26.21) egyenletek megoldását. A problémát ebben és a következő szakaszban matematikai szempontból tekintjük. Nevezetesen nem tesszük fel, hogy az unitér  $\mathbf{O}_u$  operátorok forgatásoknak felelnek meg, és hogy az antiunitér operátorok időtükrözést tartalmaznak. A jelölést egyszerűsítendő az  $\mathbf{O}_u$  unitér operátorokat  $\mathbf{u}$ ,  $\mathbf{u}_1$ ,  $\mathbf{u}_2$ , ... jelöli majd. Ezek invariáns alcsoportot alkotnak, amelyet *unitér alcsoportnak* nevezünk. Eme alcsoport irreducibilis ábrázolásait ismereteknek tételezzük fel. Az unitér alakúnak feltételezett irreducibilis ábrázolást  $\Delta(\mathbf{u})$ -val jelöljük. A  $\Theta\mathbf{O}_u$  antiunitér operátorokat röviden  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$ , ... fogja jelölni. A négy (26.21) egyenlet tehát így fest:

$$\begin{aligned} \mathbf{D}(\mathbf{u}_1) \mathbf{D}(\mathbf{u}_2) &= \mathbf{D}(\mathbf{u}_1 \mathbf{u}_2), & \mathbf{D}(\mathbf{u}) \mathbf{D}(\mathbf{a}) &= \mathbf{D}(\mathbf{u} \mathbf{a}), \\ \mathbf{D}(\mathbf{a}) \mathbf{D}(\mathbf{u})^* &= \mathbf{D}(\mathbf{a} \mathbf{u}), & \mathbf{D}(\mathbf{a}_1) \mathbf{D}(\mathbf{a}_2)^* &= \mathbf{D}(\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2). \end{aligned} \quad (26.21)$$

(26.21) két megoldását ekvivalensnek nevezzük, ha egymásba valamely  $\alpha$  unitér mátrixszal áttranszformálhatók, tehát

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{D}}(\mathbf{u}) &= \alpha^{-1} \mathbf{D}(\mathbf{u}) \alpha, \\ \bar{\mathbf{D}}(\mathbf{a}) &= \alpha^{-1} \mathbf{D}(\mathbf{a}) \alpha^*. \end{aligned} \quad (26.23)$$

Irreducibilisnek nevezzük (26.21) olyan megoldását, amely (26.23) transzformációval nem hozható a (9.E.2) redukált alakra. A  $\mathbf{D}(\mathbf{u})$  mátrix változatlan marad, ha  $\alpha$  az egységmátrix többszöröse, vagyis ha  $\alpha = \omega \mathbf{1}$ ;  $\mathbf{D}(\mathbf{a})$  azonban ekkor  $\omega^{-1}\omega^* = \omega^*2$  szorzót kap. Ily módon (26.21) két megoldása biztosan ekvivalens egymással, ha  $\mathbf{D}(\mathbf{u})$ -jaik megegyeznek és  $\mathbf{D}(\mathbf{a})$ -jaik egymástól közös számtényezőben különböznek. A  $\mathbf{D}(\mathbf{a})$ -k fázistényezőjének rögzítésével a  $\mathbf{D}(\mathbf{a})$ -val transzformálódó hullámfüggvények fázistényezőit határozzuk meg. Az unitér szimmetriaoperációk vonatkozásában, valamely ábrázolás különböző soraihoz tartozó valamennyi hullámfüggvénynek egy fázistényezője szabadon marad. A most következő számolások világosabbá válnak, ha feltesszük, hogy léteznek olyan  $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots, \psi_f$  hullámfüggvények, melyek az  $\mathbf{u}$  és  $\mathbf{a}$  operátorok hatására az

$$\mathbf{u}\psi_\kappa = \sum_1^f D(\mathbf{u})_{\lambda\kappa} \psi_\lambda, \quad (26.19a)$$

$$\mathbf{a}\psi_\kappa = \sum_1^f D(\mathbf{a})_{\lambda\kappa} \psi_\lambda$$

egyenletek szerint transzformálódnak. A fizikai problémában lényegében ezek a hullámfüggvények érdekelnek bennünket. Ha (26.21) megoldásának tisztán matematikai problémája iránt érdeklődünk, akkor a  $\psi_\kappa$  hullámfüggvények helyett az ábrázolástér vektorairól beszélhetünk. Ez az ábrázolástér  $f$ -dimenziós, ahol  $f$  a  $\mathbf{D}$  sorainak és oszlopainak a száma. Úgy tekinthetjük, hogy a  $\mathbf{D}$  mátrixok eme ábrázolástér vektoraira hatnak,  $\mathbf{D}(\mathbf{u})$  és  $\mathbf{D}(\mathbf{a})$  a  $\kappa$ -adik egységvektort olyan vektorba transzformálják át, amelyek  $\lambda$ -adik komponense  $D(\mathbf{u})_{\lambda\kappa}$ , illetőleg  $D(\mathbf{a})_{\lambda\kappa}$ . Így az ábrázolástérben az egységvektorok játszhatják a  $\psi$  hullámfüggvények szerepét. A hullámfüggvények fogalmát használva gondolatmenetünk feltehetően kevésbé lesz absztrakt, mintha az ábrázolástéren dolgozva végeznők el.

Az unitér transzformációknak megfelelő  $\mathbf{D}(\mathbf{u})$  mátrixok az unitér alcsoport ábrázolását alkotják. Tegyük fel, hogy a  $\mathbf{D}(\mathbf{u})$ -k mint az unitér alcsoport ábrázolásai teljesen redukálhatók és hogy a  $\Delta(\mathbf{u})$  első irreducibilis rész  $l$ -dimenziója nem haladja meg  $\mathbf{D}(\mathbf{u})$  többi irreducibilis részének a dimenzióját. Ez elérhető a hullámfüggvények megfelelő lineáris kombinációjának kiválasztásával (vagyis az ábrázolástérben megfelelő koordináta-rendszer használatával). Így

$$\mathbf{u}\psi_\kappa = \sum_1^l \Delta(\mathbf{u})_{\lambda\kappa} \psi_\lambda \quad \text{ha} \quad \kappa \leq l. \quad (26.24)$$

Vegyük észre, hogy  $\Delta$  csak unitér operátorokra van definiálva és például  $\Delta(\mathbf{a})$ -nak nincs értelme. Mivel azonban a  $\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2$  vagy  $\mathbf{a}^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}$  az unitér alcsoport eleme, ezért a  $\Delta(\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2)$  vagy  $\Delta(\mathbf{a}^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a})$  kifejezéseknek meghatározott jelentésük van.

Tekintsük a következő  $l$  hullámfüggvényt:

$$\psi'_\kappa = \mathbf{a}_0 \psi_\kappa = \sum_1^f D(\mathbf{a}_0)_{\lambda\kappa} \psi_\lambda \quad (\kappa \leq l). \quad (26.25)$$

A jobb oldalon az összegezést valamennyi hullámfüggvényre ki kell terjeszteni, hiszen  $\mathbf{D}(\mathbf{a})$ -ra semmilyen feltevést nem tettünk.  $\mathbf{a}_0$  (26.25)-ben tetszőleges, de rögzített antiunitér operátor. Megmutatjuk, hogy  $\psi'_\kappa$  az unitér alcsoport irreducibilis ábrázoláshoz tartozik. Tekintsük  $\mathbf{u}\psi'_\kappa$ -t:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}\psi'_\kappa &= \mathbf{u} \sum_\lambda D(\mathbf{a}_0)_{\lambda\kappa} \psi_\lambda = \sum_\lambda \sum_\mu D(\mathbf{a}_0)_{\lambda\kappa} D(\mathbf{u})_{\mu\lambda} \psi_\mu = \\ &= \sum_\mu [\mathbf{D}(\mathbf{u}) \mathbf{D}(\mathbf{a}_0)]_{\mu\kappa} \psi_\mu. \end{aligned} \quad (26.26)$$

Am (26.21) szerint

$$\mathbf{D}(\mathbf{u})\mathbf{D}(\mathbf{a}_0) = \mathbf{D}(\mathbf{u}\mathbf{a}_0) = \mathbf{D}(\mathbf{a}_0) \mathbf{D}(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0)^* \quad (26.26a)$$

tehát

$$\mathbf{u}\psi'_\kappa = \sum_{\mu\lambda} D(\mathbf{a}_0)_{\mu\lambda} D(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0)^*_{\lambda\kappa} \psi_\mu = \sum_\lambda D(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0)^*_{\lambda\kappa} \psi'_\lambda. \quad (26.26b)$$

Megjegyezzük, hogy csak a (26.21) összefüggéseket használtuk fel, az  $\mathbf{u}$  és  $\mathbf{a}$  operátorok szorzási szabályait nem.

$\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0$  azonban az unitér alcsoport eleme, tehát  $\kappa \leq l$ -re

$$D(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0)_{\lambda\kappa} = \Delta(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0)_{\lambda\kappa} \quad \text{ha} \quad \lambda \leq l$$

és

$$D(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0)_{\lambda\kappa} = 0 \quad \text{ha} \quad \lambda > l.$$

Így

$$\mathbf{u}\psi'_\kappa = \sum_1^l \Delta(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0)^*_{\lambda\kappa} \psi'_\lambda \quad (26.27)$$

és a  $\psi'_\kappa$ -k, amelyek a  $\psi_\kappa$ -k lineáris kombinációi,

$$\bar{\Delta}(\mathbf{u}) = \Delta(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0)^*, \quad (26.27a)$$

$l$ -dimenziós ábrázoláshoz tartoznak. Ezek a mátrixok (26.27) szerint valóban az unitér alcsoport ábrázolását alkotják. Ez abból is következik, hogy  $\Delta$  ilyen ábrázolás és hogy  $\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0$  unitér. Továbbá  $\bar{\Delta}$  szükségképpen irreducibilis, mert  $\mathbf{D}(\mathbf{u})$  tartalmazza, és ez utóbbi  $l$ -nél kisebb dimenziójú ábrázolást nem tartalmaz.

Alább majd megtárgyaljuk, hogy  $\bar{\Delta}$  milyen összefüggésben van  $\Delta$ -val. Először mutassuk meg, hogy az

$$\mathbf{a}\psi_\kappa = \sum D(\mathbf{a})_{\mu\kappa} \psi_\mu, \quad (26.28a)$$

$$\mathbf{a}\psi'_\kappa = \sum \mathbf{a} D(\mathbf{a}_0)_{\lambda\kappa} \psi_\kappa = \sum \sum D(\mathbf{a}_0)_{\lambda\kappa}^* D(\mathbf{a})_{\mu\lambda} \psi_\mu \quad (26.28b)$$

hullámfüggvények  $\kappa \leq l$  esetén  $\psi_\kappa, \psi'_\kappa$  segítségével lineárisan kifejezhetők és  $\kappa \leq l$ . (26.28a) egyszerűen átírható, mert  $\mathbf{D}(\mathbf{a}) = \mathbf{D}(\mathbf{a}_0) \mathbf{D}(\mathbf{a}_0^{-1} \mathbf{a})^*$ ,

$$\begin{aligned} \mathbf{a}\psi_\kappa &= \sum D(\mathbf{a})_{\mu\kappa} \psi_\mu = \sum \sum D(\mathbf{a}_0)_{\mu\nu} D(\mathbf{a}_0^{-1} \mathbf{a})_{\nu\kappa}^* \psi_\mu = \\ &= \sum_1^l \Delta(\mathbf{a}_0^{-1} \mathbf{a})_{\nu\kappa}^* \psi'_\nu \quad (\kappa \leq l). \end{aligned} \quad (26.29a)$$

Az utolsó lépés abból következik, hogy  $\mathbf{a}_0^{-1} \mathbf{a}$  az unitér alcsoport eleme és  $\kappa \leq l$ , tehát  $D(\mathbf{a}_0^{-1} \mathbf{a})_{\nu\kappa} = \Delta(\mathbf{a}_0^{-1} \mathbf{a})_{\nu\kappa}$  ha  $\nu \leq l$ , különben pedig zérus. Hasonlóképpen  $\mathbf{D}(\mathbf{a}) \mathbf{D}(\mathbf{a}_0)^* = \mathbf{D}(\mathbf{a}\mathbf{a}_0)$ , tehát (26.28b)  $\kappa \leq l$ -re így alakul:

$$\mathbf{a}\psi'_\kappa = \sum D(\mathbf{a}\mathbf{a}_0)_{\mu\kappa} \psi_\mu = \sum_1^l \Delta(\mathbf{a}\mathbf{a}_0)_{\mu\kappa} \psi_\mu. \quad (26.29b)$$

Bebizonyítjuk most a következő lemmát: a  $\psi'_\kappa = \mathbf{a}_0 \psi_\kappa$  ( $\kappa \leq l$ ) esetén *függvények vagy mindannyian kifejezhetők lineárisan a  $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_l$  függvényekkel, vagy pedig ezektől és egymástól mind lineárisan függetlenek*. E lemma bizonyítása során gyakran hivatkozunk majd  $\psi_\kappa$ -ra és  $\psi'_\kappa = \mathbf{a}_0 \psi_\kappa$ -ra  $\kappa \leq l$  mellett. Célszerű ezért úgy tekinteni a szakasz hátralevő részében, hogy  $\kappa$  csak 1-től  $l$ -ig futhat. Először is meggyeizzük, hogy a  $\psi'_\kappa$ -k egymásra ortogonálisak, mert a  $\bar{\Delta}$  irreducibilis ábrázolás különböző soraihoz tartoznak. Ezért a  $\psi'_\kappa$ -k és a  $\psi_\kappa$ -k között bármely lineáris összefüggés ilyen alakú:

$$\sum a'_\kappa \psi'_\kappa = \varphi_1; \quad \varphi_1 = \sum a_\kappa \psi_\kappa. \quad (26.30)$$

ahol  $\varphi_1 \neq 0$ . Ekkor (26.27)-ből és az  $\mathbf{u}$ -k lineáris voltából következik, hogy minden  $\mathbf{u}\varphi_1$ , a  $\psi'_\kappa$ -k lineáris kombinációja és ugyanez igaz az  $\mathbf{u}\varphi_1$ -ek bármely lineáris kombinációjára is. Most az összes  $\psi'_\kappa$ -t az  $\mathbf{u}\varphi_1$ -ek lineáris kombinációiként állítjuk elő. Ezek így a  $\psi_\kappa$ -k lineáris kombinációi lesznek, tehát következik, hogy minden  $\psi'_\kappa$  a  $\psi_\kappa$ -k lineáris kombinációja, ha egy (26.30) jellegű összefüggés érvényes.

Annak érdekében, hogy az összes  $\psi'_\kappa$ -t az  $\mathbf{u}\varphi_1$ -ek lineáris kombinációjaként kapjuk meg,  $\bar{\Delta}$ -t úgy transzformáljuk át, hogy  $\varphi_1$  az első sorához tartozzék. Ezt olyan unitér transzformációval érhetjük el, amelynek első sora  $\alpha'_1, \alpha'_2, \dots, \alpha'_l$ . Így  $\varphi_1$  partnerei az  $\mathbf{u}\varphi_1$ -ek lineáris kombinációiként (12.3a) segítségével nyerhetők. Ezekből a  $\psi'_\kappa$ -k az előbb említett unitér transzformáció inverzével állíthatók elő. Ezzel a lemma bizonyítását befejeztük.

Ha  $\psi'_\kappa$ -k a  $\psi_\kappa$ -k lineáris kombinációi, akkor a (26.24)-hez és (26.29a)-hoz vezető előbbi számolásainkból következik, hogy az  $\mathbf{u}\psi_\kappa$ -k és az  $\mathbf{a}\psi_\kappa$ -k ugyancsak lineáris kombinációi e függvényeknek. Ebben az esetben a csillagos ábrázolás egy  $l$  dimenziós és egy  $(f-l)$ -dimenziós részre redukálódik. A  $D_{\lambda\mu}$ -k eltűnnek, ha  $\mu \leq l, \lambda > l$  és ha  $\mu > l, \lambda \leq l$ . Ez az utóbbi állítás azért igaz, mert valamennyi  $\mathbf{D}(\mathbf{u})$  és  $\mathbf{D}(\mathbf{a})$  unitér.

Ennek eredményeképpen  $\mathbf{D}(\mathbf{u})^\dagger = \mathbf{D}(\mathbf{u}^{-1})$  és (26.22) szerint  $\mathbf{D}(\mathbf{a})' = \mathbf{D}(\mathbf{a}^{-1})$ . Tekintve, hogy a  $D(\mathbf{u}^{-1})_{\lambda\mu}$  és  $D(\mathbf{a}^{-1})_{\lambda\mu}$  csak  $\lambda > l$ ,  $\mu \leq l$  négyzetben zérus,  $D(\mathbf{u})_{\lambda\mu}$ ,  $D(\mathbf{a})_{\lambda\mu}$  csak  $\mu > l$ ,  $\lambda \leq l$  esetén lesz zérus.

Ha viszont a  $\psi_\kappa$ -k és a  $\psi'_\kappa$ -k valamennyien lineárisan függetlenek, akkor kiválasztható olyan ortonormált rendszer, amelynek első  $l$  tagja az  $l$  számú  $\psi_\kappa$ , a következő  $l$  tagja a  $\psi_\kappa$ -k és a  $\psi'_\kappa$ -k lineáris kombinációja és a fennmaradó tagok mind a  $\psi_\kappa$ -kra, mind pedig a  $\psi'_\kappa$ -kra ortogonális. Ez a Gram—Schmidt-módszernek a  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_l; \psi'_1, \psi'_2, \dots, \psi'_l; \psi_{l+1}, \psi_{l+2}, \dots, \psi_f$  függvényekre történő alkalmazásával tehető meg. Így a  $\psi_\kappa$ -k és  $\psi'_\kappa$ -k e rendszer első  $2l$  tagjának lineáris kombinációi lesznek. Ha akár  $\mathbf{u}$ -t, akár  $\mathbf{a}$ -t a rendszer első  $2l$  tagjának valamelyikére alkalmazzuk, akkor az eredményül kapott függvény ismét az első  $2l$  tag lineáris kombinációja lesz. Ez ismét ezen megfontolást megelőző és a (26.24), (26.27) (26.29a) és (26.29b) egyenletekhez vezető számolásból következik. Ha tehát  $\mathbf{D}$ -t a most jellemzett ortonormális rendszerre írjuk fel, akkor minden  $D(\mathbf{u})_{\lambda\mu}$  és  $D(\mathbf{a})_{\lambda\mu}$  eltűnik, ha  $\lambda \leq 2l$  és  $\mu > 2l$ . Ebből következik, hogy  $\mathbf{D}$  két részre bomlik fel; az első  $2l$ , a második pedig  $(f-2l)$ -dimenziós. Az első rész a  $\Delta$  és  $\bar{\Delta}$  unitér alcsoportnak csak két irreducibilis ábrázolását tartalmazza.

$\mathbf{D}$  redukálása tovább folytatható, ha az egész  $\mathbf{D}$ -re most használt eljárást az  $(f-l)$  vagy  $(f-2l)$ -dimenziós második részre alkalmazzuk. E felbontás eredményeképpen a csillagos ábrázolás minden kiredukált része az unitér alcsoportnak vagy egyetlen irreducibilis ábrázolását, vagy két ilyen ábrázolást ( $\Delta(\mathbf{u})$ -t és  $\bar{\Delta}(\mathbf{u}) = \Delta(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0)$ -át) fogja tartalmazni.

## AZ IRREDUCÍBILIS CSILLAGOS ÁBRÁZOLÁSOK MEGHATÁROZÁSA

Az unitér alcsoport  $\Delta$  és  $\bar{\Delta}$  irreducibilis ábrázolásai vagy ekvivalensek vagy nem. E lehetőségek közül az utóbbi az egyszerűbb, és ezt vizsgáljuk meg először.

1. Ha  $\Delta(\mathbf{u})$  és  $\Delta(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0)^*$  nem ekvivalensek, akkor a  $\psi_\kappa$  és a  $\psi'_\kappa = \mathbf{a}_0\psi_\kappa$  hullámfüggvények ortogonálisak, mert az unitér alcsoport különböző ábrázolásaihoz tartoznak. Így az előző szakaszban definiált ortonormális rendszer első  $2l$  tagját maguk a  $\psi_\kappa$  és  $\psi'_\kappa$  függvények adják, és a  $\mathbf{D}(\mathbf{u})$  és  $\mathbf{D}(\mathbf{a})$  mátrixokat (26.24), (26.27), (26.29a) és (26.29b) szolgáltatja:

$$\mathbf{D}(\mathbf{u}) = \begin{pmatrix} \Delta(\mathbf{u}) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \Delta(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0)^* \end{pmatrix}, \quad (26.31)$$

$$\mathbf{D}(\mathbf{a}) = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \Delta(\mathbf{a}\mathbf{a}_0) \\ \Delta(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{a})^* & \mathbf{0} \end{pmatrix}. \quad (26.31a)$$

Természetesen e mátrixok hasonlósági transzformációnak alávetethetők. Például ha  $\mathbf{a}_0$ -t egy másik  $\mathbf{a}_1$  csoportelemmel kívánjuk helyettesíteni, akkor  $\mathbf{D}$ -t az

$$\alpha = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \Delta(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{a}_1)^* \end{pmatrix}$$

mátrixszal kell transzformálni. Világos, hogy a (26.31), (26.31a) mátrixrendszer irreducibilis, ha  $\Delta(\mathbf{u})$  és  $\bar{\Delta}(\mathbf{u}) = \Delta(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0)$  inekvivalens irreducibilis ábrázolás. Az olvasó meggyőződhet arról, hogy ez az  $\mathbf{a}_0$  antiunitér operátor megválasztásától független. Jegyezzük meg, hogy  $\mathbf{D}(\mathbf{a})$ -t (26.23b) szerint kell transzformálni.

2. A másik esetben a  $\Delta(\mathbf{u})$  és a

$$\bar{\Delta}(\mathbf{u}) = \Delta(\mathbf{a}^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0)^* = \beta^{-1}\Delta(\mathbf{u})\beta \quad (26.32)$$

ábrázolás ekvivalens egymással. Két esetet kell megkülönböztetnünk: a  $\mathbf{D}$  ábrázolás ugyanannyi, vagy kétszerannyi oszloppal és sorral bírhat, mint  $\Delta$ . Az előző esetben  $\mathbf{D}$ -re máris érvényes, hogy

$$\mathbf{D}(\mathbf{u}) = \Delta(\mathbf{u}), \quad (26.32a)$$

az utóbbiban  $\mathbf{D}(\mathbf{u})$  a

$$\mathbf{D}(\mathbf{u}) = \begin{pmatrix} \Delta(\mathbf{u}) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \Delta(\mathbf{u}) \end{pmatrix} \quad (26.32b)$$

alakra hozható. Az unitér operátoroknak megfelelő mátrixok mindkét esetben már ismertek.  $\mathbf{D}(\mathbf{a})$ -t meghatározandó, taglaljuk a  $\Delta(\mathbf{u})$  ábrázolást részletesebben.

(26.32)-t az  $\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0$  unitér transzformációra alkalmazva kapjuk, hogy

$$\Delta(\mathbf{a}_0^{-2}\mathbf{u}\mathbf{a}_0^2)^* = \beta^{-1}\Delta(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0)\beta. \quad (26.33)$$

Ennek komplex konjugáltja (26.32)-vel együtt azt adja, hogy

$$\Delta(\mathbf{a}_0^{-2})\Delta(\mathbf{u})\Delta(\mathbf{a}_0^2) = \Delta(\mathbf{a}_0^{-2}\mathbf{u}\mathbf{a}_0^2) = \beta^{*-1}\beta^{-1}\Delta(\mathbf{u})\beta\beta^*, \quad (26.33a)$$

mert  $\mathbf{a}_0^{-2}$  és  $\mathbf{a}_0^2$  az unitér alcsoport elemei. Ebből következik, hogy a  $\beta\beta^*\Delta(\mathbf{a}_0^{-2})$  mátrix egy irreducibilis ábrázolás valamennyi  $\Delta(\mathbf{u})$  mátrixával felcserélhető, tehát nem más, mint az  $\omega\mathbf{1}$  állandó mátrix; így

$$\beta\beta^* = \omega\Delta(\mathbf{a}_0^2). \quad (26.34)$$

A (26.34)mátrixok unitér jellege miatt  $|\omega| = 1$ . Megmutatjuk, hogy  $\omega = \pm 1$ . E célból (26.33)-ba  $\mathbf{u} = \mathbf{a}_0^2$ -et helyettesítünk:

$$\Delta(\mathbf{a}_0^2)^* = \beta^{-1}\Delta(\mathbf{a}_0^2)\beta. \quad (26.34a)$$

Fejezzük ki  $\Delta(\mathbf{a}_0^2)$ -et (26.34)-ből:

$$\omega\beta^*\beta = \beta^{-1}(\omega^{-1}\beta\beta^*)\beta = \omega^{-1}\beta^*\beta \quad (26.34b)$$

tehát  $\omega^2=1$ ;  $\omega = \pm 1$ . Így vagy

$$\beta\beta^* = \Delta(\mathbf{a}_0^2), \quad \beta = \Delta(\mathbf{a}_0^2) \beta', \quad (26.35a)$$

vagy pedig

$$\beta\beta^* = -\Delta(\mathbf{a}_0^2), \quad \beta = -\Delta(\mathbf{a}_0^2) \beta'. \quad (26.35b)$$

Ez nagyon hasonlít a 24. fejezet 2. szakaszának elemzéséhez. Ama  $\Delta$  ábrázolások körében, amelyek ekvivalensek a (26.37a)-ban szereplő  $\bar{\Delta}$  ábrázolásokkal, egy osztályozásra mutattunk rá, hasonlóan ahhoz, ahogy az olyan ábrázolásoknál, amelyek ekvivalensek a komplex konjugáltjaikkal, különbséget tettünk a potenciálisan valós és a pszeudoreális ábrázolások között. Meggyőződhetünk arról, hogy adott  $\Delta$ -ra a (26.35a) és a (26.35b) lehetőség az  $\mathbf{a}_0$  antiunitér transzformáció megválasztásától függetlenül áll fenn.

Térjünk vissza az irreducibilis csillagos ábrázolások meghatározásához. A probléma egyszerűsödik, ha észrevesszük, hogy minden  $\mathbf{a}$  átírható az  $\mathbf{u}\mathbf{a}_0$  alakba, ahol  $\mathbf{a}_0$  rögzített és  $\mathbf{u}$  változik. (26.21) második egyenlete szerint

$$\mathbf{D}(\mathbf{u}\mathbf{a}_0) = \mathbf{D}(\mathbf{u}) \mathbf{D}(\mathbf{a}_0). \quad (26.36)$$

(26.21) utolsó két egyenletében minden  $\mathbf{a}$  helyébe egy unitér operátor és  $\mathbf{a}_0$  szorzót írva kapjuk, hogy

$$\mathbf{D}(\mathbf{u}\mathbf{a}_0) \mathbf{D}(\mathbf{u}_1)^* = \mathbf{D}(\mathbf{u}\mathbf{a}_0\mathbf{u}_1) = \mathbf{D}(\mathbf{u}\mathbf{a}_0\mathbf{u}_1\mathbf{a}_0^{-1} \cdot \mathbf{a}_0),$$

$$\mathbf{D}(\mathbf{u}_1\mathbf{a}_0) \mathbf{D}(\mathbf{u}_2\mathbf{a}_0)^* = \mathbf{D}(\mathbf{u}_1\mathbf{a}_0\mathbf{u}_2\mathbf{a}_0) = \mathbf{D}(\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{a}_0\mathbf{u}_2\mathbf{a}_0^{-1} \cdot \mathbf{a}_0^2).$$

Ha (26.36)-ot ide behelyettesítjük és feltesszük, hogy a  $\mathbf{D}(\mathbf{u})$ -k az unitér alcsoport egy ábrázolását alkotják, akkor egyenleteink így alakulnak:

$$\mathbf{D}(\mathbf{u}) \mathbf{D}(\mathbf{a}_0) \mathbf{D}(\mathbf{u}_1)^* = \mathbf{D}(\mathbf{u}\mathbf{a}_0\mathbf{u}_1\mathbf{a}_0^{-1}) \mathbf{D}(\mathbf{a}_0) = \mathbf{D}(\mathbf{u}) \mathbf{D}(\mathbf{a}_0\mathbf{u}_1\mathbf{a}_0^{-1}) \mathbf{D}(\mathbf{a}_0), \quad (26.37)$$

$$\mathbf{D}(\mathbf{u}_1) \mathbf{D}(\mathbf{a}_0) \mathbf{D}(\mathbf{u}_2)^* \mathbf{D}(\mathbf{a}_0)^* = \mathbf{D}(\mathbf{u}_1) \mathbf{D}(\mathbf{a}_0\mathbf{u}_2\mathbf{a}_0^{-1}) \mathbf{D}(\mathbf{a}_0^2). \quad (26.37a)$$

Ezek közül az első kielégül, ha

$$\mathbf{D}(\mathbf{u}_1)^* = \mathbf{D}(\mathbf{a}_0)^{-1} \mathbf{D}(\mathbf{a}_0\mathbf{u}_1\mathbf{a}_0^{-1}) \mathbf{D}(\mathbf{a}_0)$$

minden  $\mathbf{u}_1$ -re érvényes. Írjunk eme egyenletbe  $\mathbf{u}_1$  helyébe  $\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0$ -t:

$$\mathbf{D}(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0)^* = \mathbf{D}(\mathbf{a}_0)^{-1} \mathbf{D}(\mathbf{u}) \mathbf{D}(\mathbf{a}_0). \quad (26.38)$$

Ha ez az egyenlet minden  $\mathbf{u}$ -ra kielégül, és  $\mathbf{D}(\mathbf{a})$ -t (26.36) definiálja, akkor (26.21) harmadik egyenlete is teljesülni fog. Írjunk  $\mathbf{u}_2$  helyébe (26.37)-ben  $\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0$ -t, és vegyük figyelembe (26.38)-at. Így

$$\mathbf{D}(\mathbf{a}_0) \mathbf{D}(\mathbf{a}_0)^* = \mathbf{D}(\mathbf{a}_0^2). \quad (26.38a)$$

Ez (26.21) utolsó egyenletének különleges esete. Az előző megfontolás azt mutatja, hogy ha  $\mathbf{D}(\mathbf{a}_0)$  kielégíti (26.38)-at, valamint (26.38a)-t és ha a többi  $\mathbf{D}(\mathbf{a})$ -t (26.36)

definiálja, akkor ezek az összes (26.21) egyenletet teljesíteni fogják. Így a  $\mathbf{D}(\mathbf{a})$ -kat sokkal egyszerűbb meghatározni, ezek aztán (26.32a) vagy (26.32b)  $\mathbf{D}(\mathbf{u})$ -ival együtt (26.21) megoldásait alkotják. Így a problémát az egyedül  $\mathbf{D}(\mathbf{a}_0)$ -t tartalmazó (26.38) és (26.38a) megoldására vezettük vissza.

Tekintsük most a (26.32a) esetet, amikor is  $\mathbf{D}$  csak egyszer tartalmazza  $\Delta$ -t. (26.32) és (26.38) egybevetéséből kitűnik, hogy egy lényegtelen szorzótól eltekintve (lásd a 352. oldalon a (26.23) egyenlet után következő megjegyzést)

$$\mathbf{D}(\mathbf{a}_0) = \boldsymbol{\beta}. \quad (26.39a)$$

Ily módon (26.38a) akkor és csakis akkor elégül ki, ha a (26.35a) lehetőség teljesül  $\Delta$ -ra, tehát (26.32a) csak akkor lehetséges, ha (26.35a) érvényes  $\Delta$ -ra. Megfordítva az olyan  $\Delta$ , amelyre (26.35a) igaz, az egész csoport egy csillagos ábrázolásává egészíthető ki a (26.36) egyenlet segítségével:

$$\mathbf{D}(\mathbf{a}) = \Delta(\mathbf{a}\mathbf{a}_0^{-1})\boldsymbol{\beta}. \quad (26.40a)$$

Ha  $\mathbf{D}$  kétszer tartalmazza  $\Delta$ -t, akkor  $\mathbf{D}(\mathbf{u})$ -t (26.32b) szolgáltatja. Ez az  $\mathbf{1} \times \Delta(\mathbf{u})$  direkt szorzatként, vagyis a kétdimenziós egységmátrix és  $\Delta(\mathbf{u})$  direkt szorzataként írható fel. Ebben az esetben (26.38) egyik megoldása

$$\mathbf{D}(\mathbf{a}_0) = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\beta} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \boldsymbol{\beta} \end{pmatrix} = \mathbf{1} \times \boldsymbol{\beta}. \quad (26.E.3)$$

(26.38) legáltalánosabb megoldását úgy kapjuk meg, hogy (26.E.3)-at a (26.32b) összes  $\mathbf{D}(\mathbf{u})$  mátrixával felcserélhető

$$\begin{pmatrix} c_{11}\mathbf{1} & c_{12}\mathbf{1} \\ c_{21}\mathbf{1} & c_{22}\mathbf{1} \end{pmatrix} = \mathbf{c} \times \mathbf{1} \quad (26.E.4)$$

mátrixszal szorozzuk meg balról. Ez a *Schur*-lemmából következik (9. fejezet 2. tétel). (26.E.4) jobb oldalán  $\mathbf{c}$  tetszőleges kétszer-kettes mátrix és (26.E.4) egy ilyen mátrixnak és a  $\Delta$ -éval megegyező dimenziójú egységmátrixnak a direkt szorzata. Így (26.38) általános megoldása ebben az esetben

$$\mathbf{D}(\mathbf{a}_0) = \begin{pmatrix} c_{11}\boldsymbol{\beta} & c_{12}\boldsymbol{\beta} \\ c_{21}\boldsymbol{\beta} & c_{22}\boldsymbol{\beta} \end{pmatrix} = \mathbf{c} \times \boldsymbol{\beta}. \quad (26.39b)$$

$\mathbf{c}$ -nek unitérnek kell lennie, hiszen  $\mathbf{D}(\mathbf{a}_0)$  is az. A (26.38a) feltétel  $\mathbf{D}(\mathbf{a}_0)$ -ra azt adja, hogy

$$(\mathbf{c} \times \boldsymbol{\beta})(\mathbf{c}^* \times \boldsymbol{\beta}^*) = \mathbf{c}\mathbf{c}^* \times \boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\beta}^* = \mathbf{D}(\mathbf{a}_0^2) = \mathbf{1} \times \Delta(\mathbf{a}_0^2).$$

Az  $\mathbf{1}$  ebben az egyenletben a kétdimenziós egységmátrix.  $\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\beta}^* = \pm \Delta(\mathbf{a}_0^2)$  miatt  $\mathbf{c}\mathbf{c}^* = \pm \mathbf{1}$ . Most az *alsó* előjel érvényes; alább megmutatjuk, hogy a felső előjel esetén az ábrázolás reducibilis (tehát (26.35a) teljesül), ekkor azonban a  $\mathbf{c}\mathbf{c}^\dagger = \mathbf{1}$  uniteritási feltételből következik, hogy  $\mathbf{c}^* = \mathbf{c}^\dagger = -\mathbf{c}'$  vagyis  $\mathbf{c}$  antiszimmetrikus.



Tekintve, hogy az összes  $\mathbf{D}(\mathbf{a})$ -ban egy közös szorzó tetszőleges, legyen

$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

és így ha a (26.35b) lehetőség teljesül a  $\Delta$  ábrázolásra, akkor

$$\mathbf{D}(\mathbf{a}) = \begin{pmatrix} 0 & \Delta(\mathbf{a}\mathbf{a}_0^{-1})\boldsymbol{\beta} \\ -\Delta(\mathbf{a}\mathbf{a}_0^{-1})\boldsymbol{\beta} & 0 \end{pmatrix} \quad (26.40b)$$

Csupán a  $\mathbf{c}\mathbf{c}^* = \mathbf{1}$  esetet kell még megbeszelnünk. Ekkor  $\mathbf{c}$  szimmetrikus unitér mátrix. (24.4b) szerint az  $\mathbf{r}^{-1}\boldsymbol{\omega}\mathbf{r}$  alakba írható, ahol  $\mathbf{r}$  valós és ortogonális,  $\boldsymbol{\omega}$  pedig diagonális mátrix. Így ha  $\mathbf{D}$ -t

$$\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{r}^{-1} \times \mathbf{1} \quad (26.41)$$

transzformálja (itt  $\mathbf{r}$  kétdimenziós;  $\mathbf{1}$   $l$ -dimenziós), akkor  $\mathbf{D}(\mathbf{u}) = \mathbf{1} \times \Delta$  változatlanul marad,  $\mathbf{D}(\mathbf{a}_0) = \mathbf{c} \times \boldsymbol{\beta}$  pedig az  $(\mathbf{r} \times \mathbf{1})(\mathbf{r}^{-1}\boldsymbol{\omega}\mathbf{r} \times \boldsymbol{\beta})(\mathbf{r}^{-1} \times \mathbf{1}) = \boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{\beta}$  alakot ölti. Így az ábrázolás két (26.40a) típusú  $l$ -dimenziós ábrázolásra bomlik fel.

Összefoglalva, *csillagos ábrázolás*, vagyis (26.21)-nek irreducibilis megoldása *háromféle létezik*. Azt, amelyet először megvizsgáltunk, nevezzük a *harmadik típusúnak*; ez az *unitér alcsoport két inekvivalens irreducibilis ábrázolását tartalmazza*, ezek  $\Delta$  és

$$\bar{\Delta}(\mathbf{u}) = \Delta(\mathbf{a}^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a})^*, \quad (26.27a)$$

itt  $\mathbf{a}$  tetszőleges antiunitér operátor. Vegyük észre, hogy  $\bar{\Delta}$  és  $\Delta$  ekvivalens egymással,  $\bar{\Delta}$  bizonyos értelemben olyan, mintha  $\Delta$  reciproka lenne. *Az első típusú csillagos ábrázolás az unitér alcsoport egyetlen  $\Delta$  irreducibilis ábrázolását tartalmazza. Ebben a leggyakrabban előforduló esetben  $\Delta$  és  $\bar{\Delta}$  ekvivalensek; a  $\Delta$ -t  $\bar{\Delta}$ -ba transzformáló  $\boldsymbol{\beta}$  a  $\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\beta}^* = \Delta(\mathbf{a}_0^2)$  egyenletet elégíti ki. Az utolsó típusa a csillagos ábrázolásnak az unitér alcsoport ugyanazon  $\Delta$  irreducibilis ábrázolását kétszer tartalmazza; ezt nevezzük második típusának. Ez a  $\Delta$  szintén ekvivalens  $\bar{\Delta}$ -sal, de ebben az esetben  $\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\beta}^* = -\Delta(\mathbf{a}_0^2)$  érvényes a  $\Delta$ -t  $\bar{\Delta}$ -ba transzformáló  $\boldsymbol{\beta}$  mátrixra. A harmadik típusú csillagos ábrázolásokban  $\Delta$  és  $\bar{\Delta}$  inekvivalensek.* A csillagos ábrázolások e három típusát (26.32a), (26.40a); (26.32b), (26.40b) és (26.31), (26.31a) szolgáltatja. E felsorolásból következik, hogy az unitér alcsoport valamely irreducibilis ábrázolása csak egyetlen irreducibilis csillagos ábrázolásban található meg. Ha  $\Delta$  és  $\bar{\Delta}$  ekvivalensek, akkor  $\Delta$  csak egyszer van meg a csillagos ábrázolásban, ha az (26.35a)-t, és kétszer, ha (26.35b)-t elégíti ki. Az is következik, hogy a csillagos ábrázolások irreducibilis részeit az unitér alcsoportnak megfelelő mátrixok irreducibilis részei, tehát az unitér alcsoport karaktere maradéktalanul meghatározzák. A csillagos ábrázolás a szokásoshoz hasonlóan nem bontható fel két lényegesen különböző módon. Végül pedig következik, hogy a sajátértékek típusainak — az unitér alcsoport által kínált felosztásán túl — további osztályozá-

sához az antiunitér operátorok nem vezetnek (tehát soha sem vezetnek új kvantumszámhoz)<sup>4</sup>. Ezért esnek egybe a sajátértékek. Így ha  $\Delta$  és  $\bar{\Delta}$  inekvivalensek, akkor a  $\Delta$  ábrázoláshoz tartozó sajátérték mindig egybeesik a  $\bar{\Delta}$  ábrázoláshoz tartozó sajátértékkel. Az antiunitér szimmetriaoperátorok felelőssé tehetők mátrixelemek eltűnéséért is.

Ne sajnálja az olvasó a fáradságot bebizonyítani azt, hogy az unitér ábrázolásnak mindig ilyen típusú kiterjesztése áll elő, tekintet nélkül arra, hogy a fenti számolásokban antiunitér operátor játssza  $\mathbf{a}_0$  szerepét. Más szóval be kell bizonyítani, hogy ha (26.32)-ben  $\mathbf{a}_0$ -át más  $\mathbf{u}_0\mathbf{a}_0$  antiunitér operátorral pótoljuk, akkor a megfelelő  $\bar{\Delta}$  és  $\Delta$  ekvivalensek, ha (26.32) fennáll. Kiderül, hogy ha  $\mathbf{a}_0$ -t  $\mathbf{u}_0\mathbf{a}_0$  helyettesíti, akkor (26.32)  $\beta$ -ja helyébe  $\gamma = (\mathbf{u}_0)\beta$  kerül. Továbbá attól függően, hogy  $\beta$  (26.35a)-t vagy (26.35b)-t teljesíti,  $\gamma$  a megfelelő egyenletet elégíti ki, csak  $\mathbf{a}_0$  helyébe  $\mathbf{u}_0\mathbf{a}_0$  kerül. Mindez a fenti elméletből következik, hiszen egy bizonyos  $\Delta$ -t tartalmazó csillagos ábrázolás típusa nem függhet a tetszőlegesen kiválasztott  $\mathbf{a}_0$  operátortól.

## AZ IDŐTÜKRÖZÉSI INVARIANCIA KÖVETKEZMÉNYEI

Tekintsük először a *teljes forgásszimmetria* esetét. Legyen természetes módon  $\mathbf{a}_0$  maga a  $\Theta$  időtükrözés. Következtetéseink nyilvánvalóan e választástól függetlenek. (26.17)-ből és (26.32)-ből következik, hogy most  $\bar{\Delta} = \Delta^*$ , vagy ahogyan ebben az esetben az ábrázolást a szokásos módon jelöljük,

$$\bar{\mathbf{D}}^{(J)} = \mathbf{D}^{(J)*}. \quad (26.42)$$

A  $\mathbf{D}^{(J)}$ -t ez alakba transzformáló  $\beta$  éppen  $\mathbf{C}^{-1} = \mathbf{C}^\dagger$  (24.3)-ból. Így  $\beta\beta^* = \mathbf{C}^{-1}\mathbf{C}^\dagger = \mathbf{1}$ , és mivel  $\mathbf{C}' = \mathbf{C}$  az egész  $J$ -re, azért  $\beta\beta^* = \mathbf{1}$ . Láttuk, hogy ekkor  $\Theta^2 = \mathbf{1}$ , amely vagy a spintől eltekintő *Schrödinger*-elméletnek, vagy pedig a páros számú elektron esetének felel meg. Tehát (26.35a) érvényes és a csillagos ábrázolások valamennyien első típusúak. Ugyanez igaz, ha az elektronok száma páratlan. Ekkor  $J$  páratlan és  $\beta\beta^* = \mathbf{C}^{-1}\mathbf{C}' = -\mathbf{C}\mathbf{C}^\dagger = -\mathbf{1}$ , tekintve, hogy most  $\mathbf{C} = -\mathbf{C}'$ . Mivel  $\Theta^2 = -\mathbf{1}$ , ha az elektronok száma páratlan, az összes csillagos ábrázolás ismét első típusú. *A teljes forgásszimmetria esetén az időtükrözés nem vezet semmilyen további degenerációhoz.*

<sup>4</sup> Ez nincs ellentétben az elemi részecskék elméletének „típusai”-val. Ezek a fizikai szimmetriát kifejező operátorok csoportjában különböznek. Így az 1. és 2. típusú részecskékre  $\Theta^2 = (-1)^{2s}$  míg a 3. és 4. típusúakra  $\Theta^2 = -(-1)^{2s}$ , ahol  $s$  a részecske spinje. A különböző típusokra az operátorok csoportjának más a szorzási szabálya. Minden szorzási táblához csak egy csillagos ábrázolás tartozik.

A sajátfüggvények valóssági viszonyait illetően azonban az időtükrözés igenis jelentős következményekkel jár. Tekintve, hogy (26.39a) vagy (26.40a) miatt ekkor  $\mathbf{D}(\mathbf{a}_0) = \mathbf{D}(\Theta) = \beta = \mathbf{C}$ , az egyszerű *Schrödinger*-elméletben írhatjuk, hogy

$$\Theta \psi_{\mu}^l = \psi_{\mu}^{l*} = \sum_{\mu'} C_{\mu' \mu} \psi_{\mu'}^l = (-1)^{l-\mu} \psi_{-\mu}^l. \quad (26.43)$$

$\mathbf{C}$ -re a (24.6)-ban megadott alakot használtuk. Vegyük észre, hogy (26.43) egy fázistényező megválasztását jelenti. Ez történt akkor, amikor  $\mathbf{D}(\mathbf{a})$ -t  $\omega\beta$  helyett  $\beta$ -val tettük egyenlővé (26.39a)-ban<sup>5</sup>. A jelen esetben, ha  $l-\mu$  páros, akkor  $\psi_{\mu}^l$ , és  $\psi_{-\mu}^l$ , ha pedig páratlan, akkor  $-\psi_{\mu}^l$  és  $\psi_{-\mu}^l$  egymás komplex konjugáltjai. Nevezetesen páros  $l$ -re  $\psi_{\mu}^l$  valós, páratlanra pedig tiszta imaginárius. Ugyanez az eredmény levezethető a He-atomnál  $G_{\mu}^l$ -re is a (19.18) hullámfüggvényben. Ekkor (19.19)-ből és (19.19a)-ból következik, hogy páros állapotra valamennyi  $G$  valós, páratlanra pedig tiszta imaginárius. E viszonyok természetesen megváltoztathatók úgy, ha egy ábrázolás különböző soraihoz tartozó valamennyi hullámfüggvényt egy közös tényezővel megszorozzuk.

A spint is figyelembe vevő elméletben (26.43) helyébe

$$\begin{aligned} \Theta \Psi_M^J(\dots, x_k, y_k, z_k, s_k, \dots) &= \\ &= i^{-s_1 - s_2 - \dots - s_n} \Psi_M^J(\dots, x_k, y_k, z_k, -s_k, \dots)^* = \\ &= \sum_{M'} C_{M'M} \Psi_{M'}^J(\dots, x_k, y_k, z_k, s_k, \dots) = \\ &= (-1)^{J-M} \Psi_{-M}^J(\dots, x_k, y_k, z_k, s_k, \dots) \end{aligned} \quad (26.43a)$$

kerül. Itt összefüggés az ellentétes spinirányú  $\Psi_M^J$  és  $\Psi_{-M}^J$  között áll fenn. Így például  $M=0$  esetén a hullámfüggvény valós, ha  $J$  és a spin  $Z$  komponense mindkettlen párosak vagy mindkettlen páratlanok.  $\Psi_0^J$  tiszta imaginárius, ha  $J$  páros és a spin  $Z$  komponense páratlan, vagy megfordítva.

Az előző megfontolások a 19. fejezetbelieknek felelnek meg, amennyiben információt szolgáltatnak a hullámfüggvényekre vonatkozóan. Ebből a mátrixelemek nagyságrendi viszonyaira is következtethetünk. A mátrixelemek azonban közvetlenül is vizsgálhatók, ez történt a 21. fejezetben, ahol az irreducibilis tenzor fogalmát bevezettük. Az ott követett gondolatmenethez hasonló az antiunitér operátorokra is alkalmazható. Tekintsünk például olyan szimmetrikus (vagyis skaláris)  $\mathbf{p}$  operátort, amely az időnek páratlan hatványát tartalmazza, tehát amelyre (26.12)

<sup>5</sup> A fázisnak ez a választása különbözik a 15. fejezetben a hullámfüggvényre megadott fázistól egy  $i^l$  tényezőben. A gömbharmonikusokat esetenként e tényezőt is beleértve definiálják. Lásd például L. C. BIEDENHARN, J. M. BLATT, M. E. ROSE, Rev. Mod. Phys. **24**, 249 (1952).

érvényes. Ilyen például bármelyik részecskére a koordinátavektor és a spin- (vagy pálya-) impulzus-momentum.

$$xS_x + yS_y + zS_z \quad \text{vagy} \quad xL_x + yL_y + zL_z,$$

vagy a koordináta és a sebesség skaláris szorzata stb. Az ilyen operátor várható értéke zérus, hacsak nincs véletlen elfajulás. Valóban a

$$\left( \sum a_\mu \Psi_\mu^J, \mathbf{p} \sum a_\nu \Psi_\nu^J \right) \quad (26.E.5)$$

kifejezésben a  $\mu \neq \nu$  tagok eltűnnek, mert  $\Psi_\mu^J$  és  $\mathbf{p}\Psi_\mu^J$  az ábrázolás különböző soraihoz tartoznak. A  $\mu = \nu$  tagok is eltűnnek; ez (26.8) és (26.43a) alapján így látható be:

$$\begin{aligned} (\Psi_\mu^J, \mathbf{p}\Psi_\mu^J) &= (\Theta \mathbf{p} \Psi_\mu^J, \Theta \Psi_\mu^J) = -(\mathbf{p} \Theta \Psi_\mu^J, \Theta \Psi_\mu^J) = \\ &= -(-1)^{2J-2\mu} (\mathbf{p} \Psi_{-\mu}^J, \Psi_{-\mu}^J) = -(\Psi_{-\mu}^J, \mathbf{p} \Psi_{-\mu}^J). \end{aligned} \quad (26.44)$$

Az utolsó lépés abból következik, hogy  $2J-2\mu$  mindig páros és  $\mathbf{p}$  (lévén fizikai mennyiség) hermitikus. (26.44) szerint  $(\Psi_\mu, \mathbf{p}\Psi_\mu)$  előjele  $\mu$  előjelének megváltoztatásával megfordul. Ám  $\Psi_\mu$  és  $\Psi_{-\mu}$  egymás partnerei és  $\mathbf{p}$  szimmetrikus operátor, így a két kifejezésnek egyenlőnek kell lennie. Ezért eltűnnek, így az egész (26.E.5) kifejezés zérus. Még számos hasonló példa van, s egyesek a mátrixelemek valós vagy imaginárius részeire vonatkozó következtetéseket is tartalmaznak. Így például ha  $\mathbf{p}$  az előbb felsorolt feltételeknek eleget tesz, de a

$$(\Psi_\mu^J, \mathbf{p}\Phi_\mu^J) \quad (26.E.6)$$

kifejezésben a két hullámfüggvény nem azonos, akkor a skalárszorzat tiszta imaginárius. Ez akkor lehetséges, ha  $\Psi_\mu^J$  és  $\Phi_\mu^J$  fázisait úgy határoztuk meg, hogy a csillagos ábrázolás mind a kettőre ugyanolyan alakú. Ez érvényes például, ha (26.43a) mindkettőre érvényes. Ha  $\mathbf{p}$  egy vektoroperátor  $Z$  komponense, vagy időtükrözéskor ehhez hasonlóan viselkedik, akkor (26.E.6) valós. Ezek a következtetések a (26.44)-ben rejlő érveléssel kaphatók és tetszőleges fokú irreducibilis tenzorra általánosíthatók.

Lássuk most viszont azt az esetet, amikor *nincs térbeli szimmetria*. Ekkor az unitér alcsoport az egységelemre korlátozódik,  $\Delta = (1)$ . Így  $\Delta$  és  $\bar{\Delta}$  azonos és  $\beta$  tetszőleges egységnyi abszolútértékű szám. Így  $\beta\beta^* = (1)$ . Másrészt  $\Theta^2 = 1$  páros és  $\Theta^2 = -1$  páratlan számú elektronra. Ennek eredményeképpen a csillagos ábrázolás (csupán egyetlen van!), az előbbi esetben első, ám páratlan elektronra, ha a spint is figyelembe vesszük, akkor második típusú. Ez utóbbi esetben minden karakterisztikus érték kétszeresen elfajult: ha  $\beta = (1)$ , akkor a két  $\psi_1, \psi_2$  hullámfüggvény tükrözéskor (26.40b) alapján

$$\Theta\psi_1 = -\psi_2, \quad \Theta\psi_2 = \psi_1 \quad (26.45)$$

szerint transzformálódik. Ez a *Kramer*-féle elfajulás az eredeti alakban. Az elfajulás már abból a tényből is következik, hogy ha  $\Theta$  olyan antiunitér operátor, amelyre  $\Theta^2 = -\mathbf{1}$ , akkor  $\psi$  és  $\Theta\psi$  mindig ortogonálisak egymásra. Ez (26.8)-ból következik:

$$(\psi, \Theta\psi) = (\Theta\Theta\psi, \Theta\psi) = (-\psi, \Theta\psi). \quad (26.45a)$$

Páros számú elektronra vagy az egyszerű *Schrödinger*-elméletben viszont nincs elfajulás és

$$\Theta\psi = \psi \quad (26.46)$$

érvényes megfelelően választott fázistényezővel. Ez az eset, amikor térbeli szimmetria nincs, de időtükrözési invariancia van, igen fontos olyan atom esetén, amely aszimmetrikus elektromos erőtérben van. Ez fordul elő alacsony szimmetriájú kristályban.

Utolsó példaként tekintsük a  $Z$  irányú mágneses tér esetét. Az unitér alcsoportot a 18. fejezetben határoztuk meg: ez a  $Z$  körüli  $\mathbf{O}_{\{\alpha, 0, 0\}}$  forgatásokból, valamint ezeknek és az  $\mathbf{O}_I$  tértükrözésnek a szorzataiból áll. Itt az érdekes az, hogy az időtükrözés nem szimmetriaelem, hanem csak az időtükrözésnek és annak az operációnak a szorzata, amely a mágneses tér irányát megfordítja. Ez utóbbi lehet bármely  $XY$  síkban fekvő tengely körüli  $\pi$  szögű forgatás, vagy bármely  $Z$  tengelyen átmenő síkra történő tükrözés. Az időtükrözés és  $Y$  tengely körül végzett  $\pi$  szögű forgatás  $\Theta\mathbf{O}_{\{0, \pi, 0\}}$  szorzata választható  $\mathbf{a}_0$  gyanánt. Így mivel  $\Theta$  és  $\mathbf{O}_R$  felcserélhető,

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_0^{-1} \mathbf{O}_{\{\alpha, 0, 0\}} \mathbf{a}_0 &= \mathbf{O}_{\{0, \pi, 0\}}^{-1} \Theta^{-1} \mathbf{O}_{\{\alpha, 0, 0\}} \Theta \mathbf{O}_{\{0, \pi, 0\}} = \\ &= \mathbf{O}_{\{0, \pi, 0\}}^{-1} \mathbf{O}_{\{\alpha, 0, 0\}} \mathbf{O}_{\{0, \pi, 0\}} = \mathbf{O}_{\{-\alpha, 0, 0\}}. \end{aligned}$$

A  $\beta$ -t meghatározó (26.32) egyenlet a következő:

$$\Delta(\{-\alpha, 0, 0\})^* = \beta^{-1} \Delta(\{\alpha, 0, 0\}) \beta. \quad (26.47)$$

A tértükrözést tartalmazó egyenlet automatikusan kielégül.  $\Delta(\{\alpha, 0, 0\}) = (e^{i\alpha})$  miatt (26.47) ismét azt adja, hogy  $\beta = (\omega)$ , tehát minden csillagos ábrázolás első típusú, ahogy az várható mágneses tér jelenlétében minden sajátérték egyszeres.  $\beta$ -t egységmátrixként felvéve, (26.39) szerint

$$\Theta \mathbf{O}_{\{0, \pi, 0\}} \psi_\mu = \psi_\mu, \quad (26.47a)$$

illetve (26.15c)-ből  $\Theta$  helyébe  $(-i)^n \mathbf{Q}_{\{0, \pi, 0\}} \mathbf{K}$ -t és  $\mathbf{O}_{\{0, \pi, 0\}}$  helyébe  $\mathbf{P}_{\{0, \pi, 0\}} \mathbf{Q}_{\{0, \pi, 0\}}$ -t helyettesítve

$$(-i)^n \mathbf{Q}_{\{0, \pi, 0\}} \mathbf{K} \mathbf{P}_{\{0, \pi, 0\}} \Phi_{\{0, \pi, 0\}} \psi_\mu = \psi_\mu.$$

Mivel  $\mathbf{P}$  és  $\mathbf{Q}_{\{0, \pi, 0\}}$  valósak és az utóbbi négyzete  $(-1)^n$ , kapjuk, hogy

$$i^n \mathbf{P}_{\{0, \pi, 0\}} \psi_\mu^* = \psi_\mu, \quad (26.47b)$$

vagyis

$$\begin{aligned} i^n \psi_\mu(-x_1, y_1, -z_1, s_1, \dots, -x_n, y_n, -z_n, s_n)^* = \\ = \psi_\mu(x_1, y_1, z_1, s_1, \dots, x_n, y_n, z_n, s_n), \end{aligned} \quad (26.47c)$$

s ez tetszőlegesen erős, homogén,  $Z$  irányú mágneses jelenlétében is érvényes. A  $\beta = (1)$  fázistényező választása ugyanaz, mint amelyet (26.43a)-ban tettünk  $\Psi_M^J$ -re (most  $M = \mu$ ), tehát a (26.47) egyenletek  $\Psi_M^J$ -re is érvényesek a fázistényező megváltoztatása nélkül. Ezek (26.43a)-ból úgy kaphatók, hogy rá  $\mathbf{O}_{\{0, \pi, 0\}}$ -t alkalmazzuk és felhasználjuk  $\Psi_M^J$  transzformációs tulajdonságait, valamint  $\mathbf{D}^{(J)}(\{0, \pi, 0\})$  explicit kifejezését.

## 27. AZ ÁBRÁZOLÁSI EGYÜTTHATÓK FIZIKAI JELENTÉSE ÉS KLASSZIKUS HATÁRÉRTKE

Az ábrázolási együtthatók, a három- $j$ -szimbólumok és a *Racah*-együtthatók jellegzetesen kvantummechanikai mennyiségek. Mint minden kvantummechanikai mennyiség, ezek is valószínűségi amplitúdóként interpretálhatók. E fejezet első célja ennek részletes kifejtése.

Az impulzusmomentum<sup>1</sup>  $j\hbar$  értéke és adott irányú komponensének  $\mu\hbar$  értéke bármely állapotra együtt adható meg. Azokat az állapotokat, amelyekben az impulzusmomentumot és annak  $Z$  komponensét ily módon előírtuk, a  $\Psi_\mu^j$  hullámfüggvények reprezentálják. Az impulzusmomentum két komponensét azonban nem lehetséges egyidejűleg előírni. Annak az állapotnak a hullámfüggvénye, amelyben  $\mu\hbar$  az impulzusmomentum  $Z'$  komponense,  $\mathbf{O}_R \Psi_\mu^j$  ahol az  $R$  forgatás  $Z'$ -t  $Z$ -be viszi át. Azonban a  $j=0$  esettől eltekintve az impulzusmomentum  $Z$  komponensének nincs az  $\mathbf{O}_R \Psi_\mu^j$  állapotban határozott értéke. Valóban az

$$\mathbf{O}_R \Psi_\mu^j = \sum_{\mu'} \mathbf{D}^{(j)}(R)_{\mu'\mu} \Psi_{\mu'}^j \quad (27.1)$$

egyenlet mutatja, hogy az impulzusmomentum  $Z$  komponense véges valószínűséggel vehet fel minden lehetséges értéket. A  $\mu'\hbar$  érték valószínűsége (27.1)-ből  $\Psi_{\mu'}^j$  kifejtési együtthatójának abszolútérték négyzete:  $|\mathbf{D}^{(j)}(R)_{\mu'\mu}|^2$ . Ez az ábrázolási együtthatók legegyszerűbb fizikai interpretációja. A három- $j$ - és hat- $j$ -szimbólumok hasonló értelmezését később adjuk meg.

A nagy kvantumszámok esetén a klasszikus fogalmak mindinkább alkalmazhatókká válnak. Ily módon lehetővé válik olyan állapotok definiálása, amelyekben az impulzusmomentum az összes irányban egyszerre korlátozható szűk tartományba. Ezt alább igazoljuk. Hasonlóképpen a három- és hat- $j$ -szimbólumoknak is a szokásos geometriai fogalmakkal értelmezhetőeknek kell lenniök a nagy kvantumszámok határesetében. Az ilyen interpretációk várhatóan e szimbólumok szimmetriatulajdonságait is magától érthetővé teszik. Valóban ez lesz a helyzet. A kvan-

<sup>1</sup> A kvantummechanika általános elveihez talán jobban illenék, ha azt mondanánk, hogy az impulzusmomentum négyzete  $j(j+1)\hbar^2$ .

tummechanikai mennyiségeknek a hasonló klasszikus fogalmakkal történő megközelítése azonban egyáltalán nem egyszerű, mert a klasszikus határesetet csak legalább egy indexükre történő átlagolás után közelítik meg. Ők maguk az átlag körül az alább részletesebben megvizsgált módon ingadozni fognak.

## ÁBRÁZOLÁSI EGYÜTTHATÓK

A

$$|D^{(j)}(R)_{\mu'\mu}|^2 = [d^{(j)}(\beta)_{\mu'\mu}]^2 \quad (27.E.1)$$

kifejezésnek legalábbis elvileg végrehajtható megfigyelések segítségével történő értelmezéséről az előző szakaszban szóltunk. (27.E.1) annak a valószínűségét adja meg, hogy az impulzusmomentum  $Z$  komponense  $\mu'\hbar$ , ha a  $Z'$  komponens  $\mu\hbar$  és a teljes impulzusmomentum<sup>1</sup>  $j\hbar$ . Az  $R$  forgatás a  $Z'$  irányt  $Z$ -be viszi át.  $Z$  és  $Z'$  között a szög  $\beta$ . (27.E.1) valóban csak  $\beta$ -tól függ, az  $R$  forgatás többi Euler-szögétől nem. Egy elektron spinjének transzformációs mátrixára (20.20) után hasonló interpretációt adtunk. A (27.E.1)-ben rejlő ábrázolási együtthatók értelmezését különösen GÜTTINGER hangsúlyozta.<sup>2</sup>

Az ábrázolási együtthatók fenti interpretációjából számos összefüggés következik. Ezek közül a legnyilvánvalóbb az, hogy a (27.E.1) kifejezésnek  $\mu'$ -ben és  $\mu$ -ben szimmetrikusnak kell lennie. Könnyű bebizonyítani, hogy

$$d^{(j)}(\beta)_{\mu'\mu} = (-1)^{\mu-\mu'} d^{(j)}(\beta)_{\mu\mu'}. \quad (27.2)$$

(24.7) és (19.14) is olyan összefüggések, amelyek *négyzete* (27.E.1) értelmezésébe beleillik.

Legyen (27.1)-ben  $\mu=j$ . Ekkor olyan állapotot kapunk, amelyben az impulzusmomentum párhuzamos  $Z'$ -vel. Annak valószínűsége, hogy most az impulzusmomentum  $Z$  komponense  $\mu\hbar$ , (27.2) és (15.27a) alapján

$$P(\mu) = \binom{2j}{j-\mu} \cos^{2j+2\mu} \frac{1}{2} \beta \sin^{2j-2\mu} \frac{1}{2} \beta. \quad (27.3)$$

Ha  $j$  nagy, akkor elvárjuk, hogy e kifejezésnek maximuma legyen a  $\mu_0=j \cos \beta$  értéknél, vagyis olyan  $\mu$ -nél, amelyet a klasszikus elméletből kapunk.  $\mu_0$  környezetében a  $P(\mu)$  valószínűséget úgy számolhatjuk ki a legegyszerűbben, ha feltesszük, hogy  $\mu_0=j \cos \beta$  értéke egész. Tekintve, hogy  $j$  nagy, ez nem lényeges megszorítás.

<sup>2</sup> P. GÜTTINGER: Z. Physik. 73, 169 (1932).



Ha  $\mu > \mu_0$ , akkor

$$P(\mu) = \frac{(2j)!}{(j-\mu)!(j+\mu)!} \cos^{2j+2\mu} \frac{1}{2} \beta \sin^{2j-2\mu} \frac{1}{2} \beta =$$

$$= \frac{(j-\mu_0)(j-\mu_0-1)\dots(j-\mu+1)}{(j+\mu_0+1)(j+\mu_0+2)\dots(j+\mu)} (\tan^2 \frac{1}{2} \beta)^{\mu_0-\mu} P(\mu_0),$$

és mivel

$$\operatorname{tg}^2 \frac{1}{2} \beta = \frac{1 - \cos \beta}{1 + \cos \beta} = \frac{j - \mu_0}{\mu_0 + j},$$

azért

$$P(\mu) = \frac{1 \left(1 - \frac{1}{j - \mu_0}\right) \left(1 - \frac{2}{j - \mu_0}\right) \dots \left(1 - \frac{\mu - \mu_0 - 1}{j - \mu_0}\right)}{\left(1 + \frac{1}{j + \mu_0}\right) \left(1 + \frac{2}{j + \mu_0}\right) \dots \left(1 + \frac{\mu - \mu_0}{j + \mu_0}\right)} P(\mu_0).$$

Ha  $\mu - \mu_0 \ll j + \mu_0$ , akkor igen jó közelítéssel

$$P(\mu) \approx \frac{e^{-(\mu - \mu_0)^2 / 2(j - \mu_0)}}{e^{(\mu - \mu_0)^2 / 2(j + \mu_0)}} P(\mu_0) =$$

$$= e^{-j(\mu - \mu_0)^2 / (j^2 - \mu_0^2)} P(\mu_0). \quad (27.4)$$

Ugyanez a képlet érvényes akkor is, ha  $\mu < \mu_0$ . A kvantumelméletben tehát  $P(\mu)$  Gauss-eloszlást követ ama  $\mu_0$  érték körül, amely  $\mu$  értékére a klasszikus elméletből adódnék. Eredményünk nem lenne ilyen egyszerű, ha olyan  $\mathbf{O}_R \Psi_\mu^j$  állapotot vizsgáltunk volna, amelyben  $\mu = j$ , mert az ilyen állapotban az impulzusmomentum iránya még a klasszikus elmélet szerint is minden olyan irány lehet, amely  $Z'$ -vel  $\vartheta$  szöget zár be; itt  $\cos \vartheta = \mu'/j$ . Csak ha  $\mu = \pm j$ , akkor egyértelmű ez az irány, akkor esik egybe  $Z$ -vel, illetőleg  $-Z$ -vel.

## A VEKTORCSATOLÁSI EGYÜTTHATÓK

A három- $j$ -szimbólumok vagy vektorcsatolási együtthatók legközvetlenebb fizikai interpretációja (24.20)-ban vagy a vele egyenértékű számos összefüggésben rejlik. (24.20) szerint

$$(2j+1) \begin{pmatrix} j & \kappa & \lambda \\ m & j_1 & j_2 \end{pmatrix}^2 = (2j+1) \begin{pmatrix} j & j_1 & j_2 \\ -m & \kappa & \lambda \end{pmatrix}^2 \quad (27.E.2)$$

annak valószínűsége, hogy a  $j_1$  és  $j_2$  vektorok<sup>3</sup>  $Z$  komponense  $\kappa$  illetőleg  $\lambda$ , ha a vek-

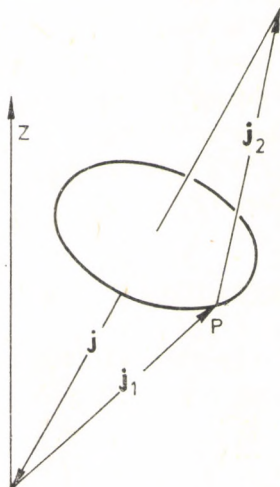
<sup>3</sup> A vektorokat az eddig használt gót betűk helyett most félkövér betűkkel jelöljük, mert az operátorokat a vektoroktól itt világosan meg lehet különböztetni.

torok összege  $\mathbf{j}$ , és  $\mathbf{j}$  iránya olyan, hogy  $Z$  komponense  $m$ .  $\mathbf{j}$ ,  $\mathbf{j}_1$  és  $\mathbf{j}_2$  viszonyai szimmetrikusabbá válnak, ha  $\mathbf{j}$ -t  $-\mathbf{j}$ -vel helyettesítjük, s így a  $\mathbf{j}_1$ ,  $\mathbf{j}_2$ ,  $\mathbf{j}$  vektorok összege zérus lesz. A klasszikus elméletben a helyzetet a 14. ábra mutatja. A  $\mathbf{j}_1$  vektor a kör bármely pontja felé mutathat; a  $\mathbf{j}_2$  vektor pedig e pontból indul ki. Világos, hogy ha a  $\mathbf{j}_1$ ,  $\mathbf{j}_2$ ,  $\mathbf{j}$  vektorok  $\mathbf{j}_1$ ,  $\mathbf{j}_2$ ,  $\mathbf{j}$  hossza és e vektoroknak a  $Z$  tengelymenti  $\kappa\lambda$  és  $m$  vetülete ( $\kappa + \lambda + m = 0$ ) adott, akkor a  $\mathbf{j}_1$ ,  $\mathbf{j}_2$ ,  $\mathbf{j}$  vektorok elrendezése meg van határozva, attól eltekintve, hogy az egész ábrát még a  $Z$  tengely körül el lehet forgatni. A  $\mathbf{j}_1$ ,  $\mathbf{j}_2$ ,  $\mathbf{j}$ ,  $\kappa$ ,  $\lambda$ ,  $m$  számok tehát az ábra olyan geometriai tulajdonságaival jellemezhetők, amelyek a  $Z$  tengely körüli forgatásokkal szemben invariánsak.

A 14. ábrán a kör egyenlő hosszúságú ívdarabjain  $\mathbf{j}_1$  végpontja egyenlő valószínűséggel helyezkedik el. Ezért, ha a kört állandó sebességgel egységnyi idő alatt körüljárjuk, akkor a  $z = \kappa$  és  $z = \kappa + 1$  síkok között töltött idő megadja annak valószínűségét, hogy  $\mathbf{j}_1$ -nek  $Z$ -re vetett vetülete éppen  $\kappa$ . A  $z = \kappa$  síkon a  $P$  pontban a kör érintőjének iránya  $\mathbf{j}_1 \times \mathbf{j}_2$ , az egységvektor ebben az irányban  $(\mathbf{j}_1 \times \mathbf{j}_2) / |(\mathbf{j}_1 \times \mathbf{j}_2)|$ . Ennek vetülete a  $Z$  irányra  $(\mathbf{j}_1 \times \mathbf{j}_2) \cdot \mathbf{e}_z / |(\mathbf{j}_1 \times \mathbf{j}_2)|$ . Itt  $\mathbf{e}_z$  a  $Z$  irányú egységvektor. Ha tehát a körön  $v$  sebességgel mozgunk, akkor a mozgás sebessége a  $Z$  irányban

$$v \frac{(\mathbf{j}_1 \times \mathbf{j}_2) \cdot \mathbf{e}_z}{|(\mathbf{j}_1 \times \mathbf{j}_2)|}$$

lesz. A  $z = \kappa$  és a  $z = \kappa + 1$  sík között eltöltött idő e mennyiség reciproka, pontosabban e reciprok kétszerese, hiszen a  $z$ -nek  $(\kappa, \kappa + 1)$  intervallumán a körüljárás so-



14. ábra

*A három-j-szimbólum geometriai interpretációja. A  $\mathbf{j}_1$  és  $\mathbf{j}_2$  impulzusmomentumok olyan  $\mathbf{j}$  teljes impulzusmomentummá tevődnek össze, amelynek  $Z$  komponense  $m$ . Így annak valószínűségét, hogy  $\mathbf{j}_1$  és  $\mathbf{j}_2$   $Z$  komponense  $\kappa$ , illetőleg  $\lambda = m - \kappa$ , (27.E.2) adja meg. E valószínűség aszimptotikus értéke arányos a kör ama ívének a hosszával, amely a  $Z = \kappa$  és  $Z = \kappa + 1$  síkok között fekszik*

rán kétszer haladunk át. A kör kerülete  $2\pi|\mathbf{j}_1 \times \mathbf{j}_2|/j$ , ez tehát a  $v$  sebesség. Így tehát annak valószínűsége, hogy  $Z$ -nek  $j_1$  komponense  $\kappa$  és  $\kappa+1$  közé essék,

$$\frac{2|(\mathbf{j}_1 \times \mathbf{j}_2)|}{|(\mathbf{j}_1 \times \mathbf{j}_2) \cdot \mathbf{e}_z|v} = \frac{2|(\mathbf{j}_1 \times \mathbf{j}_2)|}{|(\mathbf{j}_1 \times \mathbf{j}_2) \cdot \mathbf{e}_z|} \cdot \frac{j}{2\pi|(\mathbf{j}_1 \times \mathbf{j}_2)|}. \quad (27.5)$$

Ezt a valószínűséget adja meg (27.E.2) is, ha  $m$  helyébe  $-m$ -et írunk, ezért a három- $j$ -szimbólumok klasszikus megfelelője

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m & \kappa & \lambda \end{pmatrix}^2 \approx \frac{\delta_{m+\kappa+\lambda,0}}{2\pi|(\mathbf{j}_1 \times \mathbf{j}_2) \cdot \mathbf{e}_z|}. \quad (27.6)$$

Itt a  $j/(2j+1)$  szorzót  $\frac{1}{2}$ -del helyettesítettük. Ahogy azt előbb megjegyeztük, a  $j, j_1, j_2, m, \kappa, \lambda$  számok meghatározzák a  $\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, \mathbf{j}$  vektorokat ( $\mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2 + \mathbf{j}_3 = 0$ ) attól eltekintve, hogy e vektorok ábrája még  $Z$  körül elforgatható. (27.6) jobb oldala azonban nyilvánvalóan invariáns ilyen forgatással szemben. A fenti kifejezést úgy kapjuk, hogy a  $\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, \mathbf{j}$  vektorok által alkotott háromszög területét az  $XY$  síkra vetítjük, és e vetület  $4\pi$ -szeresének reciprokát vesszük. Ez a meghatározás azt is mutatja, hogy (27.6) nem változik meg, ha a  $\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, \mathbf{j}$  vektorokat felcseréljük. Mivel  $\mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2 + \mathbf{j}_3 = 0$ , ez (27.6)-ból közvetlenül is látszik.

A három- $j$ -szimbólum klasszikus határesetének explicit kifejezése a benne szereplő indexek segítségével a következő:

$$4\pi \begin{pmatrix} j & j_1 & j_2 \\ m & m_1 & m_2 \end{pmatrix} \approx \frac{\delta_{m_1+m_2+m,0}}{\left[ A^2 + \frac{1}{4}(j^2 m_1 m_2 + j_1^2 m_2 m + j_2^2 m m_1) \right]^{1/2}}, \quad (27.6a)$$

ahol  $A^2$  a  $j, j_1, j_2$  oldalú háromszög területének négyzete:

$$16A^2 = -j^4 - j_1^4 - j_2^4 + 2j^2 j_1^2 + 2j^2 j_2^2 + 2j_1^2 j_2^2. \quad (27.6b)$$

Éppen úgy, mint az előbb, csak a kvantummechanikai mennyiség — esetünkben a három- $j$ -szimbólum *négyzetének* adható klasszikus értelmezés. Ez természetes, mert a három- $j$ -szimbólumok *amplitúdók*, amelyeknek  $\psi$ -hez hasonlóan nincs közvetlen klasszikus megfelelője. Ezért csak akkor várható el, hogy (27.6) érvényes legyen, ha valamelyik indexére valamilyen ésszerű tartományban átlagolunk. Lehetséges azonban az, hogy mind  $\mathbf{D}$ , mind pedig a vektorcsatolási együtthatók interpretációjára félklasszikus fogalmakat használjunk. Az így kapott kifejezések<sup>4,5</sup> e mennyiségek előjelét is megadják. E félklasszikus kifejezések szintén csak akkor érvényesek, ha az összes kvantumszám nagy, azonban rámutatnak mind  $\mathbf{D}$ , mind pedig a három- $j$ -szimbólumok ingadozásaira abban a tartományban, amelyben képleteink átlagban érvényesek. Arra gondolhatnánk a három- $j$ -szimbólumok itt

<sup>4</sup> Lásd A. R. EDMONDS: Angular Momentum in Quantum Mechanics. (Princeton Univ. Press, 1957) 2. 7. szakasz és a 2. függelék.

<sup>5</sup> P. BRUSSARD, J. H. TOLHOEK, Physica, 23, 955 (1957).

megadott interpretációjából, hogy e mennyiségek eltűnnek, ha  $m_1$  olyan értéket vesz fel, amely a 14. ábra körének legalsó pontja alatt, vagy legfelső pontja felett helyezkedik el. Ilyen esetben (27.6a) nevezője képzetessé válik. A félklasszikus kifejezések azonban azt mutatják, hogy a három- $j$ -szimbólum ilyen  $m_1$ -re nem tűnik el, hanem csak exponenciálisan csökken  $m_1$ -nek olyan értékei felett és alatt, amelyek a 14. ábra körén a legalsó, illetőleg legfelső pontnak felelnek meg.

Ha  $m = -j$ , akkor a  $\mathbf{j}$  vektor a 14. ábrán  $Z$ -vel éppen ellentétes irányba mutat és a klasszikus elméletben  $\kappa$  és  $\lambda$  egyértelműen meghatározottá válik. Legyen értékük  $\kappa_0$  és  $\lambda_0$ . Ekkor

$$\kappa_0 + \lambda_0 = j, \quad (27.7)$$

és a  $j$ -re merőleges irányban a körsugarára ez adódik:

$$j_1^2 - \kappa_0^2 = j_2^2 - \lambda_0^2. \quad (27.7a)$$

E két egyenlet meghatározza  $\kappa_0$ -t és  $\lambda_0$ -t. A kvantumelméletben annak valószínűségét, hogy  $\mathbf{j}_1$  és  $\mathbf{j}_2$  vetülete  $\kappa$ , illetőleg  $\lambda$ , (27.E.2) adja meg. Jelölje e valószínűséget  $P(\kappa, \lambda)$ . A három- $j$ -szimbólumot (27.E.2)-ben  $m = -j$  esetére (17.27b) és (24.9a) szolgáltatja:

$$\begin{pmatrix} j & j_1 & j_2 \\ -j & \kappa & \lambda \end{pmatrix} = \quad (27.8)$$

$$= \frac{(-1)^{2j_1+j_2-\lambda} \delta_{\kappa+\lambda, j} [(2j)!(j_1+j_2-j)!(j_1+\kappa)!(j_2+\lambda)!]^{1/2}}{[(j+j_1+j_2+1)!(j-j_1+j_2)!(j+j_1-j_2)!(j_1-\kappa)!(j_2-\lambda)!]^{1/2}}.$$

Ily módon

$$P(\kappa, \lambda) = \text{állandó} \frac{(j_1+\kappa)!(j_2+\lambda)!}{(j_1-\kappa)!(j_2-\lambda)!}, \quad (27.9)$$

ahol az állandó  $\kappa$ -tól és  $\lambda$ -tól független.

A következő számolások nagyban egyszerűsödnek, ha feltesszük, hogy  $\kappa$  és  $\lambda$  klasszikus értékei, tehát  $\kappa_0$  illetőleg  $\lambda_0$  egészek. Ez nem lényeges feltevés, hiszen a  $P(\kappa, \lambda)$ -ra kapott kifejezés csak akkor érdekes, ha minden  $j$  és  $\kappa$ ,  $\lambda$  nagyok. Ha  $\kappa = \kappa_0 + n$  és  $\lambda = \lambda_0 - n$  ahol  $n$  pozitív, akkor

$$\begin{aligned} \frac{P(\kappa, \lambda)}{P(\kappa_0, \lambda_0)} &= \frac{(j_1+\kappa_0+1)(j_1+\kappa_0+2)\dots(j_1+\kappa_0+n)}{(j_2-\lambda_0+1)(j_2-\lambda_0+2)\dots(j_2-\lambda_0+n)} \times \\ &\times \frac{(j_1-\kappa_0)(j_1-\kappa_0-1)\dots(j_1-\kappa_0-n+1)}{(j_2+\lambda_0)(j_2+\lambda_0-1)\dots(j_2+\lambda_0-n+1)}. \end{aligned} \quad (27.9a)$$

(27.7a) miatt

$$(j_1 + \kappa_0)(j_1 - \kappa_0) = (j_2 - \lambda_0)(j_2 + \lambda_0).$$

Ha (27.9a) számlálóját és nevezőjét e kifejezés  $n$ -edik hatványával elosztjuk és felteesszük, hogy  $n$  kicsiny  $j_1 \pm \kappa$  és  $j_2 \pm \lambda$  értékéhez képest, akkor (27.9a) valamennyi tényezője igen kevésbé fog 1-től eltérni. Így (27.9a) az

$$(1 + h_1)(1 + h_2) \dots (1 + h_n) = e^{h_1 + h_2 + \dots + h_n}$$

képlet segítségével értékelhető ki. (27.7) és (27.7a) miatt tehát

$$\frac{P(\kappa, \lambda)}{P(\kappa_0, \lambda_0)} \approx \frac{\exp[-\kappa_0 n^2 / (j_1^2 - \kappa_0^2)]}{\exp[\lambda_0 n^2 / (j_2^2 - \lambda_0^2)]} = \exp(-jn^2 / (j_1^2 - \kappa_0^2)). \quad (27.9b)$$

Ugyanez a képlet érvényes akkor is, ha  $n$  negatív.

Ez a kifejezés annak a valószínűségét adja meg, hogy  $\kappa$  a klasszikus  $\kappa_0$  értéktől az  $n$  értékkel tér el, és igen hasonlít (27.4)-re, amely annak a valószínűsége, hogy  $\mu$  a klasszikus  $\mu_0$  értéktől tér el. E valószínűség ismét akkor a legnagyobb, ha  $\kappa = \kappa_0$  és nagy  $j, j_1, j_2, \kappa, \lambda$  esetén  $\kappa_0$  körül Gauss-eloszlást követ. Valóban, nagy kvantumszámok esetén a három- $j$ -szimbólumok és az ábrázolási együtthatók között igen nagy a hasonlóság<sup>6</sup>. Ez már a 14. ábrából is világos, amely az ábrázolási együtthatók interpretációjának alapjául szolgáló ábrába megy át, ha belőle elhagyjuk  $j_2$ -t és  $j$  ama részét, amely a kör síkján túlnyúlik.

## A RACA-EGYÜTTTHATÓK

A hat- $j$ -szimbólumok fizikai értelmezése a legvilágosabban (24.22)-ből hámazható ki. Ezen összefüggésben azon  $\chi_M^{jJ}$  hullámfüggvényeket, amelyekben  $j$  az 1. és 2. részecske teljes impulzusmomentuma, azon  $\Phi_M^{j'J}$  függvények szerint fejtjük ki, amelyekben  $j'$  az 1. és 3. részecske teljes impulzusmomentuma:

$$\chi_M^{jJ} = \sum_{j'} \sqrt{2j+1} \sqrt{2j'+1} (-1)^{2j_1} \begin{pmatrix} J & j_2 & j' \\ j_1 & j_3 & j \end{pmatrix} \Phi_M^{j'J}. \quad (27.10)$$

(27.10)-ben  $c(jJM; j'J'M) = \delta_{JJ'} \delta_{MM'} c^J(j; j')$  a (24.23a)-ban megadott hat- $j$ -szimbólummal fejeződik ki. Ebből következőleg

$$(2j+1)(2j'+1) \begin{Bmatrix} J & j_2 & j' \\ j_1 & j_3 & j \end{Bmatrix}^2 \quad (27.E.3)$$

annak a valószínűségét adja meg, hogy a  $\mathbf{j}_1$  és  $\mathbf{j}_3$  impulzusmomentumpk összegének hossza  $\mathbf{j}'$ , ha a  $\mathbf{j}_1$  és  $\mathbf{j}_2$  impulzusmomentumok  $j$  hosszúságú  $\mathbf{j}$  vektorra csatolódnak

<sup>6</sup> A. R. EDMONDS: idézett mű 2. függelék.

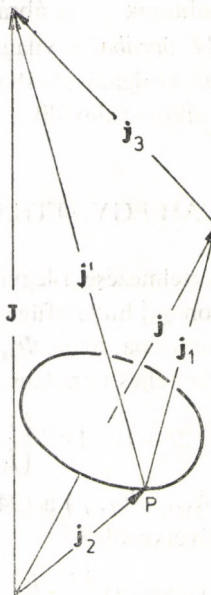
össze, majd  $\mathbf{j}_3$  e vektorhoz csatolva  $J$  hosszúságú impulzusmomentumot szolgáltat. A 15. ábra mutatja be a hat vektor elhelyezkedését. Ezek (általában szabálytalan) tetraédert alkotnak.

Ha a  $\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, \mathbf{j}, \mathbf{j}_3, \mathbf{J}$  vektorok hossza rögzített, akkor a  $\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, \mathbf{j}$  vektorok síkja még  $\mathbf{j}$  körül elforgatható. A 15. ábrán a  $P$  pont ekkor olyan kört ír le, amelynek középpontja  $\mathbf{j}$ -re illeszkedik. E körön az egyenlő ívek valószínűsége egyforma.  $j'$  valamely adott értékének valószínűsége a három- $j$ -szimbólumok interpretációjakor követett módszerrel számolható ki. A  $P$  pontban a kör érintő egységvektora  $(\mathbf{j}_1 \times \mathbf{j}_2) / |(\mathbf{j}_1 \times \mathbf{j}_2)|$ . Ámde  $j'$  egységnyi tartományának valószínűsége e vektor  $j'$ -menti vetületével fordítottan, vagyis a

$$\frac{|(\mathbf{j}_1 \times \mathbf{j}_2)|}{(\mathbf{j}_1 \times \mathbf{j}_2) \cdot \mathbf{j}' / j'}$$

mennyiséggel egyenesen arányos. Az arányossági tényező a kör félkerületének vagyis  $\pi |(\mathbf{j}_1 \times \mathbf{j}_2)| / j$ -nek reciproka. Nagy  $j$  kvantumszámok határesetében (27.E.3) így alakul:

$$(2j+1)(2j'+1) \begin{pmatrix} J & j_2 & j' \\ j_1 & j_3 & j \end{pmatrix} \approx \frac{|(\mathbf{j}_1 \times \mathbf{j}_2)|}{(\mathbf{j}_1 \times \mathbf{j}_2) \cdot \mathbf{j}'} \cdot \frac{j}{\pi |(\mathbf{j}_1 \times \mathbf{j}_2)|}. \quad (27.11)$$



15. ábra

A Racah-együttható geometriai interpretációja. A  $\mathbf{j}_1$  és  $\mathbf{j}_2$  impulzusmomentumból tevődik össze a  $\mathbf{j}$  impulzusmomentum. Ez aztán  $\mathbf{j}_3$ -mal adja ki a teljes  $\mathbf{J}$  impulzusmomentumot. Annak valószínűségét, hogy  $\mathbf{j}_3$  és  $\mathbf{j}_1 j'$  nagyságú impulzusmomentumot szolgáltatnak, a (27.E.3) Racah-együttható adja meg. E valószínűség aszimptotikus értéke arányos a kör ama ívének hosszával, amelynek pontjai a  $\mathbf{J}$  vektor végpontjától  $j'$  és  $j'+1$  közé eső távolságra vannak

Ha  $j/(2j+1)$ -et és  $j'/(2j'+1)$ -et  $\frac{1}{2}$ -del helyettesítjük, akkor

$$\begin{pmatrix} J & j_2 & j' \\ j_1 & j_3 & j \end{pmatrix} \approx \frac{1}{4\pi(\mathbf{j}_1 \times \mathbf{j}_2) \cdot \mathbf{j}} \quad (27.12)$$

A hat-j-szimbólum négyzete aszimptotikusan a szimbólum vektoraiból alkotott tetraéder köbtartalmának reciprokával arányos, az arányossági tényező  $24\pi$ . A közeledés ehhez az aszimptotikus értékhez ugyanolyan jellegű, mint a három-j-szimbólumok esetén. (27.12) bal oldalának csak legalább az egyik  $j$ -re vett átlagától várható el, hogy a jobb oldalhoz konvergáljon.

...

### ...

...

$$\begin{pmatrix} \dots \\ \dots \\ \dots \end{pmatrix} \approx \dots$$

### ...

...

## MEGÁLLAPODÁSOK

E függelékben a koordinátákra, a forgatásokra és a fázisokra jelen kiadásban használt megállapodásokat összegeztük. Ezek azonosak azokkal, amelyeket ROSE<sup>2</sup> használ, és az az előnyük, hogy CONDON és SHORTLEY<sup>3</sup> hullámfüggvényeihez, WIGNER ábrázolási együtthatóhoz<sup>4</sup> és a vektorcsatolási együtthatók legerjedtebben használt konvencióihoz<sup>3,4,5,6</sup> vezetnek, ha áttérünk WIGNER eredeti balkezes koordináta-rendszeréről a szokásosabb jobb rendszerre. Így a minimálisra csökkentjük azt a zavart, amely a fizikai irodalomra történő hivatkozásoknál a konvenció vonatkozásában támad, és a balkezes koordináták hátránya is kiküszöbölődik.

Az ábrázolási, az átsatolási és a vektorcsatolási együtthatókra vonatkozó jelekre és fázisviszonyokra EDMONDS<sup>6</sup> közöl teljesebb összefoglalást.

## 1. Koordináták

Ebben a könyvben használt koordináták olyanok, hogy a pozitív  $x$  tengelynek a pozitív  $y$  tengely felé történő (pozitív) elforgatása a jobb menetű csavart a pozitív  $z$  tengely irányába hajtáná előre. Az  $r$ ,  $\vartheta$ ,  $\varphi$  gömbi koordinátákat az

$$\begin{aligned} r &= \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \\ \vartheta &= \arccos \left( \frac{z}{r} \right) \\ \varphi &= \arcsin (y/\sqrt{x^2 + y^2}) \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

egyenletek definiálják. Ezt a 166. oldalon a 7. ábra illusztrálja.

<sup>1</sup> Ezt a függeléket az angol fordításhoz csatolták.

<sup>2</sup> M. E. ROSE: *Multipole Fields*. (Wiley, New York, 1955).

<sup>3</sup> E. U. CONDON, G. H. SHORTLEY: *The Theory of Atomic Spectra* (Cambridge Univ. Press, London és New York, 1953).

<sup>4</sup> E. P. WIGNER: *Gruppentheorie und ihre Anwendung auf die Quantenmechanik der Atompektren* (Vieweg, Braunschweig, 1931), amely a jelen mű eredeti kiadása.

<sup>5</sup> G. RACAH: *Phys. Rev.* **62**, 438 (1942); **63**, 367 (1943).

<sup>6</sup> A. R. EDMONDS: *Angular Momentum in Quantum Mechanics*. (Princeton Univ. Press, Princeton, New Jersey, 1957).



## 2. Forgatások

Az  $R$  forgatást az  $\{\alpha, \beta, \gamma\}$  Euler-szögekkel adjuk meg. Minden forgatáshoz egy  $\mathbf{P}_R$  operátor tartozik, amely (a) a fizikai teret a  $z$  tengely körül  $\alpha$  szöggel, (b) az  $y$  tengely körül  $\beta$  szöggel, (c) a  $z$  tengely körül  $\gamma$  szöggel forgatja el. A fizikai tér ezen forgatásai során a koordinátatengelyek nem mozdulnak el. Minden forgatáshoz egy  $\mathbf{R}_R$  mátrixú koordinátatranszformáció is hozzá tartozik. Ez elforgatja a koordinátatengelyeket (a) a  $z$  tengely körül  $\gamma$  szöggel, (b) az új  $y$  tengely körül  $\beta$  szöggel, (c) az új  $z$  tengely körül  $\alpha$  szöggel. Tehát<sup>7</sup>

$$\mathbf{R}_R = \mathbf{R}_{\{\alpha\beta\gamma\}} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \beta & 0 & -\sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \beta & 0 & \cos \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \gamma & \sin \gamma & 0 \\ -\sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.2})$$

A koordináta-rendszernek elforgatása  $\mathbf{R}_{\{\alpha\beta\gamma\}}$ -val fizikailag teljesen egyenértékű a fizikai térnek a fordított  $\mathbf{P}_{\{\alpha\beta\gamma\}}^{-1}$ -gyel történő elforgatásával:  $\mathbf{P}_{\{\alpha\beta\gamma\}}^{-1} = \mathbf{P}_{\{\pi-\gamma, \beta, -\pi-\alpha\}}$ ;

$$f(\mathbf{R}_R \mathbf{r}) = (\mathbf{P}_R^{-1} f)(\mathbf{r}), \quad (\text{A.3})$$

ahol azért írtunk  $(\mathbf{P}_R^{-1} f)$ -et, hogy hangsúlyozzuk:  $\mathbf{P}$  az  $\mathbf{r}$  koordináták új függvényéhez vezet. Legyen

$$\mathbf{P}_R^{-1} f(\mathbf{r}) = g(\mathbf{r}). \quad (\text{A.4})$$

Ekkor  $f(\mathbf{r}) = \mathbf{P}_R g(\mathbf{r})$  és (A.3) átmeny (11.19)-be, amelyet  $\mathbf{P}_R$  meghatározására használtunk:<sup>8</sup>

$$\mathbf{P}_R g(\mathbf{r}') = g(\mathbf{r}), \quad (\text{A.5})$$

$$\mathbf{r}' = \mathbf{R}_R \mathbf{r}.$$

Itt a későbbiek miatt megjegyezzük, hogy (A.2) szerint az  $\mathbf{R}_{\{\alpha\beta\gamma\}}$  mátrix a  $(0, 0, z_1)$  pontot, amelynek polárkoordinátái  $(r = z_1, \vartheta = 0, \phi = 0)$ , az  $(r' = z_1, \vartheta' = \beta, \phi' = \pi - \alpha)$  polárkoordinátájú  $(x', y', z')$  pontba viszi át.

<sup>7</sup> Lásd a (15.14a) egyenlettől a (15.15) egyenletig az összefüggéseket.

<sup>8</sup> A  $\mathbf{P}_S \mathbf{P}_R f(x)$  szorzatok kiértékelésénél az operátorokat balról jobbra menve kell alkalmazni (lásd a 11. fejezetet), csak így biztosítható, hogy  $\mathbf{P}_S \mathbf{P}_R \equiv \mathbf{P}_{SR}$ .

### 3. A forgáscsoport ábrázolásai és a gömbharmonikusok

A (11.23) vagy a (11.26) egyenlet az ábrázolási mátrixot a  $\mathbf{P}_R$  operátorral és a  $\psi_\lambda(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n)$  partnerfüggvényekkel definiálja:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_R \psi_\lambda(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n) &= \\ &= \sum_{\kappa} D(R)_{\kappa\lambda} \psi_\kappa(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n), \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

vagy ami ezzel egyenértékű:

$$\begin{aligned} \psi_\lambda(x'_1, y'_1, z'_1, \dots, x'_n, y'_n, z'_n) &= \\ &= \sum_{\kappa} D(R)^*_{\lambda\kappa} \psi_\kappa(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n), \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

ahol

$$\mathbf{r}'_i = \mathbf{R}_R \mathbf{r}_i.$$

A forgáscsoport esetére az  $Y_{l,m}(\vartheta, \phi)$  gömbharmonikusok a partnerfüggvények ( $-l \leq m \leq +l$ ) és  $D^{(l)}(R)_{km}$  az ábrázolási mátrix. Így (A.6) szerint

$$Y_{l,m}(\vartheta', \phi') = \sum_k D^{(l)}(R)^*_{mk} Y_{l,k}(\vartheta, \phi). \quad (\text{A.8})$$

Ez az egyenlet megadja a gömbharmonikusokat bármely  $\vartheta'$ -re és  $\phi'$ -re a  $\vartheta=0$  és  $\phi=0$  helyen felvett értékeikkel és a  $D^{(l)}_{km}$ -ekkel;

$$Y_{l,m}(\vartheta, \phi) = \sum_k D^{(l)}(R)^*_{mk} Y_{l,k}(\vartheta=0, \phi=0). \quad (\text{A.9})$$

Itt  $R$  az a forgatás, amelynek  $\mathbf{R}_R$  mátrixa a  $Z$  tengelynek origótól  $r$  távolságra levő pontját az  $r, \vartheta, \phi$  polárkoordinátájú pontba viszi át. Ahogy azt az előző szakaszban jeleztük, e forgatás  $R = \{\pi - \phi, +\vartheta, \gamma\}$ . Megmutattuk a 15. fejezetben, hogy csak az a  $Y_{l,0}$  nem zérus a  $\vartheta=\phi=0$  pontban. Ezért (A.9) igen egyszerű:

$$Y_{l,m}(\vartheta, \phi) = D^{(l)}(\{\pi - \phi, \vartheta, \gamma\})^*_{m0} Y_{l,0}(\vartheta=0, \phi=0). \quad (\text{A.10})$$

CONDON és SHORTLEY<sup>3</sup> művével egybehangzóan  $Y_{l,0}(0, 0)$ -t valósnak és pozitívnak vesszük, tehát

$$Y_{l,m}(\vartheta, \phi) = (\text{állandó}) \cdot (-1)^m e^{im\varphi} d^{(l)}(\vartheta)_{m0}. \quad (\text{A.11})$$

Ez a (19.8b) egyenletben kimondott összefüggés a gömbharmonikusok és az ábrázolási együtthatók között. Maguk a gömbharmonikusok ugyanazok, amelyeket CONDON és SHORTLEY használnak.

#### 4. A vektorcsatolási együtthatók

A 17. fejezetben megemlégtettük, hogy az a követelmény, mely szerint az

$$S_{Lm; \mu\nu}^{(l, \bar{l})} = S_{L, \mu, \nu}^{(l, \bar{l})} \delta_{m, \mu+\nu}$$

mátrixszal a  $\Psi_{\mu}^{l_1} \Psi_{\nu}^{l_2}$  szorzatoknak  $\mathbf{D}^{(L)}_{\mu+\nu}$  sorához tartozó lineáris kombinációit állítjuk elő, e mátrix alakját nem szabja meg egyértelműen. (17.21) rögzíti azt a feltételt, mely már egyértelművé teszi a vektorcsatolási együtthatókat:

$$S_{L, l, -\bar{l}}^{(l, \bar{l})} = |S_{L, l, -\bar{l}}^{(l, \bar{l})}| > 0. \quad (\text{A.12})$$

CONDON és SHORTLEY<sup>3</sup>, valamint RACAH,<sup>5</sup> ROSE<sup>2</sup> és EDMONDOS<sup>6</sup> ebben követi WIGNERT<sup>4</sup>.

A vektorcsatolási együtthatókkal a 24. fejezet három- $j$ -szimbólumaira

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j_1-j_2-m_3}}{\sqrt{2j_3+1}} \cdot S_{j_3 m_1 m_2}^{(j_1 j_2)} \delta_{m_1+m_2+m_3, 0}. \quad (\text{A.13})$$

#### 5. A Racah-együtthatók és a hat- $j$ -szimbólumok

Az ebben a műben használt átcsatolási együtthatók, vagy másként hat- $j$ -szimbólumok RACAH  $W$  együtthatóival a következőképpen függnek össze:

$$W(j_1 j_2 l_1 l_2; j_3 l_3) = (-1)^{j_1+j_2+l_1+l_2} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.14})$$

B) Függelék  
KÉPLETGYŰJTEMÉNY

*Perturbációs számítás*

$$V_{lk} = (\psi_l, \mathbf{V}\psi_k), \quad (5.8)$$

$$E_k = E_k + \lambda V_{kk} + \lambda^2 \sum_{l \neq k} \frac{|V_{lk}|^2}{E_k - E_l}, \quad (5.10)$$

$$\varphi_k = \psi_k + \lambda \sum_{l \neq k} \frac{V_{lk}}{E_k - E_l} \psi_l. \quad (5.11)$$

*Csoportelmélet*

A  $\sum_k$  szimbólum a véges csoportoknál összegezést jelent valamennyi csoportelemre, folytonos csoportnál a Hurwitz-integrált jelenti.

$$\sum_R J_R = \sum_R J_{SR}. \quad (7.1), (10.5)$$

A  $h$ -adrendű csoport unitér irreducibilis ábrázolásának ortogonalitási összefüggése a következő:

$$\sum_R D^{(j')}(R)_{\mu'\nu'}^* D^{(j)}(R)_{\mu\nu} = \frac{h}{l_j} \delta_{j'j} \delta_{\mu'\mu} \delta_{\nu'\nu}. \quad (9.32)$$

Itt  $l_j$   $\mathbf{D}^{(j)}$  dimenziója. A  $\chi^{(j)}(R) = \sum_{\mu} D^{(j)}(R)_{\mu\mu}$  karakterekre

$$\sum_R \chi^{(j')}(R)^* \chi^{(j)}(R) = h \delta_{j'j}. \quad (9.33)$$

Folytonos csoportokra  $h = \int_R 1$  helyébe  $\int dR$  kerül ((10.12), (10.13)).

*Ábrázolások és sajátfüggvények*

$x_j$ -t és  $x'_j$ -t valós, ortogonális  $\mathbf{R}$  transzformáció kapcsolja össze:

$$x'_j = \sum_i R_{ji} x^i, \quad x_i = \sum_j R_{ji} x'_j, \quad (11.18)$$

ekkor

$$\mathbf{P}_R f(x'_1, x'_2, \dots, x'_n) = f(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (11.19)$$

folytán

$$\mathbf{P}_{SR} = \mathbf{P}_S \mathbf{P}_R, \quad (11.20)$$

$$\mathbf{P}_R \psi_\nu = \sum_{\kappa} D(R)_{\nu\kappa} \psi_\kappa \quad (11.23)$$

és  $\mathbf{P}_S \mathbf{P}_R = \mathbf{P}_{SR}$  miatt

$$\mathbf{D}(SR) = \mathbf{D}(S) \mathbf{D}(R). \quad (11.25)$$

Végül

$$\mathbf{P}_R f_\kappa^{(j)} = \sum_{\lambda} D^{(j)}(R)_{\lambda\kappa} f_\lambda^{(j)} \quad \text{és} \quad \mathbf{P}_R g_{\kappa'}^{(j')} = \sum_{\lambda'} D^{(j)}(R)_{\lambda'\kappa'} g_{\lambda'}^{(j')}$$

következménye, hogy

$$(f_\kappa^{(j)}, g_{\kappa'}^{(j')}) = \frac{h}{I_j} \delta_{jj'} \delta_{\kappa\kappa'} \sum_{\lambda} (f_\lambda^{(j)}, g_\lambda^{(j')}). \quad (12.8)$$

*A háromdimenziós forgáscsoport irreducibilis ábrázolásai*

$$D^{(j)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{m'm} e = im'z \, d^{(j)}(\beta)_{m'm} e^{imj}. \quad (15.8)$$

$$\mathbf{D}^{(\frac{1}{2})}(\{\alpha, \beta, \gamma\}) = \begin{pmatrix} e^{-\frac{1}{2}i\alpha} \cos \frac{1}{2}\beta e^{-\frac{1}{2}i\gamma} & -e^{-\frac{1}{2}i\alpha} \sin \frac{1}{2}\beta e^{\frac{1}{2}i\gamma} \\ e^{\frac{1}{2}i\alpha} \sin \frac{1}{2}\beta e^{-\frac{1}{2}i\gamma} & e^{\frac{1}{2}i\alpha} \cos \frac{1}{2}\beta e^{\frac{1}{2}i\gamma} \end{pmatrix}. \quad (15.16)$$

$$\mathbf{D}^{(j)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{j\mu} = \sqrt{\binom{2j}{j-\mu}} e^{ij\alpha} \cos^{j+\mu} \frac{1}{2}\beta \sin^{j-\mu} \frac{1}{2}\beta e^{i\mu\gamma}, \quad (15.27a)$$

$$\chi^{(j)}(\varphi) = \sum_{\mu=-j}^j e^{i\mu\varphi}. \quad (15.28)$$

A  $\mathbf{D}^{(l)} \times \mathbf{D}^{(l)}$  pontosan egyszer tartalmazza a  $\mathbf{D}^{(L)}$  ábrázolást, ha

$$L = |l-l|, |l-l|+1, \dots, l+l-1, l+l, \quad (17.14)$$

$$D^{(l)}(R)_{\mu'\mu} D^{(\bar{l})}(R)_{\nu'\nu} = \sum_{\kappa=|l-\bar{l}|}^{l+\bar{l}} s_{L\mu'\nu'}^{(\bar{l})} D^{(L)}(R)_{\mu'+\nu'; \mu+\nu} s_{L\mu\nu}^{(\bar{l})}, \quad (17.16b)$$

$$s_{L\mu L-\mu}^{(\bar{l})} = \frac{(-1)^{l-\mu} \sqrt{(2L+1)!(l+L-L)!}}{\sqrt{(L+l+l+1)!(L+l-l)!(L-l+l)!}} \times \\ \times \sqrt{\frac{(l+\mu)!(l+L-\mu)!}{(l-\mu)!(l-L+\mu)!}}, \quad (17.27b)$$

$$\sum_{\mu} s_{L, \mu, m-\mu}^{(\bar{l})} s_{L', \mu, m-\mu}^{(\bar{l}')} = \delta_{LL'}, \quad (17.28)$$

$$\sum_L s_{L, \mu, m-\mu}^{(l)} s_{L', \mu', m-\mu'}^{(l')} = \delta_{\mu\mu'}.$$

### A Pauli-féle spinelmélet

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_R \Phi(x_1, y_1, z_1, s_1, \dots, x_n, y_n, z_n, s_n) &= \\ &= \sum_{t_1 = \pm 1} \dots \sum_{t_n = \pm 1} \mathbf{D}^{(t_1)}(R)_{\frac{1}{2} s_1, \frac{1}{2} t_1} \dots \mathbf{D}^{(t_n)}(R)_{\frac{1}{2} s_n, \frac{1}{2} t_n} \times \\ &\times \Phi(x_1, y_1, z_1, t_1, \dots, x_n, y_n, z_n, t_n), \end{aligned} \quad (21.6b)$$

$$\mathbf{O}_R = \mathbf{P}_R \mathbf{Q}_R = \mathbf{Q}_R \mathbf{P}_R. \quad (21.8)$$

### Irreducibilis tenzorok

$$\mathbf{O}_R^{-1} \mathbf{T}^{(\omega)} \mathbf{O}_R = \sum_{\sigma = -\omega}^{\omega} \mathbf{D}^{(\omega)}(R)_{\sigma\sigma} \mathbf{T}^{(\sigma)}, \quad (21.16b)$$

$$\mathbf{T}_{Nj\mu; N'j'\mu'}^{(\omega)} = (\Psi_{\mu}^{Nj}, \mathbf{T}^{(\omega)} \Psi_{\mu'}^{N'j'}), \quad (21.18)$$

$$\mathbf{T}_{Nj\mu; N'j'\mu'}^{(\omega)} = s_{j'\mu\omega}^{(j\omega)} \delta_{\mu+\omega, \mu'} \mathbf{T}_{Nj; N'j'}. \quad (21.19)$$

Itt  $s_{j'\mu\omega}^{(j\omega)}$  zérus, ha

$$|j - \omega| > j' \quad \text{vagy} \quad j' > j + \omega.$$

### Infinitezimális forgatások

A Descartes-koordináták infinitezimális elforgatásának megfelelő operátor:

$$\frac{1}{\hbar} \mathbf{L}_z \Psi = -i \frac{\partial}{\partial \alpha} \mathbf{P}_{\{z00\}} \Psi|_{\alpha=0}; \quad (18.7)$$

ugyanaz a spinkoordinátákra:

$$\frac{1}{2} (s_1 + s_2 + \dots + s_n) \Psi = \frac{1}{\hbar} \mathbf{S}_z \Psi = -i \frac{\partial}{\partial \alpha} \mathbf{Q}_{\{z00\}} \Psi|_{\alpha=0}. \quad (23.23a)$$

Ugyanez mindkét koordináta együttes forgatására:

$$\frac{1}{\hbar} (\mathbf{L}_z + \mathbf{S}_z) = -i \frac{\partial}{\partial \alpha} \mathbf{O}_{\{z00\}}|_{\alpha=0}. \quad (23.30a)$$

### A három-j-szimbólumok

1. Az összefüggés a három-j-szimbólumok és a vektorcsatolási együtthatók között:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j_1-j_2-m_3}}{\sqrt{2j_3+1}} s_{j_3 m_1 m_2}^{(j_1 j_2)} \delta_{m_1+m_2+m_3, 0}. \quad (24.9a)$$

2. A három-j-szimbólumok szimmetriái:

$$(-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & j_2 \\ m_1 & m_3 & m_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_3 & j_2 & j_1 \\ m_3 & m_2 & m_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ m_2 & m_1 & m_3 \end{pmatrix}, \quad (24.10)$$

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_2 & j_3 & j_1 \\ m_2 & m_3 & m_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_3 & j_1 & j_2 \\ m_3 & m_1 & m_2 \end{pmatrix}, \quad (24.10a)$$

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}. \quad (24.10b)$$

### A hat-j-szimbólumok

1. Összefüggés a három-j-szimbólumokkal:

$$(j_1 l_2 l')(l_1 j_2 l) = (-1)^{2l_1} \sum_j (2j+1) \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ l_1 & l_2 & l \end{pmatrix} (j_1 j_2 j)(l_1 l_2 j), \quad (24.24a)$$

$$(j_1 l_2 l_3)(l_1 j_2 l_3)(l_1 l_2 j_3) = \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{pmatrix} (j_1 j_2 j_3). \quad (24.24b)$$

(A fenti kovariáns jelölést lásd a 24. fejezetben.)

2. Tekintsük egy olyan  $\mathbf{T}^{(\sigma)}$  irreducibilis tenzor  $\sigma$ -adik komponensét, amely a helykoordinátákra  $p$ -ed fokú, a spinkoordinátákra nézve 0 fokú skalár. Ekkor a  $\mathbf{T}^{(\sigma)}$  operátornak az összes koordináta elforgatásakor  $\omega = p$  a foka. Ilyen operátorra (21.19) mintájára

$$(\Psi_{\mu}^{NJ}, \mathbf{T}^{(\sigma)} \Psi_{\mu'}^{N'J}) = (J^{\mu}, p^{\sigma}, J'_{\mu'}) T_{NJ; N'J}. \quad (24.27a)$$

(24.27a)-ban  $T_{NJ; N'J}$  a (21.19)-ben szereplő  $T_{NJ; N'J}$ -nek  $(-1)^{J-p-J'} \sqrt{2J'+1}$ -szereze. Ha mind  $\Psi_{\mu}^{NJ}$ -re, mind pedig  $\Psi_{\mu'}^{N'J}$ -re  $LS$  csatolás érvényes, akkor

$$T_{NJ; N'J} = (-1)^{2J-L+S+J'+p} \begin{pmatrix} J & p & J' \\ L' & S & L \end{pmatrix} \sqrt{2J+1} \sqrt{2J'+1} T_{NSL; N'S'L'}. \quad (24.30)$$

*Antiunitér operátorok*

A  $\Theta$  operátor antiunitér, ha bármely  $\Psi$  és  $\Phi$  állapotra

$$(\Theta\Phi, \Theta\Psi) = (\Phi, \Psi)^* = (\Psi, \Phi) \quad (26.8)$$

és

$$\Theta(\alpha\Phi + \beta\Psi) = \alpha^*\Theta\Phi + \beta^*\Theta\Psi. \quad (26.5)$$

Az antiunitér időtükrözés:

$$\Theta = s_{1y}s_{2y}\dots s_{ny}\mathbf{K}, \quad (26.15a)$$

$$\Theta = (-i)^n \Phi_{(0,\pi,0)} \mathbf{K}, \quad (26.15c)$$

ahol a  $\mathbf{K}$  operátor minden mennyiséget annak komplex konjugáltjával helyettesít.

Az antiunitér  $\mathbf{a}$  és unitér  $\mathbf{u}$  operátoroknak megfelelő mátrixok szorzási szabályai:

$$\begin{aligned} \mathbf{D}(\mathbf{u}_1)\mathbf{D}(\mathbf{u}_2) &= \mathbf{D}(\mathbf{u}_1\mathbf{u}_2), \\ \mathbf{D}(\mathbf{a})\mathbf{D}(\mathbf{u})^* &= \mathbf{D}(\mathbf{au}), \\ \mathbf{D}(\mathbf{u})\mathbf{D}(\mathbf{a}) &= \mathbf{D}(\mathbf{ua}), \\ \mathbf{D}(\mathbf{a}_1)\mathbf{D}(\mathbf{a}_2)^* &= \mathbf{D}(\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2). \end{aligned} \quad (26.21)$$



# TÁRGYMUTATÓ

## A

Abel-csoport *lásd* csoport

ábrázolás(ok) 80, 112

algebrája 123

antiszimmetrikus 138

asszociált 138

azonos 138, 169

dimenziója 81

direktszorzaté 185, 187

egész és félegész 175

együtthatók klasszikus határeseté 365

ekvivalens 81, 95

és karakterek 95

elektronsajátfüggvényekre 140

folytonos csoportoké 102

háromdimenziós forgáscsoporté 166, 170, 180, 181

egész, félegész 175

páros, páratlan számú elektronra 252

háromdimenziós forgás—tükrözés csoporté 188, 194

hozzátartozó függvények 123

hű, nem hű 80

karaktere 92, 95

kétdimenziós forgáscsoporté 158

kétdimenziós forgás—tükrözés csoporté 159

kétértékű 170, 175

komplex 301

komplex konjugált 300

ortogonalitási összefüggése 88, 111

páros, páratlan 175

potenciálisan valós 301

pszeudoreális 301

reducibilis, irreducibilis 81

redukció *lásd* kiredukálás

sajátértékekhez tartozó 130, 187

és sajátfüggvények 112

többértékű 260

szimmetrikus csoporté 138, 271

szorzó erejéig meghatározott 259

unitér 82, 111, 122

unitér csoporté 174

páros, páratlan 175

adjungált mátrix 31, 33

alcs csoport 68

indexe 70

invariáns 75

mellékosztályai 69

rendje 70

algebra, ábrázolásoké 123

állapot, kvantummechanikai 55

almátrix 26

alternáló csoport *lásd* csoport

antilineáris operátorok 33, 342

antiszimmetrikus

mátrix 32

ábrázolások 138

sajátértékek és sajátfüggvények 114

antiunitér operátorok 340, 343

normál alakban 343

árnyékolás, Coulomb-térre 326

asszociált ábrázolások 138, 194, 271

asszociatív törvény 13, 67

átcsatolás, impulzusmomentumé 314

átlós mátrix *lásd* mátrix

átlósösszeg *lásd* spur

átmeneti valószínűség 39, 207  
méréskor 58, 236  
összegszabálya 281  
sugárzás által indukált 60  
atomszínképek 189, *lásd még* színkép  
azimutális kvantumszám 193  
azonos ábrázolások *lásd* ábrázolás  
azonosság, csoportoké 67  
axiális vektor *lásd* vektor

## B

Bohr-féle frekvenciafeltétel 63  
Bohr-pálya 191

## C

Cayley—Klein paraméterek *lásd* paraméterek  
Clebsch—Gordan együtthatók *lásd* vektor-  
csatolási együtthatók  
ciklikus csoport *lásd* csoport  
ciklus, permutációé 135

## Cs

csillagos ábrázolások 351  
irreducibilis 355, 359  
redukciója 351  
csoport(ok)  
Abel- 67  
ábrázolása *lásd* ábrázolás  
alternáló 137  
axiómái 67  
ciklikus 70  
diéder 72  
definíciója 66  
direktszorzata 185  
egységeleme 67  
egyszerű 76  
egyszerűen és vegyesen folytonos 98, 100,  
109  
faktorcsoport 76, 78  
folytonos 97  
forgatásoké *lásd* forgáscsoport  
homomorfizmusa 78

infinitezimális 100  
izomorfizmusa 71, 77  
lefedő 261  
Lie- 100  
négyescsoport 71  
paraméterei 97, *lásd még* paraméterek  
példák 66, 70  
permutációs *lásd* szimmetrikus csoport  
rendje 67  
Schrödinger-egyenleté 116  
szimmetria *lásd* szimmetriacsoporthoz  
szimmetrikus *lásd* szimmetrikus csoport  
szorzás 67  
táblázat 66  
tér 68, 97, 155, *lásd még* paramétertér  
tükrözési *lásd* tükrözési csoport  
unitér unimoduláris *lásd* unitér unimodu-  
láris csoport  
véges 67  
végtelen 97  
csoportelem(ek) 66  
konjugáltja 73  
osztályai 73  
periódusa 68  
rendje 68  
szomszédos 97

## D

determináns és inverz, mátrixé 14  
diagonális alak, mátrixé 21  
diagonális mátrix *lásd* mátrix  
diéder csoport *lásd* csoport  
dimenzió, mátrixé 11  
ábrázolása 81  
dipólussugárzás *lásd* sugárzás  
Dirac-féle relativisztikus elektron 250  
direktszorzat  
csoportoké 185, 187, 194, 282, 330  
ábrázolásai 185, 187  
irreducibilis komponensei 197  
mátrixoké 25, 185, 186  
durvaszerkezet 267, 325

## E

egyszerű cs port *lásd* csoport  
 egyszerűenfolytonos csoport *lásd* csoport  
 Einstein-féle átmeneti valószínűség 60  
 ekvivalens ábrázolások 81, 95  
 és karakterek 95, *lásd még* ábrázolások  
 elektromos kvantumszám *lásd* kvantumszám  
 elektromos tér *lásd* Stark-effektus, sajátérték  
 stb.  
 elektron—elektron kölcsönhatások 324  
 elektronspin *lásd* spin  
 elemek, csoporté *lásd* csoport  
 elfajulás, sajátértékeké 46  
 normális 131  
 véletlen 131  
 energiaszintek 39, *lásd még* sajátértékek, spekt-  
 rum  
 és atomok fizikai és kémiai tulajdonságai  
 324  
 egyszerű rendszereké *lásd* hidrogén, hélium-  
 ion  
 közelítésben 337  
 építkezési elv 324  
 Epstein—Schwarzschild szeparációs elmélet  
*lásd* szeparációs elmélet  
 Euler-szögek 95, 165

## F

faktorcsoporth *lásd* csoport  
 felcserélhetőség és invariancia 127  
 felcserélési összefüggés 40  
 felhasadás  
 sajátértéké 53, 132  
 elektromos térben 216, 281  
 mágneses térben 213, 280, 293  
 színekpvonalaké 216, 281, 293  
 félegész ábrázolás *lásd* ábrázolás  
 ferde mátrix *lásd* mátrix  
 Fermat-tétel és tételek csoportokra 71  
 finomszerkezet 195, 264  
 komponensei 275  
 komponensek hullámfüggvényei 275  
 finomszerkezeti állandó *lásd* Sommerfeld  
 fizikai interpretáció  
 ábrázolási együtthatóké 365, 366

három-*j*-szimbólumoké 367  
 hat-*j*-szimbólumoké 371  
 fizikai mennyiségek 56  
 folytonos csoportok *lásd* csoportok  
 folytonosság, csoporté *lásd* csoportok  
 folytonos spektrum *lásd* spektrum  
 forgás  
 operátorok linearitása és uniteritása 244  
 szög 161  
 tengely 161  
 forgáscsoport 98, 154, 161  
 ábrázolásai 158  
 háromdimenziós 161  
 Hurmitz-integrálja 107  
 karaktere 181  
 kétdimenziós 155  
 mátrixok 155  
 osztályai 156, 157, 162  
 és unimoduláris csoport 172  
 forgás—tükrözés 154, 282  
 forgás—tükrözés csoport 154, 156, 188  
 forgatás 98, 154, 235  
 állapoté 235  
 Descartes-koordinátáké 235, 238, 264, 330  
 spinkoordinátáké 235, 238, 264, 273, 330  
 és permutációk 274  
 valódi, nem valódi 154  
 forgatás operátorai  
 csak spinre 237, 265  
 spinnel 235, 237, 244, 251  
 spin nélkül 115, 235  
 főkvantumszám 192  
 főtengely-transzformáció 28  
 fundamentális tartomány 221  
 függvények  
 ortogonális 42  
 ábrázoláshoz tartozó 129  
 ábrázolás sorához tartozó 123  
 függvényvektor 43

## G

*g*-képlet *lásd* Landé  
 Gram—Schmidt-féle ortogonalizálás *lásd* orto-  
 gonalizálás  
 gömbharmonikus 166, 224  
 gömbszimmetria, S állapoté 223

## H

- Hamilton-operátor 41, 55  
 mágnesees téré 214, 292  
 harmonikus oszcillátor 39  
 harmonikus polinomok 159, 166  
 három- $j$ -szimbólumok 305  
 klasszikus határese 369  
 kovariáns, kontravariáns 307  
 szimmetriái 305  
 tömör jelölés 315  
 Hartree-elmélet, árnyékolásé 326  
 hasonlósági transzformáció  
 invariancia 28  
 mátrixokra 17, 24, 28, 121  
 hat- $j$ -szimbólumok 314  
 és csoport 318  
 kiszámítása 317  
 klasszikus határese 372  
 szimmetriái 316  
 Heisenberg mátrixok 39  
 héliumatom 228, 297  
 héliumion 191  
 helyes lineáris kombináció *lásd* perturbáció  
 elmélet  
 hermitikus  
 mátrix 32, 34  
 operátor 44  
 hidrogén  
 hullámfüggvények 191, 224  
 színképe 190  
 hipergeometrikus függvények 227  
 és az ábrázolási együtthatók 227  
 homomorfizmus 78  
 az unitér és a forgáscsoport között 179  
 Hönl—Kronig intenzitás képletek 233, 288, 320  
 hullámeqyenlet *lásd* Schrödinger  
 hullámfüggvény 42  
 és fizikai állapot 57  
 Hurwitz-integrál 107  
 háromdimenziós forgáscsoportra 165  
 kétdimenziós forgáscsoportra 157  
 kevert folytonos csoportokra 109

## I

- idempotens operátorok *lásd* operátorok  
 időtükrözés 340  
 invariancia következményei 360  
 operátora 345  
 impulzusmomentum  
 egy tengelymenti vetülete 193  
 kiválasztási szabályok 195, 279  
 pályáé 193  
 pályakvantumszám 195  
 sajátfüggvények 167, 224, 275  
 teljes kvantumszám 195, 249, 275  
 index, alcsoporté *lásd* alcsoport  
 infinitezimális csoport *lásd* csoport  
 intenzitás szabály *lásd* Hönl—Kronig  
 integrál folytonos csoportra *lásd* Hurwitz-  
 integrál  
 interkombinációs tilalom 208, 332  
 intervallumszabály *lásd* Landé  
 invariancia forgatással szemben 242, 252, 264  
 invariáns integrál *lásd* Hurwitz-integrál  
 invariáns operátor *lásd* szimmetrikus operá-  
 torok  
 invariáns sűrűség paraméterterben 104  
 involutorikus fizikai operátorok 344  
 irreducibilis  
 ábrázolások *lásd* ábrázolás  
 szekuláris egyenlet 133  
 tenzorok *lásd* tenzorok  
 irreducibilis komponensek  
 ábrázolásé 95, 197  
 típusa és száma 169  
 irreducibilitás  
 ábrázolásé 81  
 forgáscsoporté 158, 160, 168  
 unitér csoporté 178  
 izomorfizmus 71, 77

## J

- Jacobi-polinomok *lásd* hipergeometrikus függ-  
 vények

## K

kanonikus transzformáció 60, 236, 248  
 karakter(ek)  
   ábrázolásé 92  
   forgáscsoporté 168, 181  
   ekvivalens ábrázolásoké 95  
   normálása 93  
   ortogonalitása 92, 111, 169  
   szimmetrikus csoporté 150  
   ugyanazon osztály elemeié 92  
   unitér csoporté 179  
 képzetes mátrix *lásd* mátrixok  
 kétértékű ábrázolások *lásd* ábrázolások  
 kevert folytonos csoportok *lásd* csoport  
 kilenc-*j*-szimbólumok 321  
 kiredukálás  
   ábrázolásé 94  
   csillagos ábrázolásé 351  
   forgáscsoporté 197  
   szimmetrikus csoporté 144  
 kiszélesedés, szinteké és vonalaké 277  
 kiválasztási szabályok 195, 207, 277, 279  
   elektromos térben 217, 284  
   mágneses térben 212, 280  
   spin figyelembevételével 279  
 kizárási elv *lásd* Pauli-elv  
 klasszikus határeset  
   ábrázolási együtthatóké 365  
   három-*j*-szimbólumoké 369  
   hat-*j*-szimbólumoké 372  
 kombináció  
   szimmetriáké 184  
   rendszereké 196  
 kommutatív törvény 67  
 komponens *lásd* vektorok, impulzusmomentum, irreducibilis komponensek stb.  
 komplex konjugálás és antiunitér operátorok 343  
 komplex ortogonális mátrix *lásd* mátrixok speciális típusai  
 komplexus, elemeké 77  
 konfigurációk 328  
   megengedett elektron 329, 333  
 konfigurációs tér 40, 115  
 konjugált csoportelemek *lásd* csoportelemek kovariáns és kontravariáns  
   ábrázolási együtthatók 310

három-*j*-szimbólumok 307  
 kölcsönhatás  
   atomnak mágneses térrel 214, 292  
   elektronoké 325  
   spin—pálya 276, 292  
   spin—spin 294, 327  
 kristály 219  
 Kronecker-szimbólum 14  
 kvadrúpólussugárzás *lásd* sugárzás  
 kvantumelmélet 39  
 kvantummechanikai merev testek 224, 225  
 kvantumszám  
   azimutális 193  
   elektromos 217, 284  
   mágneses 193, 214  
   multiplét 193  
   pályaimpulzus-momentum 193  
   teljes impulzusmomentum 195, 249, 279

## L

Landé-féle *g*-képlet 292, 320  
 Landé-féle intervallumszabály 294, 318, 323  
 Laplace-egyenlet 195, 166  
 Laporte-szabály 210, 217, 279, 285  
 lefedőcsoport *lásd* csoport  
 Lie-csoport *lásd* csoport  
 lineáris függetlenség 18, 43  
 lineáris kombináció  
   függvényeké 43  
   helyes *lásd* perturbációelmélet  
   vektoroké 18  
 lineáris transzformációk  
   koordinátáké 10  
   szorzata 12  
 longitudinális effektus 213

## M

mágneses kvantumszám 193, 212, 255  
 mágneses momentum 231  
 mágneses tér *lásd* Zeeman-effektus, sajátérték stb.  
 magspin 250  
 mátrix(ok)  
   adjungált 31, 33

- antihermitikus 32
  - antiszimmetrikus 32
  - derékszögű 22
  - diagonális (átlós) 16
  - diagonalizáció 29, 36
  - dimenziója 11
  - direktszorzata 25
  - egyenlősége 10
  - egység 14, 24
  - elemek 10, 60, 207
    - spinmentes tenzoroperátorké 318
    - vektoroperátoroké 258
  - függvényei 16, 30
  - hatványai 16
  - hermitikus 32
  - inverz 14, 24
  - kétdimenziós unitér 171
  - komplex konjugált 31
  - komplex ortogonális 32, 34
  - négyzetes 22, 23
  - összeadása 15, 23
  - Pauli- 171
  - reciprok *lásd* inverz
  - sajátértékei és sajátvektorai 28, 29
  - speciális típusai 31
  - spurja 17
  - szimmetrikus 32, 38
  - szorzása 12, 22
  - tételek 12, 23, 170
  - transzponált 31
  - tulajdonságai hasonlósági transzformációkor 17, 28
  - unitér 32
  - valós ortogonális 32, 38, 154
  - zérus 15, 24
  - mellékosztály 69
    - invariáns alcsoporté 76
  - mennyiség, fizikai 56
  - merev rotátor 224
  - mérés, fizikai mennyisége 56, 58
  - metrikus tenzor három-*j*-szimbólumokra 308, 309
  - multiplatt felhasadás 276
  - multiplatt rendszer 193
    - és antiszimmetrikus sajátfüggvények száma 330
    - és elektronok permutációja 274
  - kiválasztási szabály 208
  - és spinforgatás 274
  - multiplicitás 194
- N**
- négyes csoport *lásd* csoport
  - négyzetesen integrálható 41
  - n-láb 222
  - normál alak, antiunitér operátorké 343
  - normálás 32, 42
  - normális csatolás 277, 286
- O**
- operátorok
    - antilineáris 342
    - antiunitér 340
    - hermitikus 44, 56
    - idempotens 130
    - invariáns *lásd* szimmetrikus operátorok
    - lineáris 11, 43, 236, 246
    - projekció 130
    - szimmetrikus *lásd* szimmetrikus operátorok
    - unitér 32, 59, 236, 246
    - végtelesen elfajult 130
  - optikai izomerek 229
  - ortogonális mátrix *lásd* mátrix
  - ortogonalizálás a Gram—Schmidt eljárással 37, 38
  - ortogonalitási összefüggések
    - folytonos csoportoknál 111
    - irreducibilis ábrázolásokra 91
    - karakterekre 92, 111, 169
    - sajátfüggvényekre 46, 130
    - spinfüggvényekre 268
  - ortogonalitás
    - függvényeké 42, 127
    - sajátfüggvényeké 46, 130
    - és az ábrázolások unitaritása 122
    - vektoroké 32
  - osztályok, csoporté
    - a háromdimenziós forgáscsoportra 162
    - és a karakterek 92, 179
    - a kétdimenziós forgáscsoportra 156, 157
    - permutációké 136

## Ö

összeadás, vektoroké és mátrixoké 9, 16, 23  
összegszabály, átmeneti valószínűségeké 281

## P

pálya 326, 330  
Bohr- 191  
pályaimpulzus-momentum  
kiválasztási szabályok 195  
kvantumszám 193  
paraméterek  
Cayley—Klein-féle 172  
csoporté 97  
forgatásoké 154, 164  
paramétertér  
egyszeresen és többszörösen összefüggő  
98, 261  
út 99, 101, 260  
páratlan  
ábrázolások *lásd* ábrázolások, páros és páratlan  
permutáció *lásd* permutációk, páros és páratlan  
számú elektron 252  
szintek *lásd még* sajátértékek, páros és páratlan  
paritás 193, 276, 337  
és a tükrözési csoport ábrázolásai 194  
és a pályaimpulzus-momentum 228  
kiválasztási szabály 195, 209  
páros szintek *lásd* sajátértékek, páros  
particiós szám 136  
partner függvények 123  
Pauli-elv 139, 194, 266, 328, 329  
és elektronpályák betöltése 329  
Pauli-féle spinelmélet 231  
Pauli-mátrixok 171, 243, 244  
periódus, csoportelemé 68, 100  
permutációk 135  
ciklusai 135  
és a Pauli-elv 266  
osztályai 136  
páros és páratlan 137  
permutációs csoport *lásd még* szimmetrikus csoport

elektronoké 118, 193, 264, 274, 326, 332  
perturbációelmélet  
elfajult esetben 51  
helyes lineáris kombinációk 54, 133, 187, 200, 214, 275, 332  
Rayleigh—Schrödinger 48  
poláris vektor *lásd* vektorok  
pörgettyű, kvantummechanikai 225  
projekcióoperátor 130  
protonspin *lásd* magspin

## R

Racah-együtthatók 298, 311  
Rayleigh—Schrödinger perturbációelmélet 48  
reciprok  
csoportelemek szorzatáé 67  
mátrix *lásd* mátrix  
reducibilis ábrázolások *lásd* ábrázolások  
relativisztikus elektronelmélet 250  
rend  
csoporté *lásd* csoport(ok)  
csoportelemé *lásd* csoportelem(ek)  
rombos szimmetria 219  
rotátor 224  
Russel—Saunders csatolás 286, 319  
Rydberg-állandó 190

## S

sajátdifferenciál 45  
sajátértékek *lásd* sajátfüggvények  
elfajulása 46, 131  
és a mérések eredménye 56  
felhasadása  
elektromos térben 218, 284  
kristályban 219  
mágneses térben 214, 280  
perturbációban 131  
mátrixé 28  
operátoré 45  
osztályozása a csoportok ábrázolása szerint 130, 187  
páros és páratlan 194, 337  
Schrödinger-egyenleté 41

sajátfüggvények 41, 45, 57  
és ábrázolások szerinti osztályozás 114, 187  
egyszerű rendszereké *lásd* hidrogén, hélium  
impulzusmomentumé *lásd* impulzusmomentum  
ortogonalitása 46, 130  
szimmetrikus, antiszimmetrikus 114  
teljessége 130  
transzformációs tulajdonságok 221, 348  
sajátvektorok 29  
valós, ortogonális mátrixé 38, 154  
Schmidt-féle ortogonalizálás *lásd* ortogonalizálás  
Schrödinger-hullámegyenlet 41, 42  
Schur-lemma 83, 84  
Schwarz-féle egyenlőtlenség 51  
skalároperátorok 255  
skalárszorzat *lásd* szorzat  
Slater-determináns 329  
Sommerfeld-féle finomszerkezeti állandó 276, 325  
Spin 195, 231  
erők 271  
és a forgáscsoport ábrázolása 238  
és a szimmetrikus csoport ábrázolása 140, 151  
irányának valószínűsége 241  
mátrixok 243, 244  
-mentes mennyiségek 232, 264  
operátorok 243  
és paritás 276  
Pauli-féle elmélete 231  
—pálya kölcsönhatás *lásd* kölcsönhatás  
—spin kölcsönhatás *lásd* kölcsönhatás  
és teljes impulzusmomentum 249  
változók 139, 232, 267, 274  
spektrum *lásd még* sajátértékek, energiaszintek  
diszkrét és folytonos 45, 190  
egyelektronos atomokra 190  
operátoré 45  
spur (átlósösszeg, átló) 17  
Stark-jelenség 210, 218, 282  
statisztikus interpretáció, kvantummechanikáé 55  
sugárzás  
atomra beeső 61  
dipólus 209, 277

kvadrupólus 208, 277  
polarizált 207, 212  
sűrűség, invariáns 104

## Sz

q-számok 39  
szeparációs elmélet 39  
szekuláris egyenlet 28, 132  
szimmetriacsoportok 71  
fizikai mennyiségeké 119  
konfigurációs téré 116  
szimmetrikus csoport 73, 135  
ábrázolásának karakterei 150  
szimmetrikus  
mátrix *lásd* mátrix  
sajátfüggvények, sajátértékek 114  
szimmetrikus operátorok 119, 127, 255  
és felcserélhetőség 128  
szintek *lásd* sajátértékek, energiaszintek  
szintek szimmetriatulajdonságai 192  
szög, forgatásoké 161  
szorzat  
direkt  
csoporté 185  
mátrixoké 25  
komplexusoké 77  
mátrixoké 12  
mellékosztályoké 78  
permutációké 72, 135  
skaláris  
függvényeké 42, 139, 232, 250  
vektoroké 32  
szám és mátrix 16  
és vektorok 9  
szupermátrixoké 26

## T

teljes kvantumszám *lásd* impulzusmomentum  
teljesség  
sajátfüggvényeké 46, 130  
vektorrendszeré 20  
tengely, forgatásé 161  
tenzorok  
irreducibilis 256, 285, 298, 321



fizikai 182  
forgatások 182  
tenzoroperátorok 255  
  irreducibilis 256, 285, 293  
  kétoldalú 320  
  mátrixelemei 257, 286  
tömegközéppont mozgása 189, 222  
tömör jelölés, három-*j*-szimbólumoké 315  
transzformáció  
  antilineáris 33  
  antiunitér 349  
  hasonlósági 17, 28, 121  
  kanonikus 60, 236  
  lineáris 10, 11  
  új koordinátarendszerre 58  
  unitér 59  
  valódi (nem elfajult) 10, 18  
transzformációelmélet 55, 58  
transzponált mátrix 31  
transzpozíció 137  
transzverzális hatás 213  
tükrözés  
  időé *lásd* időtükrözés  
  téré 157, 211, 217  
tükrözési csoport 70, 156, 188, 216

## U

unitér ábrázolás 82  
  bármely ábrázolásból 82  
unitér mátrix 32  
unitér unimoduláris csoport 172, 253  
  ábrázolásai 174  
  homomorfizmusa a forgáscsoporttal 172

## V

valószínűség(ek)  
  különböző spinirányokra és összefüggések  
  241  
kvantummechanikában 56

végtelen csoport *lásd* csoport  
vektor(ok) 9  
  axiális 211  
  csoporttérben 90  
  egyenlősége 9  
  egység 32  
  fizikai 182  
  komponensek 9  
  lineáris függetlensége 18  
  normál 32  
  null 9  
  ortogonális 32  
  összeadása 9  
  poláris 216, 279, 285  
  teljes rendszere 20  
vektorcsatlósi együtthatók 201  
  fizikai interpretációjuk 367  
  klasszikus határesetre 369  
  kvariáns, kontravariáns 307  
  szimmetrikus alakja 303  
  táblázatok 205  
vektoroperátor 244, 255, 256, 294  
  mátrixelemei 258  
vektorösszeadási modell 196, 276, 324  
vonalszélesség, természetes 64, 277

## W

Weyl-módszer a forgáscsoport ábrázolásainak  
  levezetésére 170

## Z

Zeeman-effektus 210, 280  
  anomális 216, 293  
  normális 216  
zérusmátrix *lásd* mátrix

A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó igazgatója  
Felelős szerkesztő: Dr. Horváth Ferenc — Műszaki szerkesztő: D. Szabó László  
A borító- és kötéstervezés: Kovács Tibor munkája  
Terjedelem: 34,3 (A/5) ív — AK 750 k 7982  
79.5808.66-11-3 Alföldi Nyomda, Debrecen — Felelős vezető: Benkő István igazgató

anyagkutatás minden olyan területén, ahol a részleteket még homály fedi. *Wigner Jenő* ily módon volt képes bizonyítani, hogy a kvantummechanika az atommagban is érvényes (ennek elismerése volt a fizikai *Nobel-díj*). A kvantumkémia és részecskefizika ismeretlenel érintkező területein napjainkban elsődleges útbaigazítónk a szimmetriatulajdonságokon alapuló kvantummechanikai tárgyalás.

Az elmúlt ötven esztendő alapvetően átalakította az anyag szerkezetére vonatkozó elképzeléseinket. Kivételes jelenség, hogy egy olyan kvantummechanika-könyv, amelynek gyökereit a *Zeitschrift für Physik*-ben 1926-ban és 1927-ben megjelent tanulmányok képezik, és amelynek első kiadása 1931-ben jelent meg német nyelven, ma is változtatás nélkül érvényes és hasznos. *Wigner Jenő* könyve a modern fizika klasszikus, tiszta alkotása. Tanulmányozását mindazoknak ajánlom, akik letisztultan akarják látni a kvantummechanikát, századunknak talán legmélyebb intellektuális teljesítményét.

*Marx György*



AKADÉMIAI KIADÓ, BUDAPEST

Ára: 102,- Ft

ISBN 963 05 1599 7