Csoportok a fizikában

Diplomamunka

Kornyik Miklós

Alkalmazott matematikus szak

Témavezető:

Dr. Hermann Péter

egyetemi docens

Algebra és Számelmélet Tanszék

Eötvös Loránd Tudományegyetem, Természettudományi Kar

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

2011

Tartalomjegyzék

1. A kvantummechanika alapjai **4**

1.1. A kvantummechanika és a klasszikus mechanika kapcsolata . . . 4

1.1.1. A kvantummechanika posztulátumai . . . 5

1.2. A kvantummechanika matematikája . . . 9

1.2.1. A Hamilton-operátor értelmezési tartománya . . . 9

1.2.2. A Schrödinger-egyenlet időfejlődése . . . 10

1.2.3. A Heisenberg-féle határozatlansági reláció . . . 11

1.3. A hidrogén atom Schrödinger egyenletének megoldása . . . 13

2. Reprezentáció-elmélet **17**

2.1. Mi az a reprezentáció? . . . 17

2.2. Irreducibilitás . . . 18

2.3. Unitaritás . . . 18

2.4. Karakter . . . 20

2.5. Ortogonalitás . . . 20

2.6. Reprezentációk direktszorzata és direktszorzatok reprezentációja . . . 21

2.7. Folytonos csoportok . . . 25

2.8. Néhány fontosabb csoport irreducibilis reprezentációja . . . 26

2.8.1. $\mathbf{SO(2)}$ . . . 26

2.8.2. $\mathbf{O(2)}$ . . . 26

2.8.3. $\mathbf{O(3)}$ . . . 26

2.8.4. $\mathbf{S_n}$ . . . 27

3. A Hamilton-operátor szimmetriái **29**

3.1. $\mathbf{O(n)}$, $\mathbf{S_n}$ hatása . . . 31

3.2. A szimmetriacsoport reprezentációja . . . 34

3.3. Egy elektron, egy paraméter (n=1) . . . 36

3.4. Egy elektron, két paraméter (n=2) . . . 37

3.4.1. $\mathbf{S_2}$ hatása . . . 37

3.4.2. $\mathbf{SO(2)}$ hatása . . . 38

3.4.3. $\mathbf{O(2)}$ hatása . . . 39

3.5. Több elektron, több paraméter ($n = 3N$) . . . 39

4. Alkalmazások **41**
4.1. Impulzusmomentum / perdület 41
4.2. Atomszínképek 42
4.2.1. Építkezési elv 44
4.3. A sajátfüggvények részleges meghatározása 46

Előszó

Dolgozatom céljául a két legszebb tudományág, nevezetesen a matematika és a fizika együttes tárgyalását és a fizika problémák matematikailag korrekt kezelését tűztem ki.
A címhez hűen be fogom mutatni a matematika egy rendkívül elegáns ágának, a csoportelméletnek konkrét fizikai alkalmazásait, mely a kvantummechanika nyelvén fog történni. Az eszköztár és a matematikai, fizikai környezet jobb megértése végett az első néhány fejezetet a kvantummechanika, a csoportok reprezentáció-elméletének és a Lie-csoportok, Lie-algebrák elméletéből szükséges eredmények bemutatásáról fog szólni.
A dolgozat második felében pedig alkalmazásokat fogok bemutatni, melyek atomszínképekről és a Hamilton-operátor sajátfüggvényeinek transzformációs tulajdonságaik alapján való részleges meghatározásáról fognak szólni.

1. fejezet

A kvantummechanika alapjai

A kvantummechanika a modern tudomány vívmánya, mely teljesen új szemszögből írja le az atomi szintű fizikai folyamatokat. A klasszikus fizikával ellentétben az itt szereplő részecskéket nem különálló pontoknak tekintjük, hanem a rendszert egy Ψ, ún. hullámfüggvénnyel írjük le, melynek valószínűségelméleti jelentése van. A $|\Psi|^2$ fogja azt valószínűséget jelenteni, hogy pl. a Hidrogén atom 1 protonos és 1 elektronos rendszerében az elektron az adott kicsi térrészben milyen valószínűséggel található meg, vagyis $|\Psi|^2$ nem más, mint sűrűségfüggvény egy megadott fázistéren (A Hidrogén atom esetében ez $\mathbb{R}^3$). A kvantummechanika alapvető egyenlete, a Schrödinger-egyenlet az, amely leírja egy részecskékből álló rendszer állapotának időfejlődését, a rendszerhez tartozó, ún. Hamilton-operátor segítségével. A tudományág fontos, egyik legalapvetőbb feladata a Hamilton-operátor vizsgálata, melynek segítségével a megoldások bizonyos tulajdonságaira tudunk következtetni anélkül, hogy ismernénk a Schrödinger-egyenlet megoldásának explicit alakját. Bár a klasszikus mechanika és kvantummechanika máshogy közelítenek meg egy adott problémát, nem teljesen idegen egymástól ez a két szemszög, van kapcsolat a kettő között. Most pedig essék néhány szó erről a kapcsolatról.

1.1. A kvantummechanika és a klasszikus mechanika kapcsolata

Az energia-megmaradás törvénye: *Egy zárt, külső hatásoktól mentes rendszer teljes energiája időben állandó. Energia nem vész el, legfeljebb átalakul.*

A klasszikus mechanikában egy f szabadsági fokkal rendelkező rendszer pillanatnyi helyzete és mozgásállapota a $q_1, \ldots, q_f$ *általános koordinátákkal* és az ezekhez "kanonikusan konjugált" $p_1, \ldots, p_f$ *általános impulzusokkal* jellemezhető. Ha a rendszer konzervatív és szkleronom, akkor potenciális és kinetikus energiájának összegét, mint az általánosított koordináták és impulzusok függvényét meadó $\mathcal{H}$ *Hamilton függvény* egyenlő az állandó E teljes energiával:

$$\mathcal{H}(q_1, \ldots, q_f, p_1, \ldots, p_f) = E. \tag{1.1}$$

Pl. *egy tömegpont esetében* ($f = 3$) a $q_1 = x, q_2 = y, q_3 = z$ Descartes-koordinátákhoz tartozó

$p_i = m_0 v_i,\ i = x, y, z$ (m_1 a részecske tömege, v_i a sebessége) impulzusokkal kifejezett kinetikus energia $(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)/2m_0$.A potenciális energiát $U(x, y, z)$-vel jelölve

$$\mathcal{H}(x, y, z, p_x, p_y, p_z) = \frac{1}{2m_0}\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right) + U(x, y, z) = E. \tag{1.2}$$

1.1.1. A kvantummechanika posztulátumai

Első posztulátum: A rendszer állapotait egy $\mathscr{H}$ Hilbert-tér irányai képviselik (az 1 normájú vektorok). A gyakorlatban $\mathscr{H} = L^2_\lambda(\mathbb{R}^n)$ és $\mathbf{L} \in \mathcal{L}(\mathscr{H})$. A rendszer állapotát egy egy normájú, azaz egy olyan $\Psi(q_1, \ldots, q_n, t) : \mathbb{R}^n \times (-\infty, \infty) \to \mathbb{C}$ függvény írja le, melyre

$$\forall t \in (-\infty, \infty) \int_{\mathbb{R}^n} \Psi(x, t)^* \Psi(x, t)\ d\lambda_{\mathbb{R}^n}(x) = 1. \tag{1.3}$$

Második posztulátum: Minden megfigyelhető fizikai mennyiséget egy $\mathscr{H}$ Hilbert-téren ható $\mathbf{L}$ lineáris szimmetrikus (hermetikus) operátor reprezentál, melynek valós sajátértékei felelnek meg a kérdéses mérések lehetséges eredményeivel. A rendszert az operátor*-algebrája reprezentálja. Egy többrészecskés rendszert az egyes részecskékhez tartozó Hilbert-terek direkt szorzata, a rendszer megfigyelhető fizikai mennyiségeit pedig az egyes rendszerek megfigyelhető mennyiségeihez tartozó lineáris operátorok direkt szorzata reprezentál.
Pl. egy kétrészecskés rendszerhez tartozó fizikai mennyiség mindig felírható a következő alakban: $\mathscr{H} = \times_j \mathscr{H}_j \quad \mathbf{A} = \sum_j \mathbf{A}_j^1 \times \mathbf{A}_j^2$
Speciálisan a q_k koordinátának a $\mathbf{q}_k$, a t idő a $\mathbf{t}$, a p_k impulzusnak a $\mathbf{p}_k$ és az E energiának a $\mathbf{E}$ operátort feleltetjük meg a következő módon: Legyen $\mathbf{M}_f$ az f függvénnyel való szorzás operátora. Az alábbi táblázatban összefoglaljuk a fontosabb mennyiségeket és nekik megfeleltetett operátorokat:

-	klasszikus fiz. menny.	megfel. operátor
koordináta	q_k	$\mathbf{q}_k = \mathbf{M}_{q_k}$
impulzus	p_k	$\mathbf{p}_k = -i\hbar\frac{\partial}{\partial q_k}$
idő	t	$\mathbf{t} = \mathbf{M}_t$
teljes eneriga	E	$\mathbf{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$
kinetikus energia	T	$\mathbf{T} = \sum_k -\frac{\hbar^2}{2m_k}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_k} + \frac{\partial^2}{\partial y_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_k^2}\right)$
potenciális energia	V	$\mathbf{V} = \mathbf{M}_V$

A posztulátumok alapján egy részecske esetén a rendszer $\mathbf{H}$ Hamilton-operátor a következő alakot ölti:

$$\mathbf{H} = -\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \mathbf{V} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \mathbf{V}. \tag{1.4}$$

Harmadik posztulátum: Ha a $\mathbf{H}$ a fent ismertetett $\mathcal{H}$ Hamilton-függvénynek megfelelő $\mathbf{H} = \mathbf{H}(\mathbf{q}_1, \ldots, \mathbf{q}_n, \mathbf{p}_1, \ldots, \mathbf{q}_n, \mathbf{t})$ *Hamilton-operátort* jelenti, akkor a Ψ állapotfüggvény eleget tesz a

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \mathbf{H}\Psi \tag{1.5}$$

ún. *időtől függő Schrödinger-egyenletnek.*

Negyedik posztulátum: A mérési eredmények a méréshez tartozó $\mathbf{A}$ operátor λ_j sajátértékei közül kerülnek ki. Ez nem határozható meg pontosan, csak valószínűségi eloszlás erejéig. Ha a rendszer állapotfüggvénye Ψ, akkor egy mérés átlagos eredménye, azaz az $\mathbf{A}$ "várható értéke":

$$\langle \mathbf{A} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \mathbf{A} \Psi dt. \tag{1.6}$$

Annak a valószínűsége, hogy a Ψ állapotban a mérés eredménye λ_j:

$$P(\lambda_j | \Psi) = | < e_j, \Psi > |^2, \tag{1.7}$$

ahol az e_j a λ_j-hez tartozó egységhosszú sajátvektor.

1.1.1. Megjegyzés. *1. A mérhető mennyiségeket a klasszikus fizikában egy függvény reprezentál, mely egy adott objektumhoz rendel egy számot (pl. sebesség, impulzus). Ezek a mérések a makroszkópikus világban nem változtatnak az objektum állapotán, vagyis ha megmérem a helyzetét és mondjuk a sebességét (tetszőleges pontossággal egyidejűleg), attól ő még ugyanott lesz, és ugyanolyan sebességgel fog haladni. A kvantummechanika azért dolgozik operátorokkal, mert egyrészt a részecskék világában ezek az alapmennyiségek (impulzus, helyzet,...) nem mérhetőek (egyszerre, tetszőlegesen) pontosan, másrészt a méréssel megváltozik a rendszer állapota. Például, ha kíváncsi vagyok egy elektron helyzetére, legalább egy foton szükséges a mérés végzéséhez, mely az elektronnal kapcsolatba lép. Ezzel viszont megváltozik az elektron impulzusa, ugyanis az elektron és a foton találkozásakor impulzuscsere is történik.*

2. *Rögzített t-re $\Psi(\cdot, t)^* \Psi(\cdot, t) = |\Psi(\cdot, t)|^2$ tulajdonképpen egy sűrűségfüggvényként is felfogható.*
   Jelölés: $\Psi_t := \Psi(\cdot, t)$, $d\lambda_{\mathbb{R}^n} = d^n x$, $\mathscr{H} := \mathbf{L}^2_\lambda(\mathbb{R}^b)$

3. *Az előző megjegyzés alapján mondhatjuk, hogy gyakorlatilag minden $t \in (-\infty, \infty)$ esetén $\Psi(\cdot, t) \in \mathbf{L}^2_\lambda(\mathbb{R}^n)$, $||\Psi(\cdot, t)||_{\boldsymbol{L}^2} = 1$ meghatároz egy valószínűségi mezőt, ahol $B \in \mathcal{B}$ Borelhalmaz esetén*

$$P_{\Psi_t}(B) = \int_B |\Psi_t|^2 d^n x. \tag{1.8}$$

Ennek fizikai magyarázata egy egyrészecskés rendszerben az, hogy a részecske ilyen valószínűséggel tartózkodik a B halmazban.
Egy mérhető $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ függvény esetén pedig

$$\mathbb{E}_{\Psi_t}(f) = \int_{\mathbb{R}^n} f|\Psi_t|^2 d^n x, \tag{1.9}$$

és

$$\mathbb{D}^2_{\Psi_t}(f) = \mathbb{E}_{\Psi_t}(f - \mathbb{E}_{\Psi_t} f)^2. \tag{1.10}$$

Ismét visszatérve az egyrészecskés rendszerre, az $f = id$ függvény a részecske várható helyét adja meg. Látható, hogy $\mathbb{D}_{\Psi_t}(id)$ sosem lesz nulla. Ez egy fontos eredmény a kvantummechanikában, ami lényegében azt mondja ki, hogy a bizonytalanság bele van építve a rendszerbe és nem azért nem ismerjük a részecske pontos helyét, mert nem tudunk elég pontosan mérni.

4. *Az előző pontbeli definíciók kiterjeszthetők operátorokra is. Legyen ugyanis $\boldsymbol{A}$ a $\mathscr{H}$ lineáris operátora. Ekkor*

$$\mathbb{E}_{\Psi_t}(\boldsymbol{A}) = \langle \Psi_t, \boldsymbol{A}\Psi_t \rangle_{\mathscr{H}} = \int_{\mathbb{R}^n} \Psi_t^* \boldsymbol{A} \Psi_t d^n x \tag{1.11}$$

és

$$\mathbb{D}^2_{\Psi_t}(\boldsymbol{A}) = \mathbb{E}_{\Psi_t}(\boldsymbol{A}^2) - \mathbb{E}^2_{\Psi_t}(\boldsymbol{A}) = \left\langle \Psi_t, \boldsymbol{A}^2 \Psi_t \right\rangle_{\mathscr{H}} - \langle \Psi_t, \boldsymbol{A}\Psi_t \rangle^2_{\mathscr{H}} = ||(\boldsymbol{A} - \mathbb{E}_{\Psi_t}\boldsymbol{A})\Psi_t||. \tag{1.12}$$

Korlátos lineáris operátorok esetén ezek a mennyiségek mindig léteznek és végesek. A 4. posztulátum alapján az $\mathbb{E}_{\Psi_t}(\boldsymbol{A})$ várható érték egy mérésnek a várható eredményét jelképezi, a szórása pedig annak bizonytalanságát. Érdemes meggondolni, hogy $\mathbb{D}^2_{\Psi_t}(\boldsymbol{A}) = 0$ pontosan akkor teljesül,
ha $\boldsymbol{A}\Psi_t = \mathbb{E}_{\Psi_t}(\boldsymbol{A})\Psi_T$, azaz ha $\mathbb{E}_{\Psi_t}(\boldsymbol{A}) \in \mathsf{Eig}(\boldsymbol{A})$, vagyis az $\boldsymbol{A}$ operátor várható értéke egyben az operátor sajátértéke is.

5. *Az operátorokra vonatkozó definíció kiterjesztése tulajdonképpen magába foglalja a függvények esetét is, ugyanis:*
legyen $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ mérhető függvény és jelölje $\boldsymbol{M}_f$ az f-fel való szorzás operátorát!
Ekkor

$$\mathbb{E}_{\Psi_t}(\boldsymbol{M}_f) = \langle \Psi_t, \boldsymbol{M}_f \Psi_t \rangle = \int_{\mathbb{R}^n} \Psi_t^* f \Psi_t d^n x = \int_{\mathbb{R}^n} f|\Psi_t|^2 d^n x = \mathbb{E}_{\Psi_t}(f). \tag{1.13}$$

Sajnos általánosabb esetben előfordulhat, hogy $\mathbb{E}_{\Psi_t}(\mathbf{A})$ nem véges. Ez annak is betudható, hogy az $\mathbf{A}$ operátor nem korlátos. Viszont a zárt gráf tétel miatt az ilyen operátorok nem definiálhatók az egész $\mathscr{H}$ Hilbert-téren, csak annak egy sűrű alterén. A sűrűség ahhoz kell, hogy

a legtöbb állapot esetén az $\mathbf{A}$ mérést definiálni tudjuk. A Ψ állapotfüggvény időbeli fejlődése tulajdonképpen egy (végtelen dimenziós) dinamikai rendszernek tekinthető.

$$\Psi_t = U(t)\Psi_0 \tag{1.14}$$

Fizikai kísérletek alapján feltehető, hogy az $U(t)$ lineáris operátor. Mivel Ψ_t és Ψ_0 egyaránt a rendszer állapotfüggvényei, így az 1. posztulátum miatt

$$1 = ||\Psi_t|| = ||U(t)\Psi_0|| = ||\Psi_0||, \tag{1.15}$$

azaz

$$U(t) : S(0,1) \to S(0,1), \qquad S(0,1) = \{\psi \in \mathscr{H} |\ ||h|| = 1\}. \tag{1.16}$$

Tudjuk, hogy minden $\mathscr{H}$-beli vektor felírható $\alpha\psi$ alakban, ahol $\psi \in S(0,1)$, így $U(t)$ egyben unitér operátor is.
A megoldás egyértelműségét feltéve kapjuk, hogy

$$U(0) = \mathbb{I} \qquad U(t)U(s) = U(t+s). \tag{1.17}$$

1.1.1. Definíció. *Az $U(t)$ operátorcsalád neve: egyparaméteres unitér operátorcsoport.*

1.1.2. Definíció. *Egy operátorcsoport erősen folytonos, ha*

$$\forall\psi \in \mathscr{H} \qquad \lim_{t\downarrow t_0}(U(t))\psi = U(t_0)\psi. \tag{1.18}$$

1.1.3. Definíció. *Minden ilyen csoporthoz tartozik egy úgynevezett infinitezimális generátor:*

$$\boldsymbol{H} := i\lim_{t\downarrow 0}\frac{1}{t}(U(t)\psi - \psi) \qquad \mathsf{Dom}(\boldsymbol{H}) := \{\ \psi \in \mathscr{H}\ |\ \ \exists \lim_{t\downarrow 0}\frac{1}{t}(U(t)\psi - \psi)\ \} \tag{1.19}$$

A fenti $\mathbf{H}$ operátor nem más, mint a rendszer Hamilton operátora. Ha $\Psi_0 \in \mathsf{Dom}(\mathbf{H})$, akkor Ψ_t a

$$i\hbar\frac{d}{dt}\Psi_t = \mathbf{H}\Psi_t \tag{1.20}$$

Schrödinger-egyenlet megoldása.
Ha $H \in GL(n,\mathbb{C})$ és $H^* = H$, akkor a Schrödinger egyenlet megoldása

$$\Psi_t = \exp(i\hbar t H)\Psi_0. \tag{1.21}$$

Ez alapján jogosnak érezzük feltenni azt a kérdést, hogy vajon ha $\mathbf{H}$ egy Hilbert-tér lineáris operátora, érvényes lehet-e ugyanez a formula. Abban az esetben, hogy ha $\mathbf{H}$ korlátos, akkor a

$$\exp(\mathbf{H}) = \sum_{j=0}^{\infty}\frac{\mathbf{H}^j}{j!} \tag{1.22}$$

formulával definiált operátor értelmes. Viszont ha $\mathbf{H}$ nem korlátos, akkor a fenti definíció nem értelmes.

1.2. A kvantummechanika matematikája

1.2.1. A Hamilton-operátor értelmezési tartománya

A következőkben egy adott $p = x_1^{k_1} x_2^{k_2} \dots x_n^{k_n}$ monom esetén, $p(\partial)$ jelentse a következőt

$$p(\partial) := \frac{\partial^{k_1}}{\partial x_1^{k_1}} \cdots \frac{\partial^{k_n}}{\partial x_n^{k_n}}. \tag{1.23}$$

1.2.1. Definíció. *Az*

$$\mathcal{S}(\mathbb{R}^n) := \{ \ \psi \in C^\infty(\mathbb{R}^n) \mid \forall p, q \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^n) \ \exists K_{p,q} > 0 \ \ ||qp(\partial)\psi||_{sup} \leq K_{p,q}\} \tag{1.24}$$

függvényosztályt Schwartz-függvényeknek nevezzük.

A továbbiakban kényelmi szempontokból az operátorokra vonatkozó állításaink egy részét a Schwartz-féle függvényekre bizonyítjuk. Habár kvantummechanika alapjainak lefektetésekor a Ψ állapotfüggvényre csak annyit követeltünk meg, hogy $L^2(\mathbb{R}^n)$-beli legyen, a Hamilton-operátor alakja miatt kétszerszeres differenciálhatóságot is meg kell követelnünk (ha nem is hagyományos, de legalább disztribúciós értelemben). Viszont $C^2(\mathbb{R}^n)$ nem invariáns a Δ Laplace-operátorra nézve és ennek következtében az egymás után alkalmazás nem lehetséges, így kényelmesebb feltenni, hogy $\Psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. Mellesleg, ha ellátjuk a $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ függvényteret a következő topológiával

$$\psi_n \xrightarrow{\mathcal{S}} \psi \Longleftrightarrow \forall q \in \mathcal{P} \ \ ||q(\partial)\psi_n - q(\partial)\psi||_\infty \xrightarrow{n\to\infty} 0, \tag{1.25}$$

akkor a Hamilton-operátor folytonos is lesz!

1.2.1. Állítás. *A Schwartz függvényekre igazak:*

i. $\lim_{|x|\to\infty} \psi(x) = 0$

ii. $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \subset \boldsymbol{L}^2_\lambda(\mathbb{R}^n)$ *sűrű*

A fenti állítás második pontja azért lényeges, mert hogy ha $\mathrm{Dom}(\mathbf{H}) := \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, akkor könnyen ellenőrizhető, hogy $\mathbf{H}\mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \subseteq \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ (hallgatólagosan feltéve, hogy V potenciálfüggvény is végtelenszer diffható), azaz a Schwartz-függvények tere invariáns a Hamilton-operátor hatása alatt és ráadásul sűrű $L^2(\mathbb{R}^n)$-ben, ami elegendhetetlen a Hamilton-operátor mélyebb vizsgálatához.

1.2.2. A Schrödinger-egyenlet időfejlődése

1.2.2. Definíció. *Legyen $\boldsymbol{L}$ egy $\mathscr{H}$ Hilbert-tér lineáris operátora. Ekkor azt mondjuk, hogy $\boldsymbol{L}$ szimmetrikus, ha*

$$\langle \psi, \boldsymbol{L}\varphi \rangle = \langle \boldsymbol{L}\psi, \varphi \rangle \qquad \forall \psi, \varphi \in \mathfrak{D}(\boldsymbol{L}). \tag{1.26}$$

1.2.3. Definíció. *Legyen $\boldsymbol{L}$ a $\mathscr{H}$ egy sűrűn értelmezett lineáris operátora. Az operátor adjungáltján a következő operátort értjük:*

$$\mathfrak{D}(\boldsymbol{L}^*) := \{\psi \in \mathscr{H} \mid \exists \widetilde{\psi}\ \langle \widetilde{\psi}, \varphi \rangle = \langle \psi, \boldsymbol{L}\varphi \rangle\ \forall \varphi \in \mathscr{H}\}. \tag{1.27}$$

Ekkor $\boldsymbol{L}$ sűrűn definiáltsága miatt ez a ψ egyértelmű, így értelmes a következő definíció

$$\boldsymbol{L}^*\psi := \widetilde{\psi} \tag{1.28}$$

Egy operátor adjungáltjának értelemezési tartománya lehet bővebb, mint az eredeti operátoré.

1.2.4. Definíció. *Egy $\boldsymbol{L}$ lineáris operátor önadjungált, ha $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{L}^*$, ami a következőt jelenti*

$$\mathfrak{D}(\boldsymbol{L}) = \mathfrak{D}(\boldsymbol{L}) := \mathfrak{D} \tag{1.29}$$

$$\boldsymbol{L}\varphi = \boldsymbol{L}^*\varphi \qquad \forall \varphi \in \mathfrak{D} \tag{1.30}$$

1.2.5. Definíció. *Egy $\boldsymbol{A}$ és $\boldsymbol{B}$ lineáris operátor felcserélhető, ha*

$$\boldsymbol{AB}\varphi = \boldsymbol{BA}\varphi \qquad \forall \varphi \in \mathfrak{D}(\boldsymbol{AB}) \cap \mathfrak{D}(\boldsymbol{BA}). \tag{1.31}$$

1.2.1. Tétel (Spektráltétel). *Minden A önadjungált operátorhoz létezik pontosan egy $P_A : \mathcal{B}(\mathbb{R}) \to \mathscr{H}$ operátor-mérték, hogy*

$$\boldsymbol{A} = \int_{\mathbb{R}} \lambda dP_{\boldsymbol{A}}(\lambda). \tag{1.32}$$

A tétel segítségével már bizonyos mérhető függvények esetére is definiálhatjuk az

$$f(\mathbf{A}) = \int_{\mathbb{R}} f(\lambda) dP_{\mathbf{A}}(\lambda) \tag{1.33}$$

operátort. Formálisan most már értelmes a $\mathbf{H}$ önadjungált Hamilton-operátor esetén az $\exp \mathbf{H}$ kifejezés, vagyis a Schrödinger-egyenlet időfejlődése :

$$\Psi_t = e^{i\hbar t H}\Psi_0, \tag{1.34}$$

ami az

1.2.2. Állítás.

$$\frac{\partial}{\partial t}\exp(t\boldsymbol{A}) = \boldsymbol{A}\exp(t\boldsymbol{A}) \tag{1.35}$$

alapján igazolható.

1.2.2. Tétel. *Legyen $\boldsymbol{A}$ önadjungált operátor és legyen $U(t) = \exp(i\hbar t\boldsymbol{A})$. Ekkor*

i. $U(t)$ *egy erősen folytonos egyparaméteres unitér csoport.*

ii. $\exists\ \lim_{t\downarrow 0}\frac{1}{t}(U(t)\psi - \psi) \Leftrightarrow \psi \in \mathsf{Dom}(\boldsymbol{A})$. *Ha* $\psi \in \mathsf{Dom}(\boldsymbol{A})$, *akkor* $\lim_{t\downarrow 0}\frac{1}{t}(U(t)\psi - \psi) = i\hbar\boldsymbol{A}\psi$

iii. $U(t)\mathsf{Dom}(\boldsymbol{A}) = \mathsf{Dom}(\boldsymbol{A})$ *és* $[U(t), \boldsymbol{A}] = 0$

A tételt **H**-ra alkalmazva kapunk némi információt a Schrödinger-egyenlet időfejlődésének operátoráról.

1.2.3. Tétel (Noether). *Tegyük fel, hogy $\boldsymbol{A}$ és $\boldsymbol{H}$ önadjungált operátorok kommutálnak ($[\boldsymbol{A}, \boldsymbol{H}] = 0$). Ekkor* $\exp(it\hbar\boldsymbol{H})\mathsf{Dom}(\boldsymbol{A}) = \mathsf{Dom}(\boldsymbol{A})$ *és $\boldsymbol{A}$ egy megmaradó mennyiség a következő értelemben:*

$$\mathbb{E}_{\Psi_t}(\boldsymbol{A}) = \langle\Psi_t, \boldsymbol{A}\Psi_t\rangle = \langle\Psi_0, \boldsymbol{A}\Psi_0\rangle = \mathbb{E}_{\Psi_0}(\boldsymbol{A}) \tag{1.36}$$

$$\Psi_t = \exp(it\hbar\boldsymbol{H})\Psi_0 \quad \in \mathsf{Dom}(\boldsymbol{A}). \tag{1.37}$$

Ez más szavakkal azt jelenti, hogy az **A** mennyiség várható értéke időben nem változik.

1.2.3. A Heisenberg-féle határozatlansági reláció

1.2.4. Tétel (Heisenberg-féle határozatlansági reláció). *Legyen $\boldsymbol{A}$ és $\boldsymbol{B}$ két szimmetrikus operátor. Ekkor $\psi \in \mathsf{Dom}(\boldsymbol{AB}) \cap \mathsf{Dom}(\boldsymbol{BA})$ esetén*

$$\mathbb{D}^2_\psi(\boldsymbol{A})\mathbb{D}^2_\psi(\boldsymbol{B}) \geq \mathbb{E}_\psi(\boldsymbol{AB}). \tag{1.38}$$

Egyenlőség csak abban az esetben áll fent, ha ψ valamelyik operátornak a sajátfüggvénye.

1.2.3. Állítás (Weyl-relációk:).

$$[\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{q}_l] = \boldsymbol{p}_k\boldsymbol{q}_l - \boldsymbol{q}_l\boldsymbol{p}_k = -i\hbar\delta_{kl} \tag{1.39}$$

Bizonyítás:

$$[\mathbf{p}_k, \mathbf{q}_l]\psi = \mathbf{p}_k\mathbf{q}_l\psi - \mathbf{q}_l\mathbf{p}_k\psi == -i\hbar\frac{\partial}{\partial q_k}(q_l\psi) + q_k i\hbar\frac{\partial}{\partial q_k}\psi = \tag{1.40}$$

$$= -i\hbar\delta_{kl}\psi - i\hbar q_l\frac{\partial\psi}{\partial q_k} + q_l i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial q_k} = -i\hbar\delta_{kl}\psi \qquad \psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \tag{1.41}$$

Tehát az impulzus és helyoperátorok nem cserélhetők fel, aminek tulajdonképpen az a fizikai jelentése, hogy nem mindegy, hogy először mérem meg az impulzust és aztán a helyzetet vagy fordítva, mert a sorrend végállapota más.

1.2.4. Állítás. *Ha $\boldsymbol{A}$ és $\boldsymbol{B}$ operátor kommutál az $[\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}]$ operátorral, akkor*

$$\exp(\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B}) = \exp(\boldsymbol{A}) \exp(\boldsymbol{B}) \exp(\frac{1}{2}[\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}]) \tag{1.42}$$

Heisenberg tétele alapján mondható, hogy

$$\mathbb{D}^2_\psi(\mathbf{p}_k)\mathbb{D}^2_\psi(\mathbf{q}_k) \geq \hbar\frac{\delta_{k,l}}{2}, \tag{1.43}$$

ami azt jelenti, hogy egy adott részecske helye és impulzusa egyszerre nem határozható meg tetszőleges pontossággal.

Megmutatható, hogy az $U_k(t)\Psi(p_1, \ldots, p_n) = \Psi(p_1, \ldots, p_k + t, \ldots, p_n)$ transzláció generátora éppen $\mathbf{q}_k = \frac{\partial}{\partial p_k}$. Vezessük be az $\mathbf{L} = \mathbf{q} \wedge \mathbf{p}$ impulzusmomentum mennyiséget. Könnyen bizonyítható, hogy az impulzusmomentum éppen a forgatásoknak (x, y és z tengely körül) az infinitezimális operátora. Noether tételének segítségével egy másik bizonyítást adhatunk arra, hogy abban az esetben, amikor a Hamilton-operátor transzlációval és a forgatással szemben invariáns, akkor ezek generátorával kommutál. Ekkor azt mondjuk, hogy az impulzus és az impulzusmomentum megmaradó mennyiségek.

Igazolható, hogy bármely rendszer kinetikus energiája bármely unitér operátorral, így a szimmetria csoportok operátoraival is felcserélhető. A *Hamilton*-operátorral felcserélhető operátorok természete a potenciális energiatagtól függ.
Szokás még feltenni, hogy a Hamilton operátor minden rendszer esetében lényegében önadjungált.

1.2.5. Állítás. *A Hamilton operátorral felcserélhető unitér operátorok csoportot alkotnak, melyet $G_{\boldsymbol{H}}$-val jelölünk.*

Biz.: Legyen $\mathbf{A}$,$\mathbf{B} \in G_{\mathbf{H}}$. Ekkor

$$(\mathbf{AB})\mathbf{H} = \mathbf{A}(\mathbf{BH}) = \mathbf{A}(\mathbf{HB}) = (\mathbf{AH})\mathbf{B} = \mathbf{H}(\mathbf{AB}), \tag{1.44}$$

azaz $\mathbf{AB} \in G_{\mathbf{H}}$, ahol az egyenlőséget $\mathfrak{D}(\mathbf{H})$-n kell érteni.
Másrészt $\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^*$ és a Hamilton operátor (lényegében) önadjungált, így

$$\mathbf{A}^*\mathbf{H} = \mathbf{A}^*\mathbf{H}^* = (\mathbf{HA})^* = (\mathbf{AH})^* = \mathbf{HA}^*, \tag{1.45}$$

vagyis $\mathbf{A}^{-1} \in G_{\mathbf{H}}$.

1.3. A hidrogén atom Schrödinger egyenletének megoldása

Most egy nagyon fontos rendszer, névszerint a Hidrogén atom Schrödinger-egyenletének a megoldását mutatjuk be. Ez a rendszer tulajdonképpen egy egyelektronos, egy proton rendszerként fogható fel, ahol az elektron helyzetét három helykoordináta segítésével írjuk le.

$$\mathbf{H} = \mathbf{T} + \mathbf{V} \tag{1.46}$$

Rögzítsük a $+e$ töltésű protont az origóban, és írjuk fel a centrális erőtérben mozgó elektron Hamilton operátorát.

$$\mathbf{T} = -\frac{\hbar}{2m_e}\Delta \quad , \tag{1.47}$$

ahol m_e az elektron tömege. A potenciális energia a $+e$ töltésű proton és a $-e$ töltésű elektron közt fellépő vonzási erőből vezethető le:

$$V(x, y, z) = \frac{-e^2}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}. \tag{1.48}$$

Ezek alapján a Schördinger-egyenlet a

$$-\frac{\hbar}{2m_e}\Delta\psi - \frac{e^2}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}\psi = E\psi \tag{1.49}$$

alakot ölti. Átrendezés után

$$\Delta\psi + \frac{2m_e}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}\right)\psi = 0. \tag{1.50}$$

Az erőtér gömbszimmetrikus, így gömbi koordinátákra áttérve :

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}) + \frac{1}{r^2\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}(\sin\vartheta\frac{\partial\psi}{\partial\vartheta}) + \frac{1}{r^2\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{r}\right)\psi = 0. \tag{1.51}$$

Hosszú számolás után, a megoldásokat

$$\psi = R(r)Y(\varphi, \vartheta) \tag{1.52}$$

alakban keresve Y-ra éppen az

$$Y_l^m(\varphi, \vartheta) = \left[\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}\right]^{\frac{1}{2}} P_l^m(\cos\vartheta)e^{im\varphi}, \quad l = 0, \ldots, |m|, \quad m = -l, \ldots, -1, 0, 1, \ldots, l \tag{1.53}$$

ún. gömbfüggvényeket kapjuk, ahol P_l^m-ek az asszociált Legendre-polinomok. Még az is igazolható, hogy

$$\int Y_l^m Y_{m'}^{l'} \mathrm{d}\Omega = \delta_{ll'}\delta_{mm'}, \tag{1.54}$$

ahol $\mathrm{d}\Omega$ a térszög szerinti integrálást jelenti. További számolások alapján a Schrödinger-egyenlet megoldásai

$$\psi_{n,l,m} = N_{n,l,m} R_n^l(r) Y_l^m(\varphi, \vartheta). \tag{1.55}$$

Az n konstans neve főkvantumszám, értékei $\mathbb{N}$-beliek, l neve mellékkvantumszám, értékei $0, 1, \ldots, n-1$, m-et pedig mágneses kvantumszámnak nevezzük, értékei $-l, \ldots, l$ között változhatnak. Az l mellékkvantumszám értékét betűvel is szokás jelölni:

l=	0	1	2	3	4	5
	s	p	d	f	g	h

A megengedett energiaértékek pedig

$$E_n = -\frac{e^4 m_e}{2\hbar^2 n^2}. \tag{1.56}$$

Amíg tehát a sajátfüggvény mindhárom kvantumszámtól függ, addig az energia csak n-től. Emiatt E_n, ha $n > 1$, degenerált sajátérték. Valamely E_n sajátértékhez

$$\sum_{l=0}^{n-1} l(2l+1) = 1 + 3 + ... + (2n-1) = n^2 \tag{1.57}$$

számú sajátfüggvény tartozik. Annak ellenére, hogy a $\psi_{n,l,m}$ függvény általános alakja meglehetősen bonyolult, a kis kvantumszámok sajátfüggvényei viszonylag egyszerűek :

$$\begin{aligned}
\psi_{100} &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} a_0^{-3/2} e^{-\rho} \\
\psi_{200} &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} a_0^{-3/2} (2-\rho) e^{-\rho/2} \\
\psi_{210} &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} a_0^{-3/2} \rho e^{-\rho/2} \cos\vartheta \\
\psi_{211} &= \frac{1}{8\sqrt{\pi}} a_0^{-3/2} \rho e^{-\rho/2} \sin\vartheta e^{i\varphi} \\
\psi_{21-1} &= \frac{1}{8\sqrt{\pi}} a_0^{-3/2} \rho e^{-\rho/2} \sin\vartheta e^{-i\varphi}
\end{aligned}$$

Azok a függvények, amelyeknél $m \neq 0$, komplexek. Azonban az

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_{n,l,m} + \psi_{n,l,-m}\right)$$

és a

$$\frac{-i}{\sqrt{2}} \left(\psi_{n,l,m} - \psi_{n,l,-m}\right)$$

lineáris kombinációk egymásra merőleges, valós függvények és ugyanazon energiaszinthez tartozó sajátfüggvények. Valós sajátfüggvények használatakor l-et szokás betűvel jelölni, a mágneses kvantumszámok helyett pedig azokat a koordináta függvényeket tüntetjük fel, amelyekkel arányosak a megfelelő sajátfüggvények. Az $l = 0$ kvantumszámú s pályák csak az atommagtól való távolságtól függenek, a szögektől nem, ezért az s pályáknál nincs koordináta függvény.

$$\psi_{1s} = \psi_{100},\ \psi_{2s} = \psi_{200}$$
$$\psi_{2p_x} = \frac{\psi_{211} + \psi_{21-1}}{\sqrt{2}},\ \psi_{p_y} = \frac{-i}{\sqrt{2}}(\psi_{211} - \psi_{21-1}),\ \psi_{2p_z} = \psi_{210}.$$

Másrészt

$$\mathbf{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\varphi,\vartheta}, \tag{1.58}$$

azaz az impulzusnyomaték nem más, mint a Laplace operátor konstansszorosa.

$$\begin{aligned}
\Delta_{\varphi,\vartheta} Y_l^m(\varphi,\vartheta) &= -l(l+1) Y_l^m(\varphi,\vartheta) \\
&\Rightarrow \mathbf{L}^2 Y_l^m(\varphi,\vartheta) = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\varphi,\vartheta) \\
\frac{\partial}{\partial} Y_l^m(\varphi,\vartheta) &= im Y_l^m(\varphi,\vartheta) \\
&\Rightarrow \mathbf{L}_z Y_l^m(\varphi,\vartheta) = m\hbar Y_l^m(\varphi,\vartheta)
\end{aligned}$$

A H atom elektronjainak impulzusnyomatékának lehetséges értékei az

$$\mathbf{L}^2 = -\hbar^2 \left[(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y})^2 + (z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z})^2 + (x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x})^2 \right] \tag{1.59}$$

operátor sajátértékei közül kerülnek ki. Az impulzusnyomaték lehetséges értékeit nyilván $\sqrt{k}$ adja. Gömbi polárkoordinátákban

$$\mathbf{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right]. \tag{1.60}$$

Ekkor a sajátértékegyenlet az

$$\mathbf{L}^2 = -\hbar^2 \mathbf{A} \tag{1.61}$$

alakot ölti, ahol $\mathbf{A}$ sajátfüggvényei a gömbfüggvények, így

$$\mathbf{L}^2 Y_l^m = \hbar \mathbf{A} Y_l^m = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m \qquad l = 0, 1, 2, \ldots, |m|,\ m = -l, \ldots, l \tag{1.62}$$

alapján az impulzusnyomaték $\sqrt{l(l+1)}\hbar$ lehet. Mivel $\mathbf{L}$ és $\mathbf{L}_z$ felcserélhető,

$$\mathbf{L}_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m, \qquad m = -l, \ldots, l \tag{1.63}$$

Belátható, hogy $\mathbf{L}$ és $\mathbf{L}_z$ felcserélhető a Hidrogén-atom Hamilton-operátorával. Ennek tulajdonítható, hogy a H atom Schördinger egyenletének megoldásfüggvényei az $\mathbf{L}^2$ és az $\mathbf{L}_z$ operátornak is sajátfüggvényei.

$$\mathbf{L}^2\psi_{n,l,m} = l(l+1)\hbar^2\psi_{n,l,m} \text{ és } \mathbf{L}_z\psi_{n,l,m} = m\hbar\psi_{n,l,m} \tag{1.64}$$

Ennek jelentése, hogy amikor a H atom állapotfüggvénye $\psi_{n,l,m}$, akkor az impulzusnyomaték értéke is pontosan meghatározott, a fenti kvantált érték lehet. Ugyanez vonatkozik az impulzusnyomaték z komponensére is, ha a tér egyik iránya - amelyet a z tengely irányának veszünk - ki van tüntetve (pl. homogén mágneses térrel).

2. fejezet

Reprezentáció-elmélet

Első fontos állomásunk a cél felé haladó úton a csoportok reprezentációja. A csoportelméletben igen fontos és magának teret követelő kérdés, hogy egy adott, tetszőleges absztrakt csoportnak milyen és hány különböző konkrét realizációja (reprezentációja, másnéven ábrázolása) van.

A fejezet további részében a következő jelöléseket fogom használni:

$\mathcal{G}$	egy tetszőleges absztrakt csoport
V	tetszőleges vektortér
$\mathrm{End}(V)$	V endomorfizmusainak (transzformációinak) félcsoportja
$\mathrm{GL}(V) = \mathrm{Aut}(V)$	V invertálható transzformációinak (automorfizmusainak) csoportja
$\mathcal{L}(V)$	V korlátos transzformációinak normált tere (abban az esetben, ha V normált tér)

2.1. Mi az a reprezentáció?

2.1.1. Definíció. *A $\varphi : \mathcal{G} \to \mathrm{GL}(V)$ homomorfizmus, a $\mathcal{G}$ csoport egy reprezentációja.*

$$\varphi(R_1R_2) = \varphi(R_1)\varphi(R_2) \qquad \forall R_1, R_2 \in \mathcal{G} \tag{2.1}$$

Ha V véges dimenziós, akkor a reprezentáció dimenziója éppen a vektortér dimenziója. Az adott reprezentáció hű, ha φ izomorfizmus.

2.1.2. Definíció. *Egy reprezentációt reducibilisnak nevezünk, ha van egy $V_0 \leq V$ nemtriviális altér, mely invariáns a G hatása alatt, azaz*

$$\varphi(R)v \in V_0 \quad \forall v \in V_0 \forall R \in \mathcal{G}, \tag{2.2}$$

irreducibilis, ha nincs ilyen altér.
Teljesen reducibilis, ha felbomlik invariáns alterek direktösszegére.

A φ adott reprezentáció endomorfizmus-algebrája $\mathrm{End}^{\mathcal{G}}(V) = \{T \in \mathrm{End}(V) | T\varphi(g) = \varphi(g)T \; \forall g \in \mathcal{G}\}$

2.1.3. Definíció. *Egy reprezentáció unitér, ha $(V, \langle\cdot,\cdot\rangle) = \mathscr{H}$ Hilbert-tér és*

$$\langle u, v\rangle = \langle \varphi(R)u, \varphi(R)v\rangle \qquad \forall u, v \in \mathscr{H}, \; \forall R \in \mathcal{G}. \tag{2.3}$$

2.2. Irreducibilitás

2.2.1. Állítás. *Egy véges csoport minden komplex reprezentációja teljesen reducibilis.*

2.2.1. Lemma (Schur-0.).

$$\varphi \textit{ irreducibilis} \;\Leftarrow\; \mathrm{End}^{\mathcal{G}}(V) \textit{ osztó algebra} \tag{2.4}$$

Bizonyítás. $\varphi T = T\varphi$ miatt $\mathrm{Ker}\, T$ és $\mathrm{Im}\, T$ φ invariáns altér, így $\mathrm{Ker}\, T = \{0\}$ vagy $\mathrm{Im}\, T = \{0\}$. Az első eset azt jelenti, hogy T invertálható, a második esetben pedig T az azonosan 0 leképezés.

2.2.2. Lemma (Schur-I). *Legyen adott egy $\{e_1, \ldots, e_n\}$ bázis V-ben és $\varphi : \mathcal{G} \to GL(n, \mathbb{C})$ reprezentáció. Ekkor ha φ irreducibilis és $\exists M \in GL(n, \mathbb{C})$, melyre*

$$\varphi(R)M = M\varphi(R) \; \forall R \in \mathcal{G}, \tag{2.5}$$

akkor az M mátrix szükségképpen az egységmátrix konstans-szorosa.

2.2.3. Lemma (Schur-II). *Ha adott $\varphi : \mathcal{G} \to GL(V)$ és $\psi : \mathcal{G} \to GL(W)$ két irreducibilis reprezentáció, ahol V és W $\mathbb{C}$ feletti vektorterek, valamint van egy $M \in \mathrm{Hom}(V, W)$ leképezés, melyre*

$$M\varphi(R) = \psi(R)M \qquad \forall R \in \mathcal{G}, \tag{2.6}$$

akkor

$$M \begin{cases} = 0 & \textit{ha } \dim V \neq \dim W \\ \in \mathrm{Aut}(V) & \textit{ha } \dim V = \dim W. \end{cases} \tag{2.7}$$

2.3. Unitaritás

2.3.1. Tétel (Weyl). *Véges dimenziós reprezentációk mindig unitérré tehetők.*

A következő skalárszorzat bevezetésével elérhető az unitaritás.

$$\langle x, y\rangle' := \frac{1}{|\mathcal{G}|}\sum_{R\in\mathcal{G}} \langle \varphi(R)x, \varphi(R)y\rangle \tag{2.8}$$

Nemvéges csoportok esetén ez annyiban módosul, hogy az összegzés helyett az invariáns mérték szerint kell integrálni, de erről később esik szó.

2.3.1. Állítás. *Ha φ unitér reprezentáció és $W \leq V$ invariáns altér, akkor $W^\perp$ is.*

Bizonyítás: Legyen $x \in W^\perp$. Ekkor $\forall y \in W$ esetén $\langle x, y\rangle = 0$. φ unitér volta miatt $\langle \varphi(R)x, \varphi(R)y\rangle = \langle x, y\rangle = 0$. Mivel W invariáns altér, ezért $\exists y' \in W$, hogy $\varphi(R)y' = y$, így $\langle \varphi(R)x, \varphi(R)y'\rangle = \langle \varphi(R)x, y\rangle$, másrészről $\langle \varphi(R)x, \varphi(R)y'\rangle = \langle x, y'\rangle = 0$. A két utóbbi egyenlőséget összevetve kapjuk, hogy $\varphi(R)x \in W^\perp$.

2.3.1. Következmény. *Egy csoport (unitér) reprezentációja előáll irreducibilis reprezentációk direkt-összegeként. Ugyanis ha van nemtriviális invariáns altér, akkor annak merőlegese is invariáns. Így a reprezentáló mátrix alakja*

$$\begin{bmatrix} \varphi_1(R) & 0 \\ 0 & \varphi_2(R) \end{bmatrix}. \tag{2.9}$$

Az eljárást folytatva pedig irreducibilis reprezentációk összegét kapjuk.

Jelölés:

1. $L : \mathcal{G} \to \mathrm{Aut}(\mathcal{G})$ legyen a következő:

$$L(g)h := gh$$

2. $R : \mathcal{G} \to \mathrm{Aut}(\mathcal{G})$ pedig:

$$R(g)h := hg$$

Világos, hogy L és R maguk is homomorfizmusok, vagyis $R, L \in \mathrm{Hom}(\mathcal{G}, \mathrm{Aut}(\mathcal{G}))$.
A legkézenfekvőbb mód reprezentációk gyártásához a következő:

1. Tegyük fel, hogy adott egy W $|\mathcal{G}|$ dimenziós vektortér $\mathbb{K}$ test felett $\{e_{g_1}, \ldots, e_{g_n}\}$ bázissal és tekintsük a következő $W \to W$ lineáris leképezéseket:

   - $\varphi_L(g)e_h := e_{L(g)h} = e_{gh}$
   - $\varphi_R(g)e_h := e_{R(g^{-1})h} = e_{hg^{-1}}$

   Könnyen leellenőrizhető, hogy mind a kettő homomorfizmus.

2. A második mód pedig az, hogy tekintjük az $\mathcal{F}_\mathcal{G}$ vektorteret és a következő $\mathcal{F}_\mathcal{G} \to \mathcal{F}_\mathcal{G}$ lineáris leképezéseket:

   - $(\varphi_L(g)f)(h) := (f \circ L(g)^{-1})(h) = f(g^{-1}h)$

- $(\varphi_R(g)f)(h) := (f \circ R(g))(h) = f(hg)$

Ezek a reguláris reprezentációk. Az utóbbi azért szerencsésebb, mert független a bázisválasztástól.

2.3.2. Állítás. *Egy tetszőleg irreducibilis reprezentáció dimenziója és multiplicitása a reguláris reprezentációban megegyezik.*

2.4. Karakter

2.4.1. Definíció. *Tegyük fel, hogy a reprezentáció véges dimenziós és adott egy $\{e_1, \ldots, e_n\}$ bázis. Ekkor*
$\varphi : \mathcal{G} \to GL(n, \mathbb{C})$. *Adott $R \in \mathcal{G}$ elem karaktere alatt a*

$$\chi(R) = \operatorname{Tr} \varphi(R) \tag{2.10}$$

mennyiséget értjük.

2.4.1. Megjegyzés. *A $\operatorname{Tr} : GL(V) \to \mathbb{C}$ függvény bázistól független, ugyanis*

$$\operatorname{Tr}(S^{-1}\varphi(R)S) = \operatorname{Tr}(SS^{-1}\varphi(R)) = \operatorname{Tr}(\varphi(R)).$$

2.4.1. Állítás. *A karakter tulajdonságai:*

1. *A karakter osztálytulajdonság (belső automorfizmusokra invariáns)*
2. $\chi(e) = \dim V$
3. $\chi(R^{-1}) = \chi(R)^*$
4. $\chi_{V_1 \oplus V_2} = \chi_{V_1} + \chi_{V_2}$ *és* $\chi_{V_1 \otimes V_2} = \chi_{V_1}\chi_{V_2}$

2.5. Ortogonalitás

Tegyük fel, hogy $\mathcal{G}$ egy véges csoport és vezessük be a következő skalárszorzatot az $\mathcal{F}_\mathcal{G} := \{f : \mathcal{G} \to \mathbb{C} | f \text{ függvény}\}$ téren:

$$\langle f, g \rangle_\mathcal{G} = \frac{1}{|\mathcal{G}|} \sum_{R \in \mathcal{G}} f(R)^* g(R) \tag{2.11}$$

Ekkor $(\mathcal{F}, \langle \cdot, \cdot \rangle_\mathcal{G})$ egy $|\mathcal{G}|$ dimenziós Hilbert-tér lesz.

2.5.1. Tétel (Ortogonalitási tétel). *A karakter ortogonalitási tulajdonságai:*

1. *Ha φ irreducibilis, akkor $||\chi_V||_{\mathcal{G}} = 1$,*

2. *ha $\varphi : \mathcal{G} \to \mathrm{GL}(V)$ és $\psi : \mathcal{G} \to \mathrm{GL}(W)$ irreduciblis, nem izomorf reprezentációk ($V \not\cong W$), akkor $\langle \chi_V, \chi_W \rangle_{\mathcal{G}} = 0$.*

2.5.1. Állítás. *Az irreducibilis karakterek egy bázisát adják a komplex osztályfüggvényeknek. Azaz minden olyan $f : \mathcal{G} \to \mathbb{C}$ függvény, mely invariáns a belső automorfizmusokra nézve, felírható a karakterek lineáris kombinációjaként.*

2.5.2. Állítás (Második ortogonalitási tétel). *Bármely két C, C' konjugált osztályra*

$$\sum_{\chi} \chi(C)^* \chi(C') = \begin{cases} \frac{|\mathcal{G}|}{|C|} & \text{ha } C = C' \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases} \tag{2.12}$$

ahol az összegzés az összes irreducibilis reprezentáció karakterére történik.

2.5.2. Tétel. *i. Jelölje az i-edik irreducibilis reprezentáció dimenzióját m_i. Tegyük fel, hogy a vizsgált csoportnak r számú nem izomorf irreducibilis reprezentációja van. Ekkor*

$$\sum_{i=1}^{r} m_i = |\mathcal{G}|$$

ii. Egy csoport ireducibilis reprezentációinak száma megegyezik a csoport osztályainak számával.

2.5.1. Lemma (Schur-féle ortogonalitás). *Tegyük fel, hogy adott két irreducibilis reprezentáció: (π_1, V_1) és (π_2, V_2). Ekkor*

$$\sum_{R \in \mathcal{G}} [\pi_1(R)]^*_{ij} [\pi_2(R)]_{kl} = 0 \tag{2.13}$$

ha a két reprezentáció nem izomorf. Ha a π_1 reprezentáció unitér, akkor

$$\frac{1}{|\mathcal{G}|} \sum_{R \in G} [\pi_1(R)]^*_{ij} [\pi_1(R)]_{kl} = \mathrm{dim} V_1 \delta_{ik} \delta_{kl} \tag{2.14}$$

2.6. Reprezentációk direktszorzata és direktszorzatok reprezentációja

2.6.1. Definíció. *Legyen $\varphi : \mathcal{G} \to \mathrm{GL}(V_1)$ és $\psi : \mathcal{G} \to \mathrm{GL}(V_2)$ a $\mathcal{G}$ csoport reprezentációja. Ekkor a két reprezentáció tenzorszorzatán, egy $\varphi \otimes \psi : \mathcal{G} \to V_1 \otimes V_2$ homomorfizmust értünk, melyre*

$$(\varphi \otimes \psi)(R)(v_1 \otimes v_2) = \varphi(R) v_1 \otimes \psi(R) v_2. \tag{2.15}$$

2.6.1. Állítás. *Ha* $\boldsymbol{a} : \mathcal{G}_1 \to U$ *és* $\boldsymbol{b} : \mathcal{G}_2 \to V$ *reprezentációk, akkor* $\boldsymbol{d} : \mathcal{G}_1 \times \mathcal{G}_2 \to GL(U \otimes V)$ *leképezés* $\mathcal{G}_1 \times \mathcal{G}_2$ *egy reprezentációját adja.*

Bizonyítás. Legyen $\{e_i\}_{i=1}^n$ bázis U-n és $\{f_j\}_{j=1}^m$ bázis V-n és jelölje $\{e^i\}_{i=1}^n$, valamint $\{f^j\}_{j=1}^m$ a duális bázisukat.

$$(\mathbf{a}(A_k))_{ij} = (e^i|\mathbf{a}(A_k)e_j) \qquad (\mathbf{b}(B_l))_{st} = (f^s|\mathbf{b}(B_l)f_t)$$

Ekkor

$$\begin{aligned}\mathbf{d}(A_kB_l)_{ijst} &= \big(e^i \otimes f^s|\mathbf{d}(A_kB_l)(e_j \otimes f_t)\big) = \big(e^i \otimes f^s|(\mathbf{a}(A_k) \otimes \mathbf{b}(B_l))(e_j \otimes f_t))\big) = \\ &= \big(e^i \otimes f^s|\mathbf{a}(A_k)e_j \otimes \mathbf{b}(B_l)f_t\big) = \big(e^i|\mathbf{a}(A_k)e_j\big)\,(f^s|\mathbf{b}(B_l)f_t) = \mathbf{a}(A_k)_{ij}\mathbf{b}(B_l)_{tu}.\end{aligned}$$

Másrészt

$$\begin{aligned}\mathbf{d}(A_kB_l)\mathbf{d}(A_{k'}B_{l'}) &= \mathbf{a}(A_k) \otimes \mathbf{b}(B_l) \cdot \mathbf{a}(A_{k'}) \otimes \mathbf{b}(B_{l'}) = \\ &= \mathbf{a}(A_k)\mathbf{a}(A_{k'}) \otimes \mathbf{b}(B_l)\mathbf{b}(B_{l'}) = \mathbf{a}(A_kA_{k'})\mathbf{b}(B_lB_{l'}) = \\ &= \mathbf{d}(A_kA_{k'}B_lB_{l'}).\end{aligned}$$

Legyen adva U-n és V-n egy $\{e_i\}_{i=1}^n$ és $\{f_j\}_{j=1}^m$ bázis. Ekkor $\mathbf{d}(AB)$ tenzorát a következőképpen lehet számszerűsíteni:

$$d_{ijkl} = (\mathbf{d}(AB))_{ijst} = \big(e^i \otimes f^s|\mathbf{d}(AB)(e_j \otimes f_t)\big)$$

A fentiek alapján

$$\mathbf{d}(A_kB_l)_{ijst} = \mathbf{a}(A_k)_{ij}\mathbf{b}(B_l)_{st}. \tag{2.16}$$

2.6.2. Állítás. *Legyen* $A \in \mathrm{End}(V_1)$ *és* $B \in \mathrm{End}(V_2)$. *Ekkor*

i. $\mathrm{Tr}(A \otimes B) = \mathrm{Tr}\,A\,\mathrm{Tr}\,B$

ii. $\det(A \otimes B) = (\det A)^{\dim V_1}(\det B)^{\dim V_2}$

iii. $\mathrm{Eig}(A \otimes B) \subseteq \mathrm{Eig}(A) \cdot \mathrm{Eig}(B)$

2.6.3. Állítás. *Ha* $\boldsymbol{a}$ *és a* $\boldsymbol{b}$ *reprezentáció irreducibilis volt, akkor* $\boldsymbol{d}$ *is az.*

Bizonyítás. Legyen $W \leq U \otimes V$ invariáns altér. Ekkor

$$\begin{aligned}U_0 &:= \{u \in U|\forall\ u \in U\ u \otimes v \in W\} \\ V_0 &:= \{v \in V|\forall\ v \in V\ u \otimes v \in W\}.\end{aligned}$$

Állítás: $U_0 \leq U$ és $V_0 \leq V$ vektortér és

$$W = \mathrm{Span}\{u \otimes v|u \in U_0, v \in V_0\} = U_0 \otimes V_0$$

U_0 és V_0 vektortér volta könnyen belátható, valamint $u \in U_0$ és $v_0 \in V_0$ esetén az értelmezés miatt, $u \otimes v \in W$, tehát $U_0 \otimes V_0 \subset W$. Most legyen $w \in W$ egy adott elem. Ekkor $w = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i (u_i \otimes v_i)$, ahol $u_i \in U, v_i \in V$ és az előállításban szereplő tenzorok lineárisan függetlenek. A lineáris függetlenség miatt nem fordulhat elő, hogy $\exists u_i \otimes v_i \notin W$, vagyis minden i-re $u_i \otimes v_i \in W$, azaz $w \in U_0 \otimes V_0 = \mathrm{Span}\{u \otimes v | u \in U_0, v \in V_0\}$.
Következőnek belátjuk, hogy U_0 és V_0 **a**-, illetve **b**-invariánsak. Legyen $u \in U_0, A \in \mathcal{G}_1$. Ekkor a $v := \mathbf{b}(B)v',\ B \in \mathcal{G}_2$ választással

$$\mathbf{a}(A)u \otimes v = \mathbf{a}(A)u \otimes \mathbf{b}(B)v' = \mathbf{d}(AB)(u \otimes v').$$

Mivel $u \in U_0$ miatt $u \otimes v' \in W$ és W invarianciája miatt az egyenlőség utolsó tagja W-beli, így

$$\mathbf{d}(AB)(u \otimes v') = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i (u_i \otimes v_i) = \mathbf{a}(A)u \otimes \mathbf{b}(B)v' \in W,$$

ahol $u_i \in U_0$ és $v_i \in V_0$. Másrészről

$$\begin{aligned} \mathbf{a}(A)u &= \sum_{k=1}^{m} \beta_k u_k \\ \mathbf{b}(B)v' &= \sum_{l=1}^{r} \gamma_l v_l \text{ így,} \\ \mathbf{a}(A)u \otimes \mathbf{b}(B)v' &= \sum_{k=1}^{m} \sum_{l=1}^{r} \beta_k \gamma_l (u_k \otimes v_l) \ \in W. \end{aligned}$$

Az előbbi érvelés alapján minden k-ra és l-re $u_k \otimes v_l \in W$, következésképpen $u_k \in U_0, k = 1, \ldots, m$, $v_l \in V_0, l = 1, \ldots, r$, tehát $\mathbf{a}(A)U_0 \subset U_0, \forall A \in \mathcal{G}_1$ és $\mathbf{b}(B)V_0 \subset V_0, \forall B \in \mathcal{G}_2$. Mivel **a** és **b** irreducibilis reprezentációk voltak, így U_0 és V_0 vagy triviálisak, vagy megegyeznek U-val, illetve V-vel. Ha U_0 vagy V_0 bármelyike nulla altér, akkor tenzorszorzat definíciója szerint $U_0 \otimes V_0$ is nulla altér.

Másik bizonyítás. Legyen adott $\mathscr{E}$ és $\mathscr{F}$ bázis U-ban és V-ben. Tudjuk, hogy $\mathscr{E} \otimes \mathscr{F}$ bázis $U \otimes V$-ben. Legyen $W \leq U \otimes V$ **d** invariáns altér. Ekkor létezik $U_0 \leq U$ és $V_0 \leq V$ altér, hogy $W = U_0 \otimes V_0$. $\{e_i \otimes f_j\}_{\substack{1 \leq i \leq n \\ 1 \leq j \leq m}}$ bázis $U \otimes V$-ben, így W minden eleme is felírható ezek lineáris kombinációjaként. Legyen $\{e_{i_k} \otimes f_{j_l}\}_{\substack{1 \leq k \leq n_0 \\ 1 \leq l \leq m_0}}$ bázis W-ben, ahol $n_0 \leq n$ és $m_0 \leq m$, valamint

$$\begin{aligned} U_0 &: = \mathrm{Span}\{e_{i_k}\}_{1 \leq k \leq n_0} \\ V_0 &: = \mathrm{Span}\{f_{j_l}\}_{1 \leq l \leq m_0}. \end{aligned}$$

Megmutatjuk, hogy U_0 és V_0 invariáns **a**-ra, illetőleg **b**-re. Először is jegyezzük meg, hogy $U_0 \otimes V_0 = W$! A $\{e_{i_k} \otimes f_{j_l}\}$ bázisvektorok (tenzorok) kifeszítik W-t, valamint $e_{i_k} \in U_0$ és $f_{j_l} \in V_0$ miatt $U_0 \otimes V_0 \leq W$. Most legyen adott $w \in W$. Ekkor $w = \sum_{\substack{k=1,\ldots,n_0 \\ i=1,\ldots,m_0}} \alpha_{i_k} \beta_{j_k}\ e_{i_k} \otimes f_{j_l}$

miatt
$w \in U_0 \otimes V_0 = \mathrm{Span}\{e_{i_k} \otimes f_{j_l} | k = 1, \dots, n_0 \ l = 1, \dots, m_0\}$, tehát $U_0 \otimes V_0 = W$. Most pedig megmutatjuk az invarianciát:
Legyen $u \in U_0, v \in V_0$. Ekkor tudjuk, hogy $u \otimes v \in W$, következésképpen $\mathbf{d}(AB)\ u \otimes v \in W$. Másfelől

$$\mathbf{d}(AB)\ u \otimes v = \mathbf{a}(A)u \otimes \mathbf{b}(B)v.$$

Tekintsük a

$$\mathbf{d}(AB)u \otimes v = \sum_{\substack{1 \le k \le n_0 \\ 1 \le l \le m_0}} \alpha_{i_k} \beta_{j_l} e_{i_k} \otimes f_{j_l}$$

$$\mathbf{a}(A)u = \sum_{i=1}^{n} \alpha'_i e_i$$

$$\mathbf{b}(B)v = \sum_{j=1}^{m} \beta'_j f_j$$

előállításokat. Ekkor

$$\mathbf{d}(AB)u \otimes v = \mathbf{d}(AB)u \otimes v = \sum_{\substack{1 \le k \le n_0 \\ 1 \le l \le m_0}} \alpha_{i_k} \beta_{j_l} e_{i_k} \otimes f_{j_l} =$$

$$= \mathbf{a}(A)u \otimes \mathbf{b}(B)v = \sum_{i=1}^{n} \alpha'_i e_i \otimes \sum_{j=1}^{m} \beta'_j f_j = \sum_{\substack{1 \le i \le n \\ 1 \le j \le m}} \alpha'_i \beta'_j \ e_i \otimes f_j,$$

azaz

$$\sum_{\substack{1 \le k \le n_0 \\ 1 \le l \le m_0}} \alpha_{i_k} \beta_{j_l} e_{i_k} \otimes f_{j_l} = \sum_{\substack{1 \le i \le n \\ 1 \le j \le m}} \alpha'_i \beta'_j \ e_i \otimes f_j. \tag{2.17}$$

Jobb oldalra rendezve

$$0 = \sum_{\substack{1 \le i \le n \\ 1 \le j \le m}} \alpha''_i \beta''_j \ e_i \otimes f_j,$$

ami csak úgy lehet, hogy $\alpha''_i \beta''_j = 0,\ i = 1, \dots, n; j = 1, \dots, m$, ahol

$$\alpha''_i \beta''_j = \begin{cases} \alpha'_i \beta'_j - \alpha_i \beta_j & \text{ha } i \in \{i_1, \dots, i_{n_0}\},\ j \in \{j_1, \dots, j_{m_0}\} \\ \alpha'_i \beta'_j & \text{egyébként} \end{cases}.$$

Speciálisan $\alpha'_i \beta'_j = 0,\ i \notin \{i_1, \dots, i_{n_0}\}, j \notin \{j_1, \dots, j_{m_0}\}$. Ezek szerint $\alpha'_i = 0$ vagy $\beta'_j = 0$. Az egyszerűség kedvéért legyen $I_1 := \{i_1, \dots, i_{n_0}\}$ és $J_2 := \{j_1, \dots, j_{m_0}\}$ Több eset lehetséges:
i. Ha lenne olyan $i \notin I_1$, hogy $\alpha'_i \neq 0$, akkor minden $j \notin J_1$ esetén $\beta'_j = 0$, ami azt jelentené, hogy $v \in V_0 = \mathrm{Span}\{e_{i_k}\}_{1 \le k \le n_0}$. Ekkor viszont erre az i-re $\{e_i \otimes f_{j_l}\}_{1 \le l \le m_0} \nsubseteq W$, azaz a (2.17) egyenlőség jobboldala W-beli, míg a baloldala tartalmaz egy nem W-beli elemet, következésképp-

pen nem lehet W-beli, ez pedig ellentmondásra vezet. Hasonló érvelés adható a $\beta'_j \neq 0$ esetre.
ii. Minden $i \notin I_1$, $j \notin J_1$ indexre $\alpha'_i = 0 = \beta'_j$, $i \notin I_1$, $j \notin J_1$, ez pedig azt jelenti, hogy $\mathbf{a}(A)u \in U_0$ és $\mathbf{b}(B)v \in V_0$. A két reprezentáció irreducibilitása miatt pedig U_0 és V_0 triviális alterek ($U \otimes \{0_V\} = \{0\} = \{0_U\} \otimes V$), következésképpen $\mathbf{d} = \mathbf{a} \otimes \mathbf{b} : \mathcal{G}_1 \times \mathcal{G}_2 \to \mathrm{End}(U \otimes V)$ irreducibilis. Ezzel bebizonyítottuk az állításunkat.

2.7. Folytonos csoportok

Azok a definíciók és tételek, melyek nem használták ki az adott csoport végességét, gond nélkül átvihetők folytonos (nemvéges) csoportok esetére is. Amelyek nem, azokról most külön essen néhány szó.

2.7.1. Tétel. *Ha $\mathcal{G}$ kompakt csoport és π reprezentáció $\mathscr{H}$ Hilbert-téren, akkor*

$$\langle x, y \rangle_\pi = \int_G \langle \pi(a)x, \pi(a)y \rangle \, d\mu(g)$$

skalárszorzat $\mathscr{H}$-n és π unitér erre az új skalárszorzatra nézve.

2.7.1. Következmény. *Egy kompakt csoport minden reprezentációja teljesen reducibilis.*

Az eljárás ugyanaz, mint a véges csoportoknál. Schur lemmái minden egyéb megfontolás nélkül alkalmazható folytonos csoportok esetében is.Véges dimenziós reprezentáció esetén a karakter ugyanúgy értelmezhető, mint a véges csoportok esetében, azonban az ortgonalitási tételek módosulnak:

2.7.2. Tétel. *Legyen (π_1, V_1) és (π_2, V_2) $\mathcal{G}$ két reprezentációja. Ekkor*

$$\int_{\mathcal{G}} \chi_1(g)^* \chi_2(g) d\mu(g) = \mathrm{dimHom}(V_1, V_2).$$

Abban az esetben, ha mindkét reprezentáció irreducibilis

$$\int_{\mathcal{G}} \chi_1(g)^* \chi_2(g) d\mu(g) = \begin{cases} 1 & \text{ha } \pi_1 \backsimeq \pi_2 \\ 0 & \text{egyébként.} \end{cases}$$

2.7.1. Lemma (Schur ortogonalitás). *Két ireducibilis mátrix reprezentáció esetén, a reprezentáló mátrixok együttható orgotonálisak:*

$$\int_{\mathcal{G}} [\pi_1(R)]_{ij} [\pi_2(R)]_{kl} d\mu(R) = 0.$$

2.7.3. Tétel. *1. Egy kompakt csoport minden unitér reprezentációja tartalmaz véges dimenziós részreprezentációt.*

2. Egy kompakt csoport minden unitér irreducibilis reprezentációja véges dimenziós.

2.8. Néhány fontosabb csoport irreducibilis reprezentációja

2.8.1. SO(2)

$$e^{im\varphi} \qquad m \in \mathbb{Z}$$

2.8.2. O(2)

$$D^{(0)}(\{\varphi, d\}) = 1$$
$$D^{(0')}(\{\varphi, 1\}) = 1 \qquad D^{(0')}(\{\varphi, -1\}) = -1$$
$$D^{(m)}(\{\varphi, 1\}) = \begin{bmatrix} e^{-im\varphi} & 0 \\ 0 & e^{im\varphi} \end{bmatrix} \quad D^{(m)}(\{\varphi, -1\}) = \begin{bmatrix} 0 & e^{-im\varphi} \\ e^{im\varphi} & 0 \end{bmatrix}$$

A karakterek pedig

$$\begin{aligned} \chi^{(0)} &= 1 \\ \chi^{(0')}(\{\varphi, 1\}) &= 1 \qquad \chi^{(0')}\{\varphi, -1\} = -1 \\ \chi^{(m)}(\{\varphi, 1\}) &= 2\cos\varphi \quad \chi^{(m)}(\{\varphi, -1\}) = 0 \end{aligned} .$$

2.8.3. O(3)

Először $SO(3)$ irreducibilis ábrázolásait ismeretjük, majd ezek segítségével megszerkeszthetők $O(3)$ irreducibilis ábrázolásai. Euler szögeket használva az irreducibilis ábrázolások a következők:

$$D^{(j)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{m'm} = \sum_k (-1)^k \frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!}}{(j-m'-k)!(j+m-k)!k!(k+m'-m)!} \times \tag{2.18}$$

$$\times\, e^{im'\alpha} \cos^{2j+m-m'-2k}(\frac{\beta}{2}) \sin^{2k+m'-m}(\frac{\beta}{2}) e^{im\gamma} \qquad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \ldots \tag{2.19}$$

A Z tengely körüli forgatás mátrixa rendkívül egyszerű:

$$D^{(j)}(\{\alpha, 0, 0\}) = \begin{bmatrix} e^{-ij\alpha} & 0 & 0 & \ldots \\ 0 & e^{-i(j-1)\alpha} & 0 & \ldots \\ & & \ddots & \\ 0 & \ldots & 0 & e^{ij\alpha}. \end{bmatrix} \tag{2.20}$$

Mivel minden azonos szögű forgatás ekvivalens, így karakterük ugyanaz. Egy φ szögű forgatás karaktere

$$\chi^{(j)}(\varphi) = \begin{cases} 1 + 2\cos\varphi + \ldots + 2\cos j\varphi & j \in \mathbb{N} \\ 2\cos\frac{\varphi}{2} + 2\cos\frac{3\varphi}{2} + \ldots + 2\cos j\varphi & j \in \mathbb{N} + \frac{1}{2} \end{cases} . \tag{2.21}$$

$O(3)$ pedig nem más, mint $SO(3)$ és az egységmátrixból, illetve az inverzióból álló 2 elemű csoport direkt szorzata. Ez a két csoport kommutatív, így $O(3)$ irreducibilis reprezentációi nem mások, mint ezen két csoport irreducibilis reprezentációinak direkt szorzata.

2.8.4. $\mathbf{S_n}$

Általános képlet nincs, a permutációk összes irreducibilis ábrázolására, de megadható egy eljárás, aminek a segítségével felépíthető. $S_2 = \{id, (12)\}$ kommutatív csoport, így irreducibilis ábrázolásai mind egydimenziósak:

$$D^{(0)}(R) = 1 \tag{2.22}$$

$$\overline{D}^{(0)}(id) = 1 \quad \overline{D}^{(0)}((12)) = -1. \tag{2.23}$$

S_2-nek más irreducibilis ábrázolása nincsen. Az egydimenziós ábrázolások mindig irreducibilisek, így $\sigma \in S_n$ esetén a $\overline{D}^{(0)}(\sigma) = \epsilon_\sigma$ és a $D^{(0)}(\sigma) = 1$ (ahol ϵ_σ a σ inverziós száma) antiszimmetrikus illetve szimmetrikus irreducibilis ábrázolások. Tekintsük most az A_n páros permutációk részcsoportját. Erről tudjuk, hogy normálosztó S_n-ben, mivel elemszáma $n!/2$ és legyen adott egy $D(R)$ A_n-nek irreducibilis reprezentációja. Ekkor a

$$\overline{D}^{(k)}(R) = D^{(k)} \otimes \overline{D}^{(0)}(R) = \epsilon_R D^{(k)}(R) \; R \in A_n \tag{2.24}$$

módon gyárthatunk S_n-nek egy irreducibilis reprezentációját. A szimmetrikus csoport különböző iireducibilis ábrázolásainak száma egyenlő n partíciós számával. Ez egyszersmind a kvalitatíven különböző sajátértékek száma. Kitűnik 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-egyenlettől független elv: a Pauli-féle kizárási elv. A következőkben csak a Pauli-elv által nem megtiltott irreducibilis ábrázolásokat ismertetjük. S_n ábrázolázolását a $\mathcal{F} := \{f : \{1, 2, \ldots, n\} \to \{0, 1\}, ffv\}$ 2^n dimenziós függvénytéren végezzük. Ekkor a $\mathbf{P}_R$ operátort hattatva egy $f \in \mathcal{F}$ függvényre kapjuk S_n-nek egy nem irreducibilis 2^n dimenziós $\Delta(R)$ ábrázolását. Ez az ábrázolás a függvények korlátozottsága miatt nem tartalmazza az összes irreducbilis ábrázolást, csak azokat, amelyekre szükségünk lesz. Mivel $\Delta(R)$ nem irreducibilis, ezért felbomlik irreducibilisek összegére: Páros esetben (pl. n=4)

$$\Delta(R) = \begin{cases} \Delta^{(0)}(R) = & D^{(0)} & = D^{(0)} \\ \Delta^{(1)}(R) = & \Delta^{(0)}(R) + D^{(1)}(R) & = D^{(0)} + D^{(1)} \\ \Delta^{(2)}(R) = & \Delta^{(1)} + D^{(2)} & = D^{(0)} + D^{(1)} + D^{(2)} \\ \Delta^{(3)}(R) \sim & \Delta^{(1)} & = D^{(0)} + D^{(1)} \\ \Delta^{(4)}(R) \sim & \Delta^{(0)} & = D^{(0)} \end{cases}.$$

Páratlan n-re pedig:

$$\Delta(R) = \begin{cases} \Delta^{(0)}(R) = & D^{(0)} & = D^{(0)} \\ \Delta^{(1)}(R) = & \Delta^{(0)} + D^{(1)} & = D^{(0)} + D^{(1)} \\ \Delta^{(2)}(R) = & \Delta^{(1)} + D^{(2)} & = D^{(0)} + D^{(1)} + D^{(2)} \\ \Delta^{(3)}(R) \sim & \Delta^{(2)} & = D^{(0)} + D^{(1)} + D^{(2)} \\ \Delta^{(4)}(R) \sim & \Delta^{(1)} & = D^{(0)} + D^{(1)} \\ \Delta^{(5)}(R) \sim & \Delta^{(0)} & = D^{(0)} \end{cases}.$$

A $D^{(k)}$ irreducibilis ábrázolás $\chi^{(k)}(R)$ karaktere pedig egyenlő a $\Delta^{(k)}(R)$ és a $\Delta^{(k-1)}(R)$ ábrázolások karaktereinek különbségével, ahol $\Delta^{(k)}(R)$ karaktere nem más, mint az x_k együtthatója a

$$(1 + x^{\lambda_1} \cdots (1 + x^{\lambda_l}) \qquad (\lambda_1 + \ldots + \lambda_l = n),$$

ahol $\lambda_i, i = 1 \ldots l$ az R ciklusainak hossza.

3. fejezet

A Hamilton-operátor szimmetriái

Most rátérünk a kvantummechanika egyik központi témájára, a Hamilton-operátor szimmetriacsoportjára. Az előző fejezetben megmutattuk, hogy a Hamilton-operátorral felcserélhető operátorok csoportot alkotnak, valamint azt is, hogy egy Hamilton-operátorral felcserélhető operátorhoz tartozó mennyiség, ebben az esetben invariáns az időre nézve. Szintén az előző fejezet eredménye, hogy a

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \mathbf{V} \tag{3.1}$$

Hamilton-operátor invariáns a $O(n)$ hatása alatt, ahol n a rendszerleíró paraméterek száma. Pl. ha a rendszerünk N darab elektronból áll, melyek egy mag körül keringenek és mindegyik elektront az ő térbeli koordinátáival jellemzünk, akkor $n = 3N$. A következőkben a Hamilton-operátor szimmetriáival foglalkozunk behatóbban. Feltesszük, hogy a mag az origóban helyezkedik el, és nyugalomban van (mivel a proton(ok) tömege sokkal nagyobb, mint az elektronoké, így ez a feltevés nem teljesen irreális).

Legyen G egy tetszőleges csoporthatás a fázistéren (általában $\mathbb{R}^n$-en). Definiáljuk az $\mathcal{F}_{\mathbb{R}^n}$ függvénytéren a következő operátorokat:

3.0.1. Definíció.

$$\boldsymbol{P}_R f := f \circ R^{-1} \tag{3.2}$$

3.0.1. Állítás. *A $\boldsymbol{P}_R$ operátorok csoportot alkotnak.*

Bizonyítás:

i. A szorzásra (kompozícióra) való zártság:

$$\mathbf{P}_R\mathbf{P}_S f = \mathbf{P}_R(f \circ S^{-1}) = f \circ S^{-1} \circ R^{-1} = f \circ (RS)^{-1} = \mathbf{P}_{RS} f,$$

vagyis

$$\mathbf{P}_R\mathbf{P}_S = \mathbf{P}_{RS}.$$

ii. Az egységelem: $\mathbf{P}_{I_{\mathbb{R}^n}}$,
ugyanis

$$\mathbf{P}_{I_{\mathbb{R}^n}} f = f \circ I_{\mathbb{R}^n} = f = \mathbf{Id}\ f.$$

iii. *állítás:* $\mathbf{P}_R^{-1} = \mathbf{P}_R^{-1}$.

$$\begin{aligned}\mathbf{P}_R \mathbf{P}_{R^{-1}} f = \mathbf{P}_R(f \circ R) = f \circ R \circ R^{-1} = f = \\ = \mathbf{Id} f,\end{aligned}$$

ebből pedig

$$\mathbf{P}_R^{-1} = \mathbf{P}_{R^{-1}}\ .$$

3.0.1. Következmény. *A $\boldsymbol{P}_R$ operátorok és G izomorf csoportok.*

Bizonyítás: Az előzőek alapján a $\varphi : R \longmapsto \mathbf{P}_R$ homomorfizmus. Most már csak azt kell belátnunk, hogy $Ker\ \varphi = \{I_{\mathbb{R}^n}\}$. Legyen

$$\varphi(R_1) = \varphi(R_2).$$

Ekkor

$$\mathbf{P}_{R_1} f = \mathbf{P}_{R_2} f \qquad \forall f\ \in \mathscr{H},$$

azaz

$$\begin{aligned} f \circ R_1^{-1} &= f \circ R_2^{-1} \\ f \circ R_1^{-1} \circ R_2 &= f \qquad \forall f\ \in \mathscr{H}. \end{aligned}$$

3.0.2. Állítás. *A $\boldsymbol{P}$ operátorok lineárisak.*

Bizonyítás:

$$\mathbf{P}_R(af + bg) = (af + bg) \circ R^{-1} = af \circ R^{-1} + bg \circ R^{-1} = a\mathbf{P}_R f + b\mathbf{P}_R g.$$

3.0.2. Definíció. *Azt mondjuk, hogy a $\boldsymbol{H}$ operátor invariáns G hatása alatt, ha*

$$\boldsymbol{H}\boldsymbol{P}_R = \boldsymbol{P}_R\boldsymbol{H} \qquad \forall R \in G. \tag{3.3}$$

3.0.3. Állítás. *Ha $\boldsymbol{A}$ és $\boldsymbol{B}$ operátorok felcserélhetők, akkor $\boldsymbol{A}$ minden sajátaltere $\boldsymbol{B}$ invariáns és fordítva.*

Bizonyítás. Legyen $\lambda \in \mathrm{Eig}(\mathbf{A})$ és v a hozzá tartozó sajátvektor. Ekkor

$$\mathbf{A}\mathbf{B}v = \mathbf{B}\mathbf{A}v = \mathbf{B}(\mathbf{A}v) = \mathbf{B}\lambda v = \lambda\mathbf{B}v,$$

azaz $\mathbf{B}v$ is λ-hoz tartozó sajátvektor.

3.1. O(n), S_n hatása

A következőkben megmutatjuk, hogy a *Hamilton*-operátor invariáns a $\mathbf{P_R}$ operátorok hatására (itt az $R \in O(n)$). Ehhez egy segédállítást kell felhasználnunk:

3.1.1. Lemma.

$$\Delta \boldsymbol{P}_R f = \boldsymbol{P}_R \Delta f, \quad R \in O(n)$$

Bizonyítás: Mivel $\Delta = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$, ezért elég $\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} f(\mathbf{R}^{-1}x)$-et kiszámolni és összegezni i-re.

$$\frac{\partial}{\partial x_i}\left(f(R^{-1}x)\right) = \left(f(R^{-1}x)\right)'_i = \left(\nabla f\ (R^{-1}x) \cdot R^{-1}\right)_i$$

$\mathbf{R} \in O(n)$ miatt $R^{-1} = R^T$. Ezt beírva a fenti egyenletbe:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}\left(f(R^{-1}x)\right) = (\nabla f\ (R^T x)) \cdot R^T)_i = \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial}{\partial x_k} f(R^T x)(R^T)_{ki} = \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial}{\partial x_k} f(R^T x)(R)_{ik}\ .$$

Következésképpen

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}\left(f(R^{-1}x)\right) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial}{\partial x_k} f(R^T x)(R)_{ik} = \\
&= \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\partial}{\partial x_k} f(R^T x) R_{ik}\right) = \\
&= \sum_{k,l=1}^{n} \frac{\partial^2}{\partial x_l \partial x_k} f(R^T x) R_{ik} R_{il}
\end{aligned}$$

Végül i-re összegezve:

$$\begin{aligned}
\Delta\left(f \circ R^T\right)(x) &= \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}\left(f(R^T x)\right) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{k,l=1}^{n} \frac{\partial^2}{\partial x_l \partial x_k} f(R^T x) R_{ik} R_{il} = \\
&= \sum_{k,l=1}^{n}\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial^2}{\partial x_l \partial x_k} f(R^T x) R_{ik} R_{il} = \\
&= \sum_{l,k=1}^{n} \frac{\partial^2}{\partial x_l \partial x_k} f(R^T x)(R^T R)_{k,l} = \\
&= \sum_{l,k=1}^{n} \frac{\partial^2}{\partial x_l \partial x_k} f(R^T x)\delta_{kl} = \\
&= \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} f(R^T x) = (\Delta f)(R^T x) = (\Delta f)(R^{-1}x).
\end{aligned}$$

A *Hamilton*-operátor általános (időfüggetlen) alakja: $\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \hat{\mathbf{V}}$. Mivel szokás feltenni, hogy a potenciális energia invariáns ortogonális transzformációkra ($V(x) = V(Rx)$), így igaz a következő

3.1.1. Tétel. *A $\boldsymbol{H}$ Hamilton-operátor invariáns $O(n)$ hatása alatt, azaz:*

i. $\boldsymbol{H}$ *felcserélhető a* $\{\boldsymbol{P}_R; R \in O(n)\}$ *operátorcsoport tagjaival,*

ii. Ha ψ *megoldja a* $\boldsymbol{H}\psi = E\psi$ *sajátérték-egyenletet, akkor* $\boldsymbol{P}_R\psi$ *is:*$\boldsymbol{H}\boldsymbol{P}_R\psi = E\boldsymbol{P}_R\psi$

Bizonyítás:

i. A **4. Lemmát** és a $V(x) = V(\mathbf{R}x)$ feltételt felhasználva:

$$\begin{aligned}\mathbf{H}\mathbf{P}_R\psi(x) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x)\right)\mathbf{P}_R\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta(\mathbf{P}_R\psi(x)) + V(x)\mathbf{P}_R\psi(x) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\mathbf{P}_R\Delta\psi(x) + \mathbf{P}_R V(Rx)\psi(x) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\mathbf{P}_R\Delta\psi(x) + \mathbf{P}_R V(x)\psi(x) = \mathbf{P}_R\mathbf{H}\psi(x).\end{aligned}$$

ii. A tétel első részét felhasználva:

$$\mathbf{H}\mathbf{P}_R\psi = \mathbf{P}_R\mathbf{H}\psi = \mathbf{P}_R E\psi = E\mathbf{P}_R\psi.$$

Legyen $\mathscr{H} = \mathscr{L}^2_\lambda(\mathbb{R}^n)$, azaz a négyzetesen Lebesgue-integrálható függvények Hilbert-tere.

3.1.1. Állítás. *A* $\{\boldsymbol{P}_R,\ R \in O(n)\}$ *operátorok a* $\mathscr{H}$ *unitér operátorai, azaz*

$$\forall f, g \in \mathscr{H} \quad \langle \boldsymbol{P}_R f, \boldsymbol{P}_R g\rangle_{\mathscr{H}} = \langle f, g\rangle_{\mathscr{H}}.$$

Bizonyítás: Felhasználva, hogy $R \in O(n)$ és $\det\ R = \det\ R^{-1} = \pm 1$

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{P}_R f, \mathbf{P}_R g\rangle_{\mathscr{H}} &= \int_{\mathbb{R}^n} (\mathbf{P}_R f)^* \mathbf{P}_R g\ d\lambda_{\mathbb{R}^n} = \int_{\mathbb{R}^n} (f \circ R^{-1})^* g \circ R^{-1} d\lambda_{\mathbb{R}^n} = \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} f^* g \circ R^{-1} |\det\ R^{-1}|\ d\lambda_{\mathbb{R}^n} = \int_{R^{-1}(\mathbb{R}^n)} f^* g\ d\lambda_{\mathbb{R}^n} = \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} f^* g = \langle f, g\rangle_{\mathscr{H}}\end{aligned}$$

3.1.1. Következmény. $\{\boldsymbol{P}_R; R \in O(n)\} \subset \mathcal{L}(\mathscr{H})$ *és* $||\boldsymbol{P}_R|| = 1$

A *Schrödinger*-egyenlet csoportja a legtöbb esetben általános fizikai megfontolások alapján meghatározható. Most tekintsünk egy n elektronból álló rendszert, melyben az *általános koordináták* nem mások, mint az egyes elektronok térbeli hely-koordinátái. Legyenek a k-adik elektron koordinátái x_k, y_k, z_k. Előzőek alapján tudjuk, hogy $\mathbf{H}$ felcserélhető a $\mathbf{P}_R, R \in O(3n)$ csoporttal. A következőkben megmutatjuk, hogy az elektronok permutálása és a koordinátarendszer (mint $\mathbb{R}^3$ tér) ortogonális transzformációja szintén $O(3n)$-beli. Legyen $\sigma \in S_n$ és végezzük el a következő transzformációt:

$$R_\sigma : (x_1, y_1, z_1, \ldots, x_n, y_n, z_n) \longmapsto (x_{\sigma 1}, y_{\sigma 1}, z_{\sigma 1}, \ldots, x_{\sigma n}, y_{\sigma n}, z_{\sigma n}).$$

Világos, hogy $R_\sigma^{-1} = R_{\sigma^{-1}}$ és az is, hogy az R_σ-k lineáris transzformációk, melyek permutáció-mátrixokkal reprezentálhatók. Egy általános R_σ a következőképpen néz ki:

$$R_\sigma = \begin{bmatrix} I & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & I & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \\ 0 & I & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix},$$

ahol $0, I \in \mathbb{R}^{3\times 3}$, I az egységmátrix, 0 a zérus-mátrix, a blokkmátrix pedig $n \times n$-es. Minden oszlopában és sorában pontosan egy egységmátrix van, a többi zérusmátrix. Az egységmátrixok helyét pedig a σ permutáció határozza oly módon, hogy pl. a k-adik oszlopban a σ_k helyen van. Könnyen ellenőrizhető, hogy az R_σ mátrix is ortogonális. Csak annyit kell meggondolni, hogy

3.1.2. Állítás.

$$R_\sigma^{-1} = R_\sigma^T, \ azaz \ R_\sigma \in O(3n)$$

Bizonyítás: Tekintsük R_σ-t, mint blokkmátrixot. R_σ az $[x_k, y_k, z_k]^T$ vektort a $[x_{\sigma_k}, y_{\sigma_k}, z_{\sigma_k}]^T$ vektorba viszi. R_σ^T σ_k-adik oszlopában a k-adik helyen van egységmátrix, ami azt jelenti, hogy $[x_{\sigma_k}, y_{\sigma_k}, z_{\sigma_k}]^T$-t viszi $[x_k, y_k, z_k]^T$-ba. Azaz $R_\sigma^T R_\sigma([x_k, y_k, z_k]^T) = [x_k, y_k, z_k]^T$.
Most már tudjuk $\mathbf{P}_\sigma$-t definiálni:

$$\mathbf{P}_\sigma f := f \circ R_\sigma^{-1}$$

A transzformációk erre a fajtájára való invarianca nem más, mint az elektronok fizikai ekvivalenciája és ez a $\mathbf{V}$ potenciál-operátor $\mathcal{G}_{S_n}$-re való invarianciáját (felcserélhetőségét) vonja maga után.
A transzformációk másik fajtája pedig a rendszer elforgatása, azaz: $R_0 \in O(3)$ esetén a

$$\widetilde{R} : ((x_1, y_1, z_1), \dots, (x_n, y_n, z_n)) \longmapsto (R(x_1, y_1, z_1), \dots, R(x_n, y_n, z_n))$$

transzformáció. Megjegyzendő, hogy az $R \in O(3n)$, ugyanis ortogonális tranformációk direkt-összege, vagyis:

$$\begin{bmatrix} R & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & R & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & R \end{bmatrix}.$$

Másrészt pedig $\det \widetilde{R} = (\det R)^n = (\pm 1)^{3n}$. Könnyen látható, hogy $\mathcal{G}^n_{O(3)}$ csoport izomorf $O(3)$-mal, $\mathcal{G}^n_{S_n,3}$ pedig S_n-nel.
Korábban már megmutattuk, hogy a Hamilton-operátor (és így a Schrödinger-egyenlet) invariáns a $\mathcal{G}_{O(n)} = \{\mathbf{P}_R, \ R \in O(n)\}$ operátor-csoportra nézve, vagyis $\mathcal{G}^n_{S_n}, \mathcal{G}^n_{O(3)} \subset \mathcal{G}_{O(3n)}$ miatt ezen csoportok direkt-szorzatára. Vannak olyan fizikai mennyiségek (esetünkben az energia), amelyek szempontjából a $\psi, \mathbf{P}_R\psi$ állapotok ekvivalensek. Ennek jelentése, hogy a ψ és $\mathbf{P}_R\psi$ állapotban ugyanazokat az értékeket szolgáltatja, ugyanakkora valószínűséggel. A $\mathbf{P}_R$ csoportot szokás a fizikai mennyiség szimmetriacsoportjának nevezni. Ily módon az azonos részecskék permutációi és a rendszer elforgatásai által generált csoport az energia szimmetriacsoportja.

A gyakorlatban sokszor nem tudjuk megoldani a Schrödinger egyenletet, legyen az időfüggő, vagy időfüggetlen. Viszont $\mathcal{G}_{\mathbf{H}}$ csoport ismeretében a sajátfüggvények lényeges tulajdonságait előre meg tudjuk mondani. A következő tétel pont erre mutat rá:

3.2. A szimmetriacsoport reprezentációja

Jelöljük $G_{\mathbf{H}}$-val a Hamilton-operátorral fecserélhető operátorok csoportját.

3.2.1. Tétel. *A $\boldsymbol{H}$ operátor bármely E sajátértékéhez tartozó degenerált (többszörös multiplicitással rendelkező) sajátfüggvényei a $G_{\boldsymbol{H}}$ csoport egy reprezentációjának bázisfüggvényei.*

Biz.: Legyen

$$\mathbf{H}\psi_j = E\psi_j,\ j = 1, \ldots, m,$$

azaz legyen E a $\mathbf{H}$-nak m-szeres sajátértéke és legyen $\mathbf{P}_R \in G_{\mathbf{H}}$. Egy korábbi tétel alapján tudjuk, hogy ha ψ_j E-hez tartozó sajátfüggvény, akkor $\mathbf{P}_R\psi_j$ is. Ebből következik, hogy

$$\mathbf{P}_R\psi_j = \sum_{k=1}^{m} D(R)_{kj}\psi_k, \quad j = 1, \ldots, m.$$

Így $(D(R)_{jk})$ az $\mathbf{P}_R$ operátor (illetve az G ha a $\mathbf{P}_R$ operátor egy csoporthatásból származtatott operátor) egy reprezentációját képezi a $\psi_1, ..., \psi_m$ bázison. Ezen mátrixok összessége a $G_{\mathbf{H}}$ egy reprezentációja. Ha $\mathbf{P}_S$-et alkalmazzuk $\mathbf{P}_R\psi$-re :

$$\mathbf{P}_S\mathbf{P}_R\psi_j = \mathbf{P}_S \sum_{k=1}^{m} D(R)_{kj}\psi_k = \sum_{k=1}^{n} D(R)_{kj}\mathbf{P}_S\psi_k = \sum_{k=1}^{m} D(R)_{kj} \sum_{l=1}^{m} D(S)_{lk}\psi_l =$$
$$= \sum_{l,k=1}^{m} D(R)_{kj}D(S)_{lk}\psi_l = \sum_{l,k=1}^{m} D(S)_{lk}D(R)_{kj}\psi_l.$$

Másrészről pedig $\mathbf{P}_S\mathbf{P}_R\psi_j = \mathbf{P}_{SR}\psi_j$, tehát

$$\mathbf{P}_S\mathbf{P}_R\psi_j = \mathbf{P}_{SR}\psi_j = \sum_{k=1}^{m} D(RS)_{kj}\psi_k.$$

Ha itt az együtthatókat egyenlővé tesszük az előző egyenlet együtthatóival,

$$D(SR)_{kl} = \sum_{t=1}^{m} D(S)_{kt}D(R)_{tl}$$

fenállására következtethetünk, vagyis

$$D(SR) = D(S)D(R).$$

Figyelembe véve, hogy $\mathbf{P}_R\psi = \psi \circ R^{-1}$, tulajdonképpen R^{-1}-et ábrázoltuk a $D(R)$ mátrixban. Ezek alapján

$$\psi_j \circ R = \sum_{k=1}^{m} D(R^{-1})_{kj}\psi_k$$

Következésképpen a Hamilton operátor egy adott energiához tartozó sajátaltere a $\mathcal{G}_{\mathbf{H}}$-nak egy invariáns alterét képezi.
Ha az E sajátértékhez tartozó sajátaltérben egy másik $\psi'_j,\ j = 1, \ldots, m$ bázist választunk, akkor az ehhez tartozó $D'(R)$ ábrázolás más lesz, mint az eredeti $D(R)$, de van kapcsolat a kettő között. Legyen

$$\psi'_j = \sum_{k=1}^{m} \alpha_{kj}\psi_k.$$

Ekkor

$$D'(R) = \alpha^{-1}D(R)\alpha.$$

Adott sajátértékekhez tartozó lineáris független sajátfüggvények más választása a megfelelő ábárzolásnak csupán egy hasonlósági transzformációját eredményezi:

3.2.1. Állítás. *A Schrödinger-egyenlet csoportjának adott sajátértékhez tartozó ábrázolása hasonlósági transzformáció erejéig egyértelmű.*

Ha ráadásul a $\psi_j,\ j = 1, ..., m$ függvények ortonormált ábrázolását adják a megfelelő sajátaltérnek, akkor $\mathbf{P}_R$ unitérsége miatt

$$\langle \mathbf{P}_R\psi_k, \mathbf{P}_R\psi_l \rangle = \delta_{kl} \tag{3.4}$$

és így

$$\delta_{kl} = \langle \mathbf{P}_R\psi_k, \mathbf{P}_R\psi_l \rangle = \left\langle \sum_t D(R)_{tk}\psi_t, \sum_u D(R)_{ul}\psi_u \right\rangle = \tag{3.5}$$

$$= \sum_{u,t} D(R)^*_{tk}D(R)_{ul} \langle \psi_t, \psi_u \rangle = \sum_t D(R)^*_{tk}D(R)_{tl}, \tag{3.6}$$

vagyis

$$I = D(R)^*D(R).$$

Innen látszik, hogy

$$\mathbf{P}_R\psi_j = \psi_j \circ R^{-1} = \sum_t D(R^{-1})_{tj}\psi_t = \sum_t D(R)^*_{jt}\psi_t,$$

ami alapján látható, hogy egy ábrázolás mindig unitérré tehető, mivel mindig választható ortonormált bázis a megfelelő sajátaltérben.

3.2.1. Megjegyzés. *A kvantummechanikában a legtöbbször feltehető, hogy egy adott rendszerhez tartozó Hamilton-operátor szimmetriacsoportjának egy sajátaltérhez tartozó reprezentációja irreducibilis. Ez a normális elfajulás esete. A nem irreducibilis esetet véletlen elfajulásnak hívják.*

3.3. Egy elektron, egy paraméter (n=1)

A Hamilton-operátor alakja

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar}{2m_e}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{e^2}{|x|}, \tag{3.7}$$

ahol $-e$ az elektron, $+e$ pedig a proton elektromos töltése, x pedig az elektron távolsága a protontól. Tegyük fel, hogy időben állandó a rendszer energiája, azaz

$$\mathbf{H}\psi = E\psi \tag{3.8}$$

egyenletet kell megoldanunk.

$$\mathbf{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi - \frac{e^2}{|x|}\psi = E\psi \tag{3.9}$$

Az egyenlet invariáns $O(1)$ hatása alatt, ahol $O(1) = \{-1, 1\}$. Így ha ψ megoldja a Schrödinger-egyenletet, akkor $R \in O(1)$ esetén, $\mathbf{P}_R\psi$ is. Ennek következtében

$$\mathbf{H}\mathbf{P}_R\psi = E\mathbf{P}_R\psi. \tag{3.10}$$

Mivel $\mathbf{H}$ E-hez tartozó sajátaltere invariáns a $\mathbf{P}_R$ csoportra, így

$$\mathbf{P}_R\psi(x) = a\psi(x). \tag{3.11}$$

1. Először tegyük fel, hogy a sajátaltér egydimenziós. Ha $R = 1$, akkor a=1, ha pedig $R = -1$, akkor

   $$\mathbf{P}_{-1}\psi(x) = \psi(-x) = a\psi(x). \tag{3.12}$$

   A normálási feltételek miatt $a = 1$ vagy $a = -1$, ami azt jelenti, hogy a megoldásfüggvényünk páros vagy páratlan.

2. Most pedig tegyük fel, hogy a sajátaltér dimenziója k, az ortonormált bázis pedig $\psi_1, \ldots, \psi_k$. Ekkor

   $$\mathbf{P}_R\psi_j = \sum_{l=1}^{k} D(R)_{lj}\psi_l. \tag{3.13}$$

   Tekintve, hogy a bázis ortonormált, a D reprezentáció unitér. Mivel D az $O(1)$ csoportnak reprezentációja, az $O(1)$ csoport pedig kommutatív és egy kommutatív csoport irreducibilis reprezentációja csak 1 dimenziós lehet, így a D reprezentáció reducibilis. Felírható tehát irreducibilis (1 dimenziós) reprezentációk összegeként. Tekintve, hogy ψ_j-k lineárisan

függetlenek, így

$$\begin{bmatrix} \pm 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \pm 1 & 0 & \dots & 0 \\ & & \ddots & & \\ 0 & \dots & 0 & \pm 1 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \pm 1 \end{bmatrix}. \tag{3.14}$$

Azaz, minden sajátfüggvény vagy páros vagy páratlan.

3.4. Egy elektron, két paraméter (n=2)

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) - \frac{e^2}{\sqrt{x^2+y^2}} \tag{3.15}$$

3.4.1. Állítás. *$\boldsymbol{H}$ kommutál $\boldsymbol{P}_R, R \in O(2)$ csoporttal, azaz invariáns $O(2)$ hatása alatt.*

Bizonyítás. A Laplace-operátor invarianciáját már bizonyítottuk, már csak a potenciáltag invarianciáját kell bizonyítanunk.

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_R V(x,y) = V \circ R^{-1}(x,y) &= -\frac{e^2}{\sqrt{(R_{11}x + R_{21}y)^2 + (R_{21}x + R_{22}y)^2}} = \\ &= -\frac{e^2}{\left| R^T \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \right|^2} = -\frac{e^2}{|(x,y)|}, \end{aligned}$$

mivel $O(2)$ ortogonális mátrixból áll (azaz távolság-tartók).

3.4.1. $\mathbf{S_2}$ hatása

1. Először tegyük fel, hogy a sajátaltér dimenziója 1. Ekkor

$$\mathbf{P}_R \psi(x,y) = \psi \circ R^{-1}(x,y) = a\psi(x,y) \qquad R \in S_2. \tag{3.16}$$

   Ugyancsak a normáltság miatt $a = \pm 1$. Ha pl. $R(x,y) = (y,x)$, akkor

$$\psi(x,y) = \pm\psi(y,x), \tag{3.17}$$

   ami azt jelenti, hogy ψ szimmetrikus illetve antiszimmetrikus. $a = \pm 1$ volta úgy is kijött volna, hogy S_2 csoportnak az egydimenziós ábrázolás pont így néz ki.

2. Ha a sajátaltér dimenziója k és ONB-a $\psi_1, \dots, \psi_k$, akkor

$$\mathbf{P}_R \psi_j = \sum_{l=1}^{k} D(R)_{lk} \psi_l \qquad R \in S_2, \tag{3.18}$$

ahol $D(R)$ unitér mátrix. $D(R)$ unitér mátrixreprezentációja az S_2 kommutatív csoportnak, így ha $k > 1$, akkor reducibilis és előáll 1 dimenziós reprezentációk összegeként. Legyen $R_1(x, y) = (x, y)$ és $R(x, y) = (y, x)$. Ekkor

$$R_1 = I_k \qquad R_2 = \begin{bmatrix} \pm 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \pm 1 & 0 & \dots \\ & & \ddots & \\ 0 & \dots & 0 & \pm 1 \end{bmatrix}, \tag{3.19}$$

azaz a függvények szimmetrikus illetve antiszimmetrikusak.

3.4.2. SO(2) hatása

1. Legyen a sajátaltér dimenziója 1. Ekkor

$$\mathbf{P}_R \psi(x, y) = \psi \circ R^{-1}(x, y) = a\psi \qquad \forall R \in SO(2), \tag{3.20}$$

ahol $a = 1$, így a sajátfüggvény ismét szimmetrikus.

2. Legyen most a sajátaltér dimenziója k és $\psi_1, \dots, \psi_k$ egy ortonormált bázis. A sajátaltér $SO(2)$-re való invarianciája miatt

$$\mathbf{P}_R \psi_j = \sum_{l=1}^{k} D(R)_{lj} \psi_l, \tag{3.21}$$

ahol $D(R)$ unitér mátrixcsoport az $O(2)$-nek egy reprezentációja. $SO(2) = \det^{-1}(1)$ a valódi forgáscsoport, mely kommutatív és így irreducibilis ábrázolásai egydimenziósak és

$$D(R(\varphi)) = e^{im\varphi} \qquad \varphi \in [0, 2\pi], m \in \mathbb{Z} \tag{3.22}$$

alakúak. Mivel a reprezentáció k dimenziós és reducibilis, felbomlik k darab irreducibilis reprezentációra:

$$D(R(\varphi)) = \begin{bmatrix} e^{im_1\varphi} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{im_2\varphi} & 0 & \dots \\ & & \ddots & \\ 0 & \dots & 0 & e^{im_k\varphi} \end{bmatrix} \tag{3.23}$$

$SO(2)$-re való invariancia, tehát nem más, mint

$$\mathbf{P}_{R(\varphi)} \psi_j(x, y) = \psi \circ R(\varphi)^{-1} = e^{im_j\varphi} \psi_j(x, y) \qquad \varphi \in [0, 2\pi],\ m \in \mathbb{Z},\quad j = 1, \dots, k. \tag{3.24}$$

3.4.3. O(2) hatása

1. Legyen a sajátaltér dimenziója 1. Ekkor a fenti számoláshoz hasonlóan

$$\mathbf{P}_R\psi(x,y) = a\psi(x,y), \tag{3.25}$$

ahol $a = \pm$, tehát a szimmetrikus illetve antiszimmetrikus eset áll fent.

2. Legyen a sajátaltér dimenziója k, és $\psi_1, \ldots, \psi_k$ a megfelelő ONB. $O(2)$ irreducibilis reprezentációi 1, illetve 2 dimenziósak, így a fenti érvelést analóg módon folytatva

$$D(R) = \begin{bmatrix} D^{(1)}(R) & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & D^{(2)} & 0 & \ldots \\ & & \ddots & \\ 0 & \ldots & 0 & D^{(s)}(R) \end{bmatrix}, \tag{3.26}$$

ahol a $D^{(j)}$ a megfelelő 1 illetve 2 dimenziós irreducibilis ábrázolások. Ha $D^{(j)}$ az egydimenziós ábrázolások egyike, akkor ismét szimmetrikus illetve antiszimmetrikus függvényt kapunk. Ha kétdimenziós az ábrázolás, akkor

$$\mathbf{P}_{\{\varphi,1\}}\psi_j = e^{-im\varphi}\psi_j \text{ és } \mathbf{P}_{\{\varphi,1\}}\psi_{j+1} = e^{im\varphi}\psi_j \tag{3.27}$$

$$\mathbf{P}_{\{\varphi,-1\}}\psi_j = e^{-im\varphi}\psi_{j+1} \text{ és } \mathbf{P}_{\{\varphi,-1\}}\psi_{j+1} = e^{im\varphi}\psi_j. \tag{3.28}$$

Az $n = 3$ paraméter (térbeli jellemzés) már $O(3)$ felépítésének bonyolultsága miatt elég körülményes és hosszadalmas lenne leírni, ezért most erre nem térünk ki. Az előző fejezetben bemutatott irreducibilis reprezentációk segítségével ugyanúgy felírhatók az összefüggések, mint az 1 illetve 2 paraméteres esetben.

3.5. Több elektron, több paraméter ($n = 3N$)

Tegyük fel, hogy rendszerünk N darab elektronból áll és minden elektront 3 paraméter jellemez. Ha feltesszük még, hogy az atommag a koordinátarendszer origójában, nyugalomban van, akkor a Hamilton-operátor a következő alakot ölti:

$$\mathbf{H} = -\left[\sum_{k=1}^{N} \frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_k^2}\right) + \frac{Ze^2}{\sqrt{x_k^2 + y_k^2 + z_k^2}}\right] \tag{3.29}$$

$$+ \frac{1}{2}\sum_{j\neq k} \frac{e^2}{\sqrt{(x_k - x_j)^2 + (y_k - y_j)^2 + (z_k - z_j)^2}}, \tag{3.30}$$

ahol Z az atommagban lévő protonok számát jelenti. A szimmetriák az elektronok permutációiból és a rendszer ortogonális transzformációiból származtathatók. Fent megmutattuk, hogy az elektronok permutálása ($(x_k, y_k, z_k), k = 1, \ldots, N$ hármasok permutálása) szintén ortognális

transzformáció, így elég megmutatni, hogy $O(3N)$ hatása alatt $\mathbf{H}$ invariáns. Mivel $\mathbf{H}$ felírható

$$\mathbf{H} = \sum_{k=1}^{N} \mathbf{H}_k + V_{mag}(x_1, y_1, z_1, \ldots, x_N, y_N, z_N) \tag{3.31}$$

alakban, ahol $\mathbf{H}_k$ nem más, mint az egyelektronos rendszer Hamilton-operátora:

$$\mathbf{H}_k = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_k^2}\right) - \frac{Ze^2}{\sqrt{x_k^2 + y_k^2 + z_k^2}} \tag{3.32}$$

Erről már tudjuk, hogy invariáns $O(3)$ alatt, a második tag, a potenciáltag pedig csak az elektronok egymás közötti távolságától függ, amit a megfelelő transzformációk szintén változatlanul hagynak (forgatás-tükrözés és permutáció). Így $\mathbf{H}$ felcserélhető minden forgatás-tükrözés operátorral és permutáló operátorral. A két operáció felcserélhető, ugyanis mindegy, hogy először forgatok és/vagy tükrözök, majd azután felcserélem az elektronokat, vagy fordítva. Ezek szerint a két csoport direktszorzata a következőképpen néz ki:

$$\{\mathbf{P}_{\widetilde{R}}\mathbf{P}_\sigma, R \in O(3), \sigma \in S_N\}.$$

Egy korábbi tételünk értelmében pedig a direkt-szorzat reprezentációja éppen a reprezentációk direkt-szorzata. Ha ez a két reprezentáció irreducibilis volt, akkor a direkt-szorzat is az lesz. Tegyük fel, hogy

$$\mathbf{H}_k\psi_k(x_k, y_k, z_k) = E_k\psi_k(x_k, y_k, z_k). \tag{3.33}$$

Ekkor a $\Psi(x_1, y_1, z_1, \ldots, x_N, y_N, z_N) = \prod_{k=1}^{N} \psi_k(x_k, y_k, z_k)$ kielégíti a

$$\mathbf{H}\Psi = (\mathbf{H}_1 + \mathbf{H}_2 + \ldots + \mathbf{H}_N)\Psi = (E_1 + E_2 + \ldots + E_N)\Psi \tag{3.34}$$

egyenletet. Az egyelektronos rendszernek ($\mathbf{H}_k$-hoz tartozó sajátértékegyenletnek) ismerjük a megoldásait, ezek a gömbharmonikusok. Így a (3.31) redukált Schrödinger-egyenlet megoldásait is ismerjük. Ezek a gömbharmonikusok szorzatai lesznek. A következő fejezetben be fogjuk mutatni azt az eljárást, hogy a most megismert tudásunk segítségével hogyan lehet az atomszínképeket meghatározni. Világos, hogy a redukált egyenlet még nem szolgáltatja az eredeti egyenlet megoldását közvetlenül, ugyanis az elektron egymásra gyakorolt hatásából származó potenciáltagot kivettük az egyenletből.

4. fejezet

Alkalmazások

4.1. Impulzusmomentum / perdület

Először tekintsük a

$$U_j(t)\psi(x) = \psi(R_j(t)) \quad 1 \leq j \leq 3$$

j-edik tengely körüli forgatás, egyparamtéres unitér csoportját. Legyen ψ ismét Schwartz-függvény. Ekkor

$$\lim_{t\downarrow 0}\left(\frac{U_j(t)\psi(x) - \psi(x)}{t}\right) = \lim_{t\downarrow 0}\left(\frac{\psi(R_j(t)x) - \psi(x)}{t}\right) = \sum_{k,l=1}^{3} \epsilon_{jkl}\mathbf{q}_k\mathbf{p}_l\psi(x),$$

ahol

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & (ijk) \text{ páros permutáció} \\ -1 & (ijk) \text{ páratlan permutáció} \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases}.$$

Ez könnyen ellenőrizhető, ugyanis

$$R_1(t) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos t & -\sin t \\ 0 & \sin t & \cos t \end{bmatrix} \quad R_2(t) = \begin{bmatrix} \cos t & 0 & -\sin t \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin t & 0 & \cos t \end{bmatrix} \quad R_3(t) = \begin{bmatrix} \cos t & -\sin t & 0 \\ \sin t & \cos t & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

A három komponenst összerakva kapjuk, hogy az $\mathbf{L}$ perdület nem más, mint $\mathbf{q}\wedge\mathbf{p}$, ahol $\wedge$ ékszorzat a vektoriális szorzat általánosítása operátorokra. Az azonos szögű forgatások ekvivalensek csoportelméleti értelemben.

A fentiekben láttuk, hogy $\mathfrak{so}_3$ (3 dimenziós) mátrix-reprezentációjában éppen az antiszimmetrikus mátrixok játszanak szerepet.
Az

$$R_k = x_i\frac{\partial}{x_j} - x_j\frac{\partial}{\partial x_i} \quad i,j,k = 1,2,3 \text{ ciklikus sorrenden}$$

pedig a $C^\infty(\mathbb{R}^2)$ téren adott végtelen dimenziós reprezentáció bázisát adja. Könnyen ellenőrizhető az

$$[R_i, R_j] = \epsilon_{ijk}R_k$$

azonosság is. Ez a reprezentáció izomorf az antiszimmetrikus mátrixok általi reprezentációval. Az izomorfiát a

$$\varphi(R_k) = L_k \quad k = 1, 2, 3$$

szolgáltatja. Ha hozzávesszük $\mathfrak{so}_3$ generátoraihoz még a $P_j = \frac{\partial}{\partial x_j}$, $j = 1, 2, 3$ generátorokat, akkor

$$\begin{aligned}
[R_i, R_j] &= \epsilon_{ijk} R_k \\
[R_i, P_j] &= \epsilon_{ijk} P_k \\
[P_i, P_j] &= 0
\end{aligned}$$

mellett egy 6 dimenziós Lie-algebrát kapunk, mely $\mathbb{R}^3$ euklideszi mozgásait generálják.
Ha $f \in C^\infty(\mathbb{R}^3)$ analitikus függvény, akkor a hagyományos exp-t véve

$$\exp(tP_1) f(x_1, x_2, x_3) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \frac{\partial f}{\partial x_1}(x_1, x_2, x_3) = f(x_1 + t, x_2, x_3).$$

Ugyanez a számolás elvégezhető P_2 és P_3 esetében is. A $\mathbf{q}_k$ és az $\mathbf{p}_k$ operátorok is hasonló módon kaphatók. A fentiek alapján $\mathbf{p}_k = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_k}$ operátor a $T(t) f(q_1, \ldots, q_n) = -i\hbar f(q_1, \ldots, q_{k-1}, q_k + h, q_{k+1}, \ldots, q_n)$ operátor-csoportnak a generátora, a $\mathbf{q}_k$ pedig a $T(t) f(q) = e^{tq_k} f(q)$ operátor-csoporté. Ezek szerint az impulzusmomentum megmaradó mennyiség, a Hamilton-operátorral való felcserélhetősége miatt.

4.2. Atomszínképek

Az atomszínképek meghatározása, mérése széles körben elterjedt módszer annak eldöntésére, hogy egy adott fénysugár forrás milyen anyag gerjesztésének hatására jött létre. Ha például egy csillagász kíváncsi, hogy a csillag, amit éppen fürkészik milyen atomokból áll, első lépésnek meghatározza a kisugárzott fény atomszínképét, ami alapján a csillag összetételére vonhat le következtetéseket. Az atomszínkép meghatározása oly módon történik, hogy a bejövő fényt egy prizmán vezetik át, melyen a különböző hullámhosszú fényhullámok különböző szögekben törnek meg a prizmán, így a bejövő fénysugarat felbontják "összetevőire". Korábbi fejezetek alapján tudjuk, hogy a hidrogén atom

$$\left[-\frac{\hbar}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - \frac{e^2}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \right] \Psi(x, y, z) = E\Psi(x, y, z). \tag{4.1}$$

Schrödinger-egyenletének van explicit megoldása. A fenti Hamilton-operátor sajátértékei

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{2\pi R\hbar c}{n^2} = -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2} \qquad n \in \mathbb{N}, \tag{4.2}$$

ahol R az úgy nevezett *Rydberg* állandó. Az energiák negatívak, annak megfelelően, hogy a mag közelében az elektronnak jelentős negatív helyzeti energiája van, hiszen ahhoz, hogy eltávolítsuk a "végtelenbe", ahol a potenciál 0, munkát kell befektetnünk. Itt az egyes szintek különbsége

nő az n főkvantumszám növelésével, ennek fizikai jelentése az, hogy az elektront fokozatosan eltávolítjuk abból a tartományból, amelyben a mag hatása alatt van. Zérus felett már folytonos spektrum van, ami felöleli a teljes pozitív félegyenest. E kontinuumban a hidrogénatom ioinizált állapotban van. A folytonos spektrumban szokásos értelemben vett stacionárius állapot nem létezik, ez annak a matematikai ténynek köszönhető, hogy a folytonos spektrum sajátfüggvényei nem normálhatók (azaz $\Psi \notin L^2(\mathbb{R})$). Az atomszínképekre mindig jellemző a (4.2)-höz hasonló sorozat, amely véges határértékhez tart, ahol az ionizált állapotok folytonos spektruma kezdődik. A (4.2) sajátértékek elfajultak, vagyis több lineárisan független sajátfüggvény tartozik hozzá. Az n-hez tartozó sajátértékek n^2-szeresen elfajulók, vagyis az E_n-hez tartozó sajátaltér dimenziója n^2. Más egymagos és egyelektoronos rendszer (pl. He^+ és Li^{2+}) spektruma szorosan összefügg a hidrogén spektrumával. A (4.1) egyenlet potenciális energiatagjának helyébe $-\frac{Ze}{r}$-et kell írni, az energiaszintek pedig a következők lesznek:

$$E_n^{(Z)} = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar n^2} \qquad n \in \mathbb{N}.$$

Több elektronos atom színképét nem lehet pontosan számolni. Ez a potenciális energia bonyolult alakja miatt van.

$$V(x,y,z) = \sum_{i=1}^{N} \frac{-e^2 Z}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} \frac{e^2}{\sqrt{(x_i-x_j)^2+(y_i-y_j)^2+(z_i-z_j)^2}} \tag{4.3}$$

Ha a potenciális energia második tagjának megfelelő elektronok kölcsön taszításából származó potenciális energia nem lenne, akkor az egyenletet meg lehetne oldani. Ekkor a Schrödinger-egyenlet

$$(\mathbf{H}_1 + \mathbf{H}_2 + \ldots + \mathbf{H}_N)\psi(x_1, y_1, z_1, \ldots, x_N, y_N, z_N) = E\psi$$

alakot öltené, ahol

$$\mathbf{H}_k = -\frac{\hbar}{2m}\left(\frac{\partial}{\partial x_k} + \frac{\partial}{\partial y_k} + \frac{\partial}{\partial z_k}\right) - \frac{Ze^2}{\sqrt{x_k^2+y_k^2+z_k^2}}.$$

A sajátértékek és a sajátfüggvények a megfelelő Schrödinger-egyenletek sajátértékeinek és sajátfüggvényeinek összegei, illetőleg a szorzatai lennének, azaz ha

$$\mathbf{H}_k\psi_{n_k,l_k,m_k}(x_k,y_k,z_k) = E_{n,k}\psi_{n_k,l_k,m_k}(x_k,y_k,z_k),$$

akkor

$$\psi(x_1,y_1,z_1,\ldots,x_N,y_N,z_N) = \psi_{n_1,l_1,m_1}(x_1,y_1,z_1)\cdots\psi_{n_N,l_N,m_N}(x_N,y_N,z_N) \tag{4.4}$$

$$E = E_{n,1} + E_{n,2} + \ldots + E_{n,N}. \tag{4.5}$$

Ennek belátása a

$$\mathbf{H}_k\psi_{n_k,l_k,m_k}(x,y,z) = E_{n_k}\psi_{n_k,l_k,m_k}(x,y,z) \qquad k = 1,\ldots,N \tag{4.6}$$

egyenletek felhasználásával történhet meg. Természetesen ez elég szerény közelítése a valódi Schrödinger-egyenletnek. Ennek ellenére szokás ehhez hasonló közelítésből kiindulni, és az elektronoknak az egymásra gyakorolt hatását "perturbációnak" tekinteni. Általában az egyes (4.2) igen sok sajátfüggvény tartozik, hiszen (4.4)-ben l_k és m_k számos olyan értéket vehet fel, amelynél az energia értéke változatlan marad. Továbbá az n_k főkvantumszámok sorozatát rögzítve az egyes elektronokat még permutálhatjuk is (a Pauli-elvet nem figyelmen kívül hagyja) 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 - pusztán elméleti alapon semmi egyéb nem mondható, mint szimmetriatulajdonságaik. Ezek a sajátfüggvényeknek az elektronok permutációi, a tiszta forgatások és inverziók során megnyilvánuló transzformációs sajátságaiban ötlenek testet. Ily módon minden szint három reprezentációnak felel meg: az egyik a szimmetrikus csoporté, a másik a tiszta forgatáscsoporté, a harmadik pedig az inverziók csoportjáé. Az n-elektron-rendszer minden energiaszintjének az n-edfokú szimmetrikus csoport egy reprezentációja felel meg. Minden ábrázolás azonban nem fordul elő. Páros számú elektronra a $D^{(0)}, ..., D^{(\frac{n}{2})}$, páratlan számú elektronra pedig $D^{(\frac{n-1}{2})}$ ábrázolásokhoz asszociált ábrázolások bukkannak fel. Ennek oka a Pauli-elvben és az elekronspinben keresendő. Az N elektronos rendszer színképeinek meghatározása az ún. építkezési elv segítségével történik, amely most bemutatásra kerül.

4.2.1. Építkezési elv

Tekintsünk két rendszert, melyek egy elektronból állnak és a két elektron ugyanazon mag körül kering. Az első energiája E és pályakvantumszáma l . Legyen e sajátértékhez tartozó $2l+1$ sajátfüggvény $\psi_{-l}, \ldots, \psi_l$. Ekkor

$$\mathbf{P}_R \psi_\mu = \sum_{\mu'} D^{(l)}(R)_{\mu'\mu} \psi_{\mu'}, \tag{4.7}$$

ahol $\mathbf{P}_R$ az első rendszer forgatása. Legyen a második rendszer energiája E, pályakvantumszáma l és sajátfüggvényei $\overline{\psi}_{-\bar{l}}, \ldots, \psi_{\bar{l}}$. Ekkor

$$\overline{\mathbf{P}}_R \overline{\psi}_\nu = \sum_{\nu'} D^{(\bar{l})}(R)_{\nu'\nu} \overline{\psi}_{\nu'}. \tag{4.8}$$

A két operátor különböző ugyanis $\mathbf{P}_R$ csak az első rendszer koordinátáit, $\overline{\mathbf{P}}_R$ pedig csak a második rendszer koordinátáit forgatja el. Ezért

$$[\mathbf{P}_R, \overline{\mathbf{P}}_R] = 0, \tag{4.9}$$

azaz a két operátorcsalád felcserélhető. A két rendszert egynek tekintve a sajátértékek és a sajátfüggvények az egyes rendszereknek megfelelő mennyiségeinek összegei, illetőleg szorzatai

lesznek. Az $E+\overline{E}$-hez tartozó $(2l+1)(2\bar{l}+1)$ sajátfüggvény:

$$\begin{array}{ccc} \psi_{-l}\overline{\psi}_{-\bar{l}}, & \ldots, & \psi_{-l}\overline{\psi}_{\bar{l}}, \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \psi_{l}\overline{\psi}_{-\bar{l}}, & \ldots, & \psi_{l}\overline{\psi}_{\bar{l}} \end{array}$$

Az összetett rendszer szimmetriacsoportja nem a $\mathbf{P}_R$ és $\mathbf{P}_Q$ operátorcsoportok teljes direkt szorzata lesz, hanem csak $\mathbf{P}_R\ \overline{\mathbf{P}}_R$ egyidejű forgatások direkt szorzata.

4.2.1. Állítás. *$P_R\overline{P}_R$ csoport*

A felcserélhetőségből azonnal következik, hogy ha $RQ=T$, akkor $\mathbf{P}_T\overline{\mathbf{P}}_T$ is csoportelem. Ezek alapján

$$\mathbf{P}_R\overline{\mathbf{P}}_R\psi_\mu\overline{\psi}_\nu = \mathbf{P}_R\psi_\mu\overline{\mathbf{P}}_R\overline{\psi}_\nu = \sum_{\nu'} D^{(l)}(R)_{\mu'\mu}\psi_{\mu'}\sum_{\nu'} D^{(l)}_{\nu'\nu}\overline{\psi}_{\nu'} = \tag{4.10}$$

$$= \sum_{\nu'\mu'} \Delta(R)_{\mu'\nu',\mu\nu}\psi_{\mu'}\overline{\psi}_{\nu'}, \tag{4.11}$$

ahol

$$\Delta(R) = D^{(l)}(R)\times D^{(\bar{l})}(R). \tag{4.12}$$

A $\Delta(R)$ ábrázolás karaktere pedig a a két ábrázolás karakterének szorzata. Belátható, hogy $D^{(l)}(R)\times D^{(\bar{l})}(R)$ ireducibilis összetevői a $D^{(L)}$-ek, ahol

$$L = |l-\bar{l}|, |l-\bar{l}|+1, \ldots, l+l'. \tag{4.13}$$

Megmutatható, hogy a $D^{(l)}\times D^{(\bar{l})}$ ábrázolás a

$$M(R) = \begin{bmatrix} D^{(|l-\bar{l}|)} & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & D^{(|l+\bar{l}|+1)} & \ldots & 0 & 0 \\ . & . & \ldots & . & . \\ . & . & \ldots & . & . \\ . & . & \ldots & . & . \\ 0 & 0 & \ldots D^{(l+\bar{l}-1)} & 0 & \\ 0 & 0 & \ldots & 0 & D^{(l+\bar{l})} \end{bmatrix} \tag{4.14}$$

ábrázolással ekvivalens, vagyis léteznie kell egy S mátrixnak, hogy

$$D^{(l)}(R)\times D^{(\bar{l})}(R) = S^{-1}M(R)S. \tag{4.15}$$

Mivel $M(R)$ és $D^{(l)}\times D^{(\bar{l})}(R)$ unitér, így feltehető, hogy S is az. Mivel $M(R)$ ábrázolás négy

indexszel jellemezhető és

$$M(R)_{L'm',Lm} = \delta_{LL'} D^{(L)}(R)_{m'm} \qquad L = |l - \bar{l}|, \ldots, l + \bar{l}, \ m = -L, \ldots, L, \tag{4.16}$$

ami alapján

$$D^{(l)}(R)_{\mu'\mu} D^{(\bar{l})}(R)_{\nu'\nu} = \sum_{m'm} \sum_{L} S^*_{Lm',\mu'\nu'} D^{(L)}(R)_{m'm} S^*_{Lm,\mu\nu}. \tag{4.17}$$

Az S mátrixnak az a jelentősége, hogy a ψ_μ, ψ_ν szorzatok olyan

$$\Psi_{m,L} = \sum_{\mu\nu} S^*_{Lm,\mu\nu} \psi_\mu \overline{\psi}_\nu \tag{4.18}$$

lineáris kombinációit határozza meg, amelyek a rendszert invariánsan hagyó $\mathbf{P}_R \overline{\mathbf{P}}_R$ operációk során irreducibilis ábrázolások szerint transzformálódnak, a következőképpen:

$$\begin{aligned}
\mathbf{P}_R \overline{\mathbf{P}}_R \Psi_{m,L} &= \sum S^*_{Lm,\nu\mu} \mathbf{P}_R \psi_\mu \overline{\mathbf{P}}_R \overline{\psi}_\nu = && (4.19)\\
&= \sum_{\mu\nu} \sum_{\mu'\nu'} S^*_{Lm,\mu\nu} D^{(l)}(R)_{\mu'\mu} D^{\bar{l}}(R)_{\nu'\nu} \psi_{\mu'} \overline{\psi}_{\nu'} = && (4.20)\\
&= \sum_{\mu\mu'} \sum_{\nu\nu'} \sum_{L'm'} S^*_{Lm,\mu\nu} D^{(l)}(R)_{\mu'\mu} D^{(\bar{l})}(R)_{\nu'\nu} S_{L'm',\mu'\nu'} \Psi_{m',L'} = && (4.21)\\
&= \sum_{L'm'} [S \cdot D^{(l)}(R) \times D^{(\bar{l})}(R) \cdot S^{-1}]_{L'm',Lm} \Psi_{m',L'} = && (4.22)\\
&= \sum_{L'm'} M(R)_{L'm',Lm} \Psi_{m',L'} = \sum_{m'} D^{(L)}(R)_{m'm} \Psi_{m',L}. && (4.23)
\end{aligned}$$

Ezek tehát a perturbált rendszer összetett rendszer első közelítésében sjátfüggvényként használhatók. Az S mátrix együtthatói pedig kiszámolhatók, ha $\mathbf{P}_R \overline{\mathbf{P}}_R$ operátort alkalmazzuk $\Psi_{m,L}$-re. A részletek megtalálhatók Wigner Jenő Csoportelméleti módszer a kvantummechanikában című művében. Ez az eljárás széleskörűen alkalmazott a spektroszkópiában.

4.3. A sajátfüggvények részleges meghatározása

További nagyon fontos és érdekes alkalmazása a dolgozat témájának a következő: Tegyük fel, hogy ismerjük a Hamilton-operátor szimmetriáit és vegyük az E sajátértékhez tartozó sajátalteret. Tegyük fel, hogy ismerjük a sajátfüggvényeket egy bizonyos tartományban. Ekkor a szimmetriák és a reprezentációk segítségével a sajátfüggvények értéke meghatározható a tartomány transzformáltjain is. Ebben a fejezetben erről ejtünk néhány szót. Tekintsük példaképpen azt az 1 dimenziós esetet, ahol a Hamilton-operátor invariáns csoportja a $x' = -x$ tükrözésből és az identikus transzformációból áll. Ekkor az azonos reprezentációhoz tartozó páros függvényekre

$$g(-x) = g(x), \tag{4.24}$$

a negatív reprezentációhoz tartozó függvényekre

$$f(-x) = -f(x) \tag{4.25}$$

teljesül. Általában a

$$\mathbf{P}_R \psi_k(x_1, x_2, \ldots, x_n) = \sum_k D(R)_{kj} \psi_j(x_1, \ldots, x_n) \tag{4.26}$$

összefüggésből és korábbi megfontolások alapján

$$\psi_j \circ R(x_1, \ldots, x_n) = \sum_l D(R)^*_{jl} \psi_l(x_1, \ldots, x_n). \tag{4.27}$$

Ha a hullámfüggvény argumentumának teljes tartománya olyan részekre osztható fel, amelyek mindegyike az egyik részből - a fundamentális tartományból - a csoport valamely transzformációjával állítható elő, akkor ψ_j kiszámolható a (4.27) képlet segítségével, feltéve, hogy a fundamentális tartományban ismerjük. A (4.27) egyenlet az $x_1, \ldots, x_n$ argumentumok sokaságának redukciójaként tekinthető; e redukció mértéke attól függ, hogy milyen hatású az a csoport, amellyel szemben a Schrödinger-egyenlet invariáns. Ez az összefüggés explicit formában mutatja a ψ_j transzformációs tulajdonságait is, így ψ_j invarianciatulajdonságaiból következő valamennyi állításnak (4.27)-ból levezethetőnek kell lennie. Tekintsük például egy páratlan és páros függvény skaláris szorzatát:

$$\int_{\mathbb{R}} g(x)^* f(x) \, \mathrm{d}x. \tag{4.28}$$

Bontsuk fel az integrációs tartományt, $\mathbb{R}$-et, $(-\infty, 0)$ és $(0, \infty)$ intervallumokra. Ekkor

$$\int_{\mathbb{R}} g(x)^* f(x) \, \mathrm{d}x = \int_{(-\infty,0)} g(x)^* f(x) \, \mathrm{d}x + \int_{(0,\infty)} g(x)^* f(x) \, \mathrm{d}x. \tag{4.29}$$

Bevezetve az $y = -x$ helyettesítést:

$$-\int_{(0,\infty)} g(x) \, * f(x) \, \mathrm{d}x + \int_{(0,\infty)} g(x)^* f(x) \, \mathrm{d}x = 0 \tag{4.30}$$

Így megkaptuk, hogy a két függvény ortogonális egymásra, vagyis két különböző irreducibilis ortogonális egymásra. A (4.27) egyenlet szolgáltatja a ψ_j hullámfüggvényt mindazon helyeken, amelyek $P = (x_1, y_1, z_1, \ldots, x_n, y_n, z_n)$ pontból a csoporttranszformációk által adódnak. ψ_j értéke e helyeken ψ_j-nek és a többi ψ_k partnerfüggvénynek a P pontban felvett értékeivel fejeződik ki. A forgáscsoport esetében a konfigurációs tér ama pontjai ezek, amelyekben a részecskék relatív helyzete, vagyis az atom geometriai alakja megegyeznek. A konfigurációs tér pontjait a háromdimenziós tér középpontjából kiinduló n-lábbal reprezentálhatjuk. 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 ismerjük is azt. Az egymásból elforgatással adódó helyzetek az n-láb ugyan-

olyan alakjának, de különböző orientációjának felelnek meg. A fundamentális tartományt úgy választhatjuk 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 $D^l(\{\alpha, \beta, \gamma\})$ reprezentációhoz tartozó $2l+1$ számú $\psi_{-l}, \ldots, \psi_l$ hullámfüggvény értéke $a_j, j = -l, \ldots, l$ a fundamentális tartományban (vagyis $\psi_j(0, 0, z_1, x_2, 0, z_2, \ldots, x_n, y_n, z_n)$, $j = -l, \ldots, l$) a részecskék elrendeződésének geometriai alakjától függ, akkor az olyan $R(x_1, y_1, z_1, \ldots, x_n, y_n, z_n)$ pontokban, amelyek a $(0, 0, z_1, x_2, 0, z_2, \ldots, x_n, y_n, z_n)$ pontból a $(\pi - \alpha, \beta, -\pi - \gamma)$ forgatással adódnak, (4.27) szerint

$$\psi_l \circ R(\alpha, \beta, \gamma)^{-1}(x_1, \ldots, z_n) = \sum_{j=-l}^{l} D^{(l)}(\{\pi - \alpha, \beta, -\pi - \gamma\})^*_{lj} a_j(g) = \tag{4.31}$$

$$= \sum_{j=-l}^{l} (-1)^{l-j} D^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{lj} a_j(g). \tag{4.32}$$

4.3.1. Megjegyzés. *A*

$$D^{(l)}(\{\pi - \alpha, \beta, -\pi - \gamma\})^*_{jk} = (-1)^{j-k} D^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{jk}$$

összefüggés a

$$D^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{jk} = e^{ij\alpha} d^{(l)}(\beta)_{jk} e^{ik\gamma}$$

összefüggésnek és $d^{(l)}(\beta)_{jk}$ valós voltának következménye.

E kifejezésben α és β definíció szerint az első elektron azimut- és polárszöge, γ pedig a Z tengely és az első elektron által meghatározott síknak az origó és az első két elektron síkjával bezárt szöge. a_j pedig csak az n-láb geometriai alakjától függ. $l = 0$ esetén (s szintek)

$$\psi \circ R(x_1, y_1, z_1, \ldots, x_n, y_n, z_n) = a_0(g). \tag{4.33}$$

Ebben az esetben a hullámfüggvény csak az n-láb alakjától függ, annak térbeli orientációjától nem; azaz az s állapotok gömbszimmetrikusak. Ez azzal magyarázható, hogy az s állapotban egyetlen hullámfüggvény van, s ez nem elegendő irány kijelöléséhez. Magasabb mellékkvantumszám esetén a sajátfüggvények teljes rendszerére minden irány egyenértékű, azonban egyetlen sajátfüggvény sem választható ki úgy, hogy valamilyen irányt ki ne tüntetnénk, így az egyes sajátfüggvények külön-külön már nem gömbszimmetrikusak. Merev test esetén a g geometria rögzített, azaz a_j-k állandók. Ez esetben a sajátfüggvények csak α, β, γ függvényei és (4.31) teljesen meghatározza őket. A legegyszerűbb merev test a vékony rúd, amely középpontja körül mozoghat (merev rotátor), melynek Schrödinger-egyenlete:

$$-\frac{\hbar}{2I}\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\psi_{n,l,m}(\vartheta,\varphi) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\psi_{n,l,m}(\vartheta,\varphi)\right] = E_n\psi_{n,l,m}(\vartheta,\varphi), \tag{4.34}$$

ahol I a tehetetlenségi nyomaték, ϑ és φ pedig a rotátor polár- és azimutszöge. Fundamentális tartománynak most válasszuk a $\vartheta = 0$ pontot, ez a rotátor "normális helyzete". A sajátfüggvé-

nyek értékeit ebben a pontba a_j^{nl}-lel jelöljük. Ekkor

$$\psi_{n,l,m}(\vartheta,\varphi) = \sum_j (-1)^{m-l} D^{(l)}(\{\alpha,\beta,\gamma\})_{ml}\ a_j^{nl}. \tag{4.35}$$

Viszont, mivel a rotátor γ tetszőleges értéke mellett ugyanabban a helyzetben van, így $\psi_{n,l,m}$ nem függhet γ-tól. Ezek alapján $a_j^{nl} = 0$ ha $j \neq 0$, s így

$$\psi_{n,l,m}(\vartheta,\varphi) = (-1)^m e^{im\varphi} d^{(l)}(\vartheta)_{m0}\ a_0^{nl} = \tag{4.36}$$

$$= (-1)^m D^{(l)}(\{\varphi,\vartheta,0\})_{m0}\ a_0^{nl}. \tag{4.37}$$

Ez az egyenlet a reprezentációs együtthatók segítségével jellemzi a sajátfüggvényeket. Az is látszik az egyenletből, hogy ha $l = m$, akkor a különböző n-ekhez tartozó sajátfüggvények egy konstans szorzóban térnek el. Mivel különböző sajátértékek esetében ez nem lehetséges, így minden egyes l értékhez csak egyetlen sajátérték tartozhat. Így az n index elhagyható. A merev rotátor Schrödinger-egyenlete az l-edfokú gömbharmonikusokat szolgáltatja. A (4.36) egyenlet szerint $D^{(l)}(\{\varphi,\vartheta,\gamma\})_{m0}$ az $Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$ gömbharmonikussal egyezik meg, eltekintve a normálástól és a $(-1)^m$ tényezőtől. A (4.31) egyenlet azt állítja, hogy a H-atom Schrödinger-egyenletének megoldásainak alakja:

$$\psi_{n,l,m} = \sum_{l'} (-1)^{m-l'} D^{(l)}(\{\alpha,\beta,\gamma\})_{ml'} a_{l'}^{nl}(r), \tag{4.38}$$

ahol $a_{l'}^{nl}(r)$ most csak r-nek függvénye, mivel most az n-láb csak egyetlen pálcává fajul el, melynek geometriai alakját r hossza teljesen meghatározza.

$$\psi_{n,l,m}(r,\vartheta,\varphi) = (-1)^m D^{(l)}(\{\varphi,\vartheta,0\})_{m0} a_0^{nl}(r) \tag{4.39}$$

$$\propto Y_{lm}(\vartheta,\varphi) a_0^{nl}(r). \tag{4.40}$$

Látható, hogy ezek valóban a H-atom sajátfüggvényei. Az is látható, hogy $\psi_{n,l,m}$ valóban $D^{(l)}$ m-edik sorához tartozik, ahogy annak az m mágneses és az l pályakvantumszámú sajátfüggvény esetében lennie is kell. E módszer teljesítőképességére a legegyszerűbben a kvantummcehanikai merev pörgettyű esetében világíthatunk rá. Tekintsük először az aszimmetrikus pörgettyűt. Ennek helyzetét ama forgatás három α,β,γ Euler-szöge jellemzi, amelyik a normálisból a kérdéses helyzetbe hozza a pörgettyűt. A hullámfüggvény csak e három szögtől függ.

$$\psi_{n,l,m}(\alpha,\beta,\gamma) = \sum_{l'} (-1)^{m-l'} D(l)(\{\alpha,\beta,\gamma\})_{ml'} a_{l'}^{nl} = \tag{4.41}$$

$$= \sum_{l'} (-1)^{m-l'} e^{im\alpha} d^{(l)}(\beta)_{ml'} e^{il'\gamma} a_{l'}^{nl}. \tag{4.42}$$

Az a-k ismét állandók, mert a merev test geometriai alakja rögzített. Ezek csakúgy, mint az E_{nl} sajátértékek meghatározhatók, ha (**??**)-at a Schrödinger-egyenletbe helyettesítjük. Így $2l+1$ lineáris homogén egyenletet kapunk $a_{-l'}^{nl}, \ldots, a_{l'}^{nl}$ számokra. Tekintsünk most egy olyan pörgettyűt, amelynek két kisebbik tehetetlenségi nyomatéka egyenlő. Ekkor a pörgettyű "normális helyzete"

nincs egyértelműen meghatározva, mivel egy forgatás a Z tengely körül tetszőleges lehet. Ennek a következménye, hogy ha γ-t $(\gamma+\gamma_0)$-val helyettesítünk, akkor a sajátfüggvénye sajátfüggvény marad. Ezenfelül az ilyen függvényeknek az

$$\int_0^{2\pi} \psi_{n,l,m}(\alpha,\beta,\gamma+\gamma_0)e^{-i\nu\gamma_0}d\gamma_0 \tag{4.43}$$

$$= \sum_{l'} (-1)^{m-l'} a_{l'}^{nl} e^{im\alpha} d^{(l)}(\beta)_{ml'} e^{il'\gamma} \int e^{i\gamma_0(l'-\mu)} d\gamma_0 = \tag{4.44}$$

$$= const \cdot (-1)^{m-\nu} a_\nu^{nl} D^{(l)}(\{\alpha,\beta,\gamma\})_{m\nu} \tag{4.45}$$

lineáris kombinációja is sajátfüggvény. Ha a_ν^{nl} nem zérus, akkor

$$\psi_{n,l,m}(\alpha,\beta,\gamma) = (-1)^{m-\nu} D^{(1)}(\{\alpha,\beta,\gamma\})_{m\nu} \quad \nu = -l,\ldots,l \tag{4.46}$$

A tükörszimmetriák figyelembe vételekor 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 (4.46) sajátfüggvények maradnak, ha $\{\alpha,\beta,\gamma\}$ helyére $\{\alpha,\beta,\gamma\}R$ kerül, ahol R tetszőleges forgatás. Így

$$(-1)^{m-\nu} D^{(l)}(\{\alpha,\beta,\gamma\})_{m\nu} = \sum_k (-1)^{m-\nu} D^{(l)}(\{\alpha,\beta,\gamma\})_{mk} D^{(l)}(R)_{k\nu} \tag{4.47}$$

továbbá

$$\int \sum (-1)^{m-\nu} D^{(l)}(\{\alpha,\beta,\gamma\})_{mk} D^{(l)}(R)_{k\nu} D^{(l)}(R)^*_{l\nu} dR = \tag{4.48}$$

$$= const \cdot (-1)^{m-l'} D^{(l)}(\{\alpha,\beta,\gamma\})_{ml'} \tag{4.49}$$

mindketten ugyanahhoz a sajátértékhez tartoznak, mint $(-1)^{m-l'} D^{(l)}(\{\alpha,\beta,\gamma\})_{ml'}$. Ezért ebben az esetben az összes $E_{-l,l},\ldots,E_{l,l}$ sajátérték egybeesik, minden pályakvantumszámhoz egyetlen $(2l+1)^2$ egyszeresen elfajult sajátérték tartozik. Ha tehát legalább két tehetetlenségi nyomaték egyenlő, akkor (4.43) szolgáltatja a sajátfüggvényeket. Egytest-problémában a hullámfüggvény tükrözési jellegét annak szögfüggése határozza meg. "Egyláb" esetén a $\mathbf{P}_I$ tükrözés abból áll, hogy φ-t $(\varphi+\pi)$-vel, ϑ-t $(\vartheta-\pi)$-vel helyettesítjük, a "láb" hossza r eközben változatlan marad.

$$\mathbf{P}_I \psi_{n,l,m}(r,\vartheta,\varphi) = (-1)^m e^{im(\varphi\pm\pi)} d^{(l)}(\pi-\vartheta)_{m0} a^{nl}(r) = \tag{4.50}$$

$$= e^{im\varphi}(-1)^{l'-m} d^{(l)}(\vartheta)_{m0} a^{nl}(r) = (-1)^{l'} \psi_{n,l,m}(r,\vartheta,\varphi). \tag{4.51}$$

Két független részecskénél

$$\psi_{n,l} = \sum_{l'} (-1)^{m-l'} D^{(l)}(\{\alpha,\beta,\gamma\})_{ml'} a_l(r_1,r_2,\epsilon), \tag{4.52}$$

mert az elrendezést a kétláb geometriája szabja meg, ez viszont a kétláb r_1, r_2 hosszával és az általuk bezárt ϵ szöggel jellemezhető. Tükrözéskor csupán a kétláb helyzete változik meg,

geometriai alakja nem. Ha tükrözünk, akkor α, β, γ átmegy $\alpha \pm \pi, \pi - \beta, \pi - \gamma$-ba, ezért

$$\mathbf{P}_I \psi_{n,l} = \sum_{l'} (-1)^{n-l'} D^{(l)}(\{\alpha \pm \pi, \pi - \beta, \pi - \gamma\})_{ml'} a_{l'} = \tag{4.53}$$

$$= \sum_{l'} (-1)^{n-l'} D^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{m,-l'} (-1)^{l+l'} a_{l'}. \tag{4.54}$$

Így hát a páros szintekre érvényes $\mathbf{P}_I \psi_n = \psi_n$-ből következik, hogy

$$a_{-l'}(r_1, r_2, \epsilon) = (-1)^{l+l'} a_{l'}(r_1, r_2, \epsilon), \tag{4.55}$$

míg páratlan szinteknél, amikor $\mathbf{P}_I \psi_m = -\psi_m I$,

$$a_{-l'}(r_1, r_2, \epsilon) = (-1)^{l+l'} a_{l'}(r_1, r_2, \epsilon). \tag{4.56}$$

Köszönetnyílvánítás

Elsősorban konzulensemnek, Dr. Hermann Péterneknek szeretnék köszönetet mondani útmutatásáért és segítségéért. Szeretnék még köszönetet mondani szüleimnek támogatásukért és türelmükért, valamint Matolcsi Tamásnak hasznos megjegyzéseiért.

Irodalomjegyzék

[1] Wigner Jenő; "Csoportelméleti módszer a kvantummechanikában", 1959

[2] Gerald Teschl; "Mathematical Methods in Quantum Mechanics" , 2009

[3] A.O. Barut, R. Raczka; "Theory of groups representations and applications", 1980

[4] Geszti Tamás; "Kvantummechanika" 2007

[5] Klaus-Jochen Engel, Rainer Nagel; "A short course on Operator Semigroups", 2006

[6] Budó-Mátrai; "Kísérleti fizika III.",pp. 400-423, 1977

[7] Hermann Weyl; "The Theory of Groups and Quantum Mechanics"

[8] D.H. Sattinger, O.L. Weaver; "Lie Groups and Algebras with Applications to Physics, Geometry and Mechanics"

[9] Daniel Bump; "Lie groups"

[10] L. Fonda, G.C. Ghirardi; "Symmetry Principles in Quantum Physics", 1970

[11] Andrew Baker; "Matrix Groups: An introduction to Lie Group Theory", 2002

[12] Török Ferenc, Pulay Péter; "Elméleti kémia I. jegyzet", 1979

[13] George W. Mackey; "Unitary Group Representation in Physics, Probability, and Number Theory", 1978

[14] Brian C. Hall; "Lie Groups, Lie Algebras, and Representations", 2003

[15] George W. Bluman, Sukeyuki Kumei; "Symmetries and Differential Equations", 1989

[16] Hermann Weyl; "The Classical Groups, Their Invariants and Representations", 1939