A HIDROGÉN ÉS HÉLIUM SPEKTRUMÁNAK KAPCSOLATA AZ O_4 CSOPORT BIZONYOS ELŐÁLLITÁSAIVAL

Doktori disszertáció

Benedict Mihály

Szegedi József Attila Tudományegyetem

Természettudományi Kar Elméleti Fizikai Tanszék

Szeged

1973

BEVEZETÉS

A csoportelméleti módszerek alkalmazása a fizikában különösen az elemi részek vizsgálata során került ismét előtérbe. Ez a nézőpont azonban majdnem egyidős a kvantummechanikával és az atomok, illetve molekulák szerkezetének vizsgálatánál is gyümölcsözően alkalmazható. Dolgozatunkban mi is egy ilyen alkalmazási módszert tárgyalunk.

1935-ben ismerte fel Fock /1/, hogy a hidrogénatom Hamilton operátora a háromdimenziós gömbszimmetriánál magasabb szimmetriával rendelkezik, a Schrödinger egyenleten végrehajtott transzformáció segitségével ezt a szimmetriát nyilvánvalóvá lehet tenni. A Hamilton operátor kötött állapotok esetén a négydimenziós forgatásokkal szemben invariáns. Ezek a forgatások csoportot alkotnak, az csoportot. Azóta sokan foglalkoztak ezzel a kérdéssel, tovább is fejlesztették Fock gondolatait, Magyarországon Györgyi Géza /2,3/ s a külföldi irodalomból is megemlithetjük Bander és Itzykson összefoglalóját /4/.

Mi mindenekelőtt az csoport előállitásainak és a hidrogén energiaszintjeinek kapcsolatát vizsgáljuk. A csoportelméleti és kvantummechanikai alapokat ismertnek tételezzük fel, s igy tárgyalásunkat az előállitás fogalmával kezdjük. Ezután Mackey /5,6/ és Vilenkin /7/ nyomán foglalkozunk a transzformációcsoportok tulajdonságaival és előállitásaival. A hidrogénatom és az O_4 csoport kapcsolatának tárgyalásakor mi elsősorban azt emeljük ki, hogy az

O_4 csoportnak nem minden irreducibilis előállitásához tartozik energiaszint, hanem csak azokhoz, melyek részelőállitásai az állapotfüggvények terében elért bizonyos előállitásnak. Az /1,2,4/ munkák lényegében mind rámutattak arra, hogy O_4 irreducibilis előállitásainak bázisát az állapottérben a négyváltozós homogén harmonikus polinomok alkotják. Ezt az ismert tényt mi a Vilenkin könyvében /7/ található általánosabb bizonyitás egyszerüsitésével mutatjuk meg. Ezután a korábbi eredmények felhasználásával kimutatjuk, hogy a héliumatom Hamilton operátora közelitőleg $O_4 \otimes O_4 \otimes S_2$ szimmetriát mutat és ennek alapján kvalitative leszármaztatjuk a héliumatom spektrumát.

1. A csoportreprezentáció fogalma és főbb tulajdonságai

A csoportelmélet fizikai alkalmazásainak szempontjából alapvető fontosságu a csoport előállitásának fogalma. A G csoport minden g eleméhez rendeljük hozzá a $\mathcal{H}$ Hilbert-tér egy $T(g)$ lineáris transzformációját: $g \longrightarrow T(g)$. Ha teljesülnek a

$$T(g_1)\,T(g_2) = T(g_1 g_2)$$

és

$$T(e) = I$$

egyenlőségek, ahol e a csoport egységeleme, I a Hilbert-tér egységoperátora, akkor a $g \longrightarrow T(g)$ hozzárendelést a csoport előállitásának vagy reprezentációjának nevezzük. Attól függően, hogy a $\mathcal{H}$ tér véges vagy végtelen dimenziós az előállitást is véges illetve végtelen dimenziós előállitásnak nevezzük.

A $\mathcal{H}$ tér égy $\mathcal{H}_1$ alterét a $T(g)$ előállitásra nézve invariánsnak mondjuk, ha $\psi \in \mathcal{H}_1$ -ből következik, hogy $T(g)\psi \in \mathcal{H}_1$, minden $g \in G$ -re. Minden $T(g)$ előállitásnak van két triviális invariáns altere: a teljes tér és a nullvektor. Ha a $T(g)$ előállitásnak csak triviális invariáns alterei vannak, akkor az előállitás irreducibilis, ellenkező esetben reducibilis.

A $T(g)$ reducibilis előállitást tekinthetjük csupán abban a $\mathcal{H}_1$ altérben is amelyet invariánsan hagy. Jelöljük a $\mathcal{H}_1$ -en igy értelmezett előállitást $T_1(g)$ -vel. Ha $T(g)$ $\mathcal{H}_1$ -nek $\mathcal{H}$ -ra nézve ortogonális komplementerére, $\mathcal{H}_2$ -re nézve is invariáns akkor $T(g)$ -t szétesőnek vagy teljesen reducibilisnek nevezzük. Ekkor irhatjuk, hogy $T = T_1 \oplus T_2$ ahol T_1 $\mathcal{H}_1$ -ben T_2 $\mathcal{H}_2$-ben hat. Amennyiben T_1 vagy T_2 ismét széteső ez az eljárás tovább folytatható, és igy tetszőleges számu előállitás direkt összegét értelmezhetjük.

Felmerül az a kérdés, melyek azok a csoportok, amelyek reducibilis előállitásai szétesők. Mi a következőkben csak olyan csoportokkal foglalkozunk melyek vagy végesek, vagy végtelen sok véges mátrix alkotja a csoportot. Véges csoport reducibilis előállitása széteső is, a végtelen mátrixcsoportok közül pedig az u.n. kompakt mátrixcsoportok rendelkeznek ezzel a tulajdonsággal. A kompaktság definiciójához bevezetjük a mátrixsorozat konvergenciájának fogalmát. A $g^{(1)} \dots g^{(n)} \dots$ mátrixok sorozata a g mátrixhoz tart, ha minden i -re j -re $\lim_{n \to \infty} g_{ij}^{(n)} = g_{ij}$. A mátrixcsoportot kompaktnak nevezzük ha bármely $g^{(n)} \in G$ sorozatból kiválasztható konvergens részsorozat. A kompaktság szükséges és elegendő feltétele, hogy

1. a g mátrixok elemei közös korlát alatt maradjanak
2. a g mátrixok a konvergenciára nézve zárt halmazt alkossanak.

Érvényes a következő igen fontos tétel, a nevezetes Peter-Weyl tétel /7/: Kompakt csoport bármely végtelen dimenziós előállitása szétesik végtelen sok véges dimenziós irreducibilis előállitás direkt összegére.

Az a felbontás az ekvivalencia erejéig egyértelmü is. A $\mathcal{H}_1$ téren értelmezett $T(g)$ és a $\mathcal{H}_2$-n értelmezett $Q(g)$ előállitásokat ekvivalensnek mondjuk, ha létezik a $\mathcal{H}_1$-nek a $\mathcal{H}_2$-re egy invertálható A leképezése és $Q(g) = AT(g)A^{-1}$ $\mathcal{H}_1$ és $\mathcal{H}_2$ természetesen egybe is eshet. A következőkben nem teszünk különbséget az ekvivalens előállitások között.

Bizonyitható az is, hogy kompakt csoport inekvivalens irreducibilis előállitásainak terei ortogonálisak /7/.

Nyilvánvalóan fontos kérdés az, hogy egy előállitás irreducibilis-e. Ennek eldöntéséhez hasznos az infinitezimális operátor fogalma. Általában a csoport infinitezimális generátorát szokás definiálni, mi az <u>előállitás</u> infinitezimális operátorának hasonló fogalmát vezetjük be.

Ha minden t valós számhoz hozzárendelhető a G csoport egy $g(t)$ eleme és teljesül a $g(t_1)g(t_2) = g(t_1+t_2)$ egyenlőség akkor a $g(t)$ elemek halmazát az összes t-re G egy egyparaméteres alcsoportjának nevezzük. A fenti egyenlőségből látható, hogy $g(0) = e$ és $g(-t) = g^{-1}(t)$

Ha a $T(g(t))$ operátoraink unitérek akkor előállithatók $T(g(t)) = e^{At}$ alakban. Az A operátor a $T(g)$ előállitásnak a $g(t)$ egyparaméteres alcsoporthoz tartozó infinitezimális operátora. Az exponenciális operátort a $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(tA)^n}{n!}$ sorral értelmezzük, $T(g(t))$ ismeretében A-t megkaphatjuk a következő módon

$$A = \lim_{t \to 0} \frac{T(g(t)) - I}{t} = \frac{dT(g(t))}{dt}\Big|_{t=0}$$

Ha minden csoportelem előállitható egyparaméteres alcsoportokba tartozó elemek szorzataként, akkor a $T(g)$ előállitást egyértelmüen meghatározzák az infinitezimális operátorok. Például forgáscsoport esetén az egyes koordinátasikokban történő forgatások alkothatják az egyparaméteres alcsoportokat.

Az infinitezimális operátorok azért fontosak mivel ha egy altér a $T(g)$ előállitással szemben invariáns akkor az A infinitezimális operátorral szemben is az. Ezért a $T(g)$ előállitás illetve a megfelelő tér irreducibilitásának kimutatásához elég bebizonyitani, hogy nem létezik a kérdéses térnek a $T(g)$ egyetlen A infinitezimális operátorával szemben sem a triviálistól különböző invariáns altere.

A későbbiekben szükségünk lesz a csoportok illetve az előállitások direkt szorzatának fogalmára. Két csoport G_1 és G_2 direkt szorzatán a $\{g_1, g_2\}$ párok összességét értjük, $g_1 \in G_1$, $g_2 \in G_2$. A csoportmüvelet definiciója

$$\{g_1 g_2\}\{h_1, h_2\} = \{g_1 h_1, g_2 h_2\} \quad ; \quad g_1 h_1 \in G_1 \quad g_2, h_2 \in G_2$$

Legyen $T_1(g_1)$ a G_1, $T_2(g_2)$ a G_2 csoport egy előállitása a $\mathcal{H}_1$ illetve a $\mathcal{H}_2$ téren, ekkor értelmezhetjük a $G_1 \otimes G_2$ direktszorzat csoport $T_1(g_1) \otimes T_2(g_2)$ előállitását a direktszorzat térben a következő módon:

$$\left(T_1(g_1) \otimes T_2(g_2)\right)(\varphi_1 \otimes \varphi_2) = T_1(g_1)\varphi_1 \otimes T_2(g_2)\varphi_2$$

ahol $\varphi_1 \in \mathcal{H}_1$, $\varphi_2 \in \mathcal{H}_2$. Egyszerüen látható,hogy $T_1(g_1) \otimes T_2(g_2)$ valóban rendelkezik az előállitás tulajdonságaival. Az is bizonyitható, hogy $T_1 \otimes T_2$ akkor és csak akkor irreducibilis ha T_1 és T_2 irreducibilisek, továbbá, hogy ha G_1 és G_2 közül legalább az egyik kompakt akkor $G_1 \otimes G_2$ minden irreducibilise egyértelmüen $T_1(g_1) \otimes T_2(g_2)$ alakba irható. Az előállitások direkt szorzata, mint az a definicióból egyszerüen következik, asszociativ és a direkt összegre nézve disztributiv. Tehát:

$$T_1(g_1) \otimes T_2(g_2) = T_2(g_2) \otimes T_1(g_1)$$

$$(Q_1(g_1) \oplus Q_2(g_1)) \otimes T(g_2) = Q_1(g_1) \otimes T(g_2) \oplus Q_2(g_1) \otimes T(g_2)$$

2. Transzformáció csoportok

Egy kvantummechanikai rendszer leirásához használt Hilbert-tér elemei többnyire valamilyen M alaphalmazon értelmezett négyzetesen integrálható függvények. Ha az M halmaz valamilyen transzformációja esetén a rendszer tulajdonságai változatlanok maradnak akkor a rendszert a transzformációra nézve szimmetrikusnak nevezzük. Az összes ilyen szimmetriatranszformációk csoportot alkotnak. A kvantummechanikai rendszer vizsgálatát általában egyszerüsiti a rendszer szimmetriáinak ismerete.

Vezessük be tehát az M halmazon a g transzformációk egy G csoportját. Jelöljük gx -el M -nek azt az elemét melyet a g transzformáció az x elemhez rendel;
Ekkor

$$ex = x \quad , \quad (g_1 g_2)x = g_1(g_2 x)$$

Ha M tetszőleges x és y elemeihez létezik olyan $g \in G$ hogy $gx = y$ akkor G -t az M halmaz <u>tranzitiv</u> csoportjának nevezzük, M-et pedig g-re nézve <u>homogén térnek</u>. Például, ha M az euklideszi tér G pedig ennek forgáscsoportja, akkor G nem tranzitiv, ha viszont M az euklideszi tér egységgömbje akkor G tranzitiv.

Legyen G tranzitiv és x_0 az M tér egy fix eleme. Tekintsük azokat a h elemeket G -ből melyek az x_0 pontot önmagába viszik át: $hx_0 = x_0$. Ekkor $h^{-1}x_0 = x_0$ és $h_1 x_0 = x_0$ $h_2 x_0 = x_0$ -ból következik, hogy $h_1 h_2 x_0 = x_0$ Látható, hogy a h elemek G egy H alcsoportját alkotják, az x_0 pont **stacionárius** alcsoportját.

Ha $gx_0 = x$, akkor minden további g_1 melyre $g_1x_0 = x$ $g_1 = gh$ alakba irható, ahol $h \in H$. Tehát az x_0 pontot az x -be átvivő transzformációk a gH baloldali mellékosztályt alkotják. Mivel a G csoport tranzitiv, az M halmaz x pontjai és a G csoport H szerinti baloldali mellékosztályai között kölcsönösen egyértelmü megfeleltetést állapitottunk meg. Ha x -nek a gH baloldali mellékosztály felel meg, akkor $g'x$ -nek $g'gH$.

Az M halmaz még nem határozza meg egyértelmüen a stacionárius alcsoportot, az függ az x_0 pont választásától is. Legyen H az x_0 stacionárius alcsoportja és legyen $gx_0 = y_0$ ekkor a gHg^{-1} alaku transzformációk és csak ezek viszik önmagába y_0 -t. A gHg^{-1} ugyancsak alcsoportja G -nek, ez az y_0 -hoz tartozó stacionárius alcsoport, tehát az M homogén térnek G egymáshoz konjungált alcsoportjainak osztálya felel meg. Mivel G tranzitiv, az összes stacionárius alcsoportok egymás konjugáltjai.

Igy a G tranzitiv csoport M homogén terének megfelel G konjugált alcsoportjainak egy osztálya.

A fenti meggondolás megfordítható: G minden H alcsoportjának, pontosabban az egymáshoz konjugált H alcsoportok osztályának megfelel valamilyen homogén tér. Válasszunk ki az osztályból egy H alcsoportot és jelöljük M -mel a H szerinti baloldali mellékosztályok halmazát. Minden

$g' \in G$ -nek megfeleltetünk egy transzformációt M -ben, amely a gH mellékosztályt a $g'gH$ -ba viszi át. Ekkor a G csoport tranzitiv csoportja lesz M -nek H pedig az $eH=H$ mellékosztály stacionárius alcsoportja. Szokásos a következő jelölés: $M = G/H$ /nem faktorcsoport!/

Tekintsük a következő példát, mely igen fontos lesz számunkra a következőkben: az O_4 csoport, mely a négydimenziós tér ortogonális transzformációinak csoportja, a négydimenziós egységgömb, S^3 tranzitiv csoportja. Válasszuk ki a gömb északi pólusát: a $(0,0,0,1)$ pontot. Ennek a pontnak stacionárius alcsoportja az O_3. Ezért $S^3 = O_4/O_3$, vagyis a négydimenziós egységgömb azonositható O_4-nek O_3 szerinti baloldali mellékosztályai halmazával.

3. A csoportelőállitások és a kvantummechanika kapcsolata

Legyen a fizikai rendszer állapottere valamilyen M alaphalmazon értelmezett négyzetesen integrálható függvények tere. Jelöljük ezeket $\psi(x)$ -el. Az M tér G transzformációcsoportjának minden g eleméhez rendeljük hozzá a Hilbert-tér $\psi(x)$ elemeinek egy $T(g)$ transzformációját:

$$\psi(x) \longrightarrow \psi(g^{-1}x) = T(g)\psi(x)$$

Ez a hozzárendelés rendelkezik az előállitás tulajdonságaival:

$$T(g)T(h)\psi(x) = T(g)\psi(h^{-1}x) = \psi(h^{-1}g^{-1}x) = \psi((gh)^{-1}x) = T(gh)\psi(x)$$

$$T(e)\psi(x) = \psi(x)$$

Ezt az előállitást kvázireguláris előállitásnak szokás nevezni. Ha az M tér maga a G csoport akkor ez átmegy a reguláris előállitásba. Ha a G csoport elemei az x vektorok M terének térfogatelemének nagyságát invariánsan hagyják, akkor a $T(g)$ előállitás unitér a Hilbert-téren a szokásos módon integrállal értelmezett belső szorzatra nézve. Ez a helyzet az euklideszi tér forgáscsoportja esetében. Ekkor $T^{+}(g) = T^{-1}(g) = T(g^{-1})$

Legyen a fizikai rendszer Hamilton operátora a $\psi(x)$ függvényeken értelmezett $H(x)$ operátor, a G csoportot pedig válasszuk meg ugy, hogy $H(gx) = H(x)$ fennálljon minden $g\in G$ -re. Ezt a csoportot a Hamilton operátor szimmetriacsoportjának nevezzük. Természetesen más operátorok szimmetriacsoportját is be lehet vezetni, mivel azonban egy rendszer vizsgálatánál általában a lehetséges energiaértékek jelentik a legfőbb információt, többnyire a Hamilton operátor szimmetriáit szokás vizsgálni.

A csoportelőállitások elmélete azért igen jelentős a kvantummechanikában, mivel egy operátor szimmetriacsoportja rendelkezik azzal a tulajdonsággal, hogy kvázireguláris előállitásának minden eleme felcserélhető az operátorral.

$$T(g)H(x)\psi(x) = H(g^{-1}x)\psi(g^{-1}x) = H(x)\psi(g^{-1}x) = H(x)\,T(g)\,\psi(x)$$

Tehát $T(g)H(x) = H(x)T(g)$ és emiatt a H operátor spektruma és a $T(g)$ irreducibilis összetevői között szoros kapcsolat áll fenn. Tegyük fel a továbbiakban, hogy H -nak tiszta pontspektruma van és a G csoport kompakt. Bontsuk fel a $T(g)$ előállitást irreducibilis előállitások direkt összegére. Legyenek $E_1, E_2 \ldots$ H sajátértékei. Ha φ az E_i -hez tartozó sajátfüggvény, akkor $HT(g)\varphi = T(g)H\varphi = E_i T(g)\varphi$ miatt $T(g)\varphi$ is az E_i -hez tartozó sajátfüggvény. Jelöljük az E_i -hez tartozó sajátalteret $\mathcal{H}_{E_i}$ -vel, látható, hogy $T(g)$ nem vezet ki $\mathcal{H}_{E_i}$ -ből. Ebből következik, hogy a $\mathcal{H}_{E_i}$ bizonyos irreducibilis alterek direkt összgge. Ha $\mathcal{H}_{E_i}$ csak egy irreducibilis altérből áll, akkor az E_i sajátérték annyiszorosan elfajult, amennyi a kérdéses irreducibilis előállitás dimenziója, ebben az esetben beszélünk természetes degenerációról. Előfordulhat az is, hogy több <u>különböző</u> irreducibilis altér direkt összege. Ez a véletlen degeneráció. Az is előfordulhat, hogy $\mathcal{H}_{E_i}$ olyan alterekre bontható melyek ekvivalens irreducibilisekhez tartoznak. Ez általában bonyolítja a problémát, de ilyen eset a továbbiakban nem fog előfordulni.

Látható tehát a fentiek alapján, hogy ha a Hamilton operátor invariáns valamilyen csoporttal szemben, akkor ez általában degenerált sajátértékek fellépéséhez vezet.

Igen gyakran fordul elő az az eset, hogy a H operátor H_0+H_1 alakba irható, ahol H_1 valamilyen gyenge perturbáció. Ekkor többnyire az a helyzet, hogy a H_0+H_1 operátor alacsonyabb szimmetriáju, mint a H_0, azaz a H operátor G szimmetriacsoportja csak egy részcsoportja lesz a H_0 G_0 szimmetriacsoportjának: $G \subset G_0$. Az energiaértékek ekkor nyilván G egyes irreducibilis előállitásaihoz tartoznak. G_0 egy előállitása nyilván G -nek is előállitása, ha csak azokat a $T(g)$ operátorokat tekintjük melyek G elemeihez vannak hozzárendelve. Ez az előállitás azonban általában nem irreducibilis, hanem felbontható G különböző irreducibiliseinek direkt összegére. Ennek megfelelően a G_0 egy adott irreducibilis előállitásához tartozó energiaérték a perturbáció hatására felhasad /10/.

4. A hidrogénatom O_4 szimmetriája

Az O_4 csoport azoknak a g lineáris transzformációknak a csoportja, melyek a négydimenziós valós euklideszi tér vektorainak hosszát változatlanul hagyják:
Jelöljük a g transzformáció mátrixelemeit egy ortonormált bázisban g_{ij} -vel, a transzponált mátrixot $\tilde{g}$ -vel. Mint egyszerüen látható a $g\tilde{g}=e$ azaz a

$$\sum_{j=1}^{4} g_{ij}(\tilde{g})_{jk} = \sum_{j=1}^{4} g_{ij} g_{kj} = \delta_{ik}$$

összefüggés akkor és csak akkor áll fenn, ha $g \in O_4$. Igy

$$\sum_{j=1}^{4} g_{ij}^2 = 1 \qquad \text{miatt} \qquad |g_{ij}| \leq 1$$

Továbbá ha $g^{(n)} \in O_4$ és $\lim_{n\to\infty} g^{(n)} = g$, akkor $\lim_n g^{(n)}\tilde{g}^{(n)} = g\tilde{g} = e$ miatt $g \in O_4$ igy O_4 kompakt.

A következőkben a hidrogénatom Hamilton operátorát olyan alakra hozzuk, melyből kiderül, hogy az az O_4 csoporttal szemben invariáns, s ez lényegében azt jelenti, hogy a hidrogénatom energiaszintjei O_4 bizonyos irreducibilis előállitásainak felelnek meg.

A hidrogénatom Schrödinger egyenlete a következő alaku:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e^2}{r}\right)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

Térjünk át impulzusreprezentációra, azaz legyen

$$\varphi(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \psi(\vec{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}\, d^3\vec{r}$$

a hullámfüggvény. Ekkor a Schrödinger egyenlet

$$\left(\frac{p^2}{2m}-E\right)\varphi(\vec{p})=\frac{e^2}{2\pi^2\hbar}\int\frac{\varphi(\vec{p}\,')}{(\vec{p}\,'-\vec{p})^2}\,d^3\vec{p}\,'$$

alakba irható. Az $\frac{1}{r}\psi(\vec{r})$ Fourier transzformáltját a konvoluciótétel /8/ alapján számitottuk ki. Fennáll ugyanis az

$$F^{-1}\left(\varphi(\vec{p}) * \frac{1}{p^2}\right)=(2\pi\hbar)^{3/2}F^{-1}(\varphi(\vec{p}))\cdot F^{-1}\frac{1}{p^2}$$

összefüggés, ahol F a Fourier transzformáció F^{-1} az inverze $*$ a konvolució jele. Mivel

$$F^{-1}\left(\frac{1}{p^2}\right)=\frac{2\pi^2\hbar}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\frac{1}{r}\quad,\quad F^{-1}(\varphi(\vec{p}))=\psi(\vec{r})$$

ezért

$$F\left(\frac{\psi(\vec{r})}{r}\right)=\frac{1}{2\pi^2\hbar}\varphi(\vec{p}) * \frac{1}{p^2}$$

Szoritkozzunk a negativ energiákra $E<0$ és vezessük be az $p_0=\sqrt{-2mE}$ jelölést, majd az impulzustér minden pontjához rendeljük hozzá a négydimenziós tér egységgömbjének egy pontját a következő módon:

$$\xi_1=\frac{2p_0p_1}{p_0^2+p^2}=\sin\alpha\sin\vartheta\cos\varphi \qquad \xi_4=\frac{p^2-p_0^2}{p_0^2+p^2}=\cos\alpha$$

$$\xi_2=\frac{2p_0p_2}{p_0^2+p^2}=\sin\alpha\sin\vartheta\sin\varphi \qquad \sum_{i=1}^{4}\xi_i^2=1$$

$$\xi_3=\frac{2p_0p_3}{p_0^2+p^2}=\sin\alpha\cos\vartheta$$

Ez lényegében egy sztereografikus projekció. A gömb pontjait gömbi koordinátákkal is megadtuk: $0\le\alpha<\pi$, $0\le\vartheta<\pi$, $0\le\varphi<2\pi$

A négydimenziós egységgömb felületeleme:

$$d\Omega=\sin^2\alpha\sin\vartheta\,d\alpha\,d\vartheta\,d\varphi$$

$$(\vec{p}\,' - \vec{p})^2 = \frac{(p^2+p_0^2)(p'^2+p_0^2)}{4p_0^2}(\vec{\xi}\,' - \vec{\xi})^2$$

Vezessük be a $\Psi(\vec{\xi}) = \frac{1}{4} p_0^{\frac{5}{2}}(p_0^2+p^2)\,\varphi(\vec{p})$ állapotfüggvényt. Ekkor a Schr ödinger egyenlet

$$\Psi(\vec{\xi}) = \frac{me^2}{2\pi^2 \hbar p_0} \int \frac{\Psi(\vec{\xi}\,')}{(\vec{\xi}\,' - \vec{\xi})^2}\, d\Omega(\vec{\xi}\,')$$

alakba irható, azaz a Hamilton operátor egy integráloperátor, mely a négydimenziós egységgömbön, S^3 -on értelmezett négyzetesen integrálható függvények terében $\mathcal{L}^2(S^3)$ -on van értelmezve. Látható, hogy az operátor O_4-el szemben invariáns.

Értelmezzük O_4-nek az $\mathcal{L}^2(S^3)$ -on a kváziregul áris előállitását: $T(g)\Psi(\vec{\xi}) = \Psi(g^{-1}\vec{\xi})$ A lehetséges energiaszinteket megkapjuk, ha a $T(g)$ előállitást felbontjuk irreducibilis komponenseire.

5. A kváziregulráris előállitás felbontása

A kváziregulráris $T(g)$ előállitás felbontását így végezzük el, hogy megkeressük azokat az altereket $\mathcal{L}^2(S^3)$-ban melyek $T(g)$-re nézve invariánsak és nem tartalmaznak valódi altérként $T(g)$-re invariáns alteret. A módszer hasonló lesz ahhoz ahogyan O_3 irreducibiliseit szokás megkeresni.

Legyen $f(\vec{x})$ 4 változós homogén k-adfoku polinom $\vec{x}:(x_1,x_2,x_3,x_4)$. Az ilyen polinomok terét jelölje P_4^k. $f(\vec{x})$ értékét egyértelmüen meghatározza az egységgömbön felvett értéke u.i. ha $\vec{\xi}\in S^3$ $f(r\vec{\xi})=r^k f(\vec{\xi})$. Ezért P_4^k-t ugy tekinthetjük, mint $\mathcal{L}^2(S^3)$ alterét. Ez az altér invariáns $T(g)$-re nézve mivel homogén polinom forgatáskor homogén polinomba megy át. Ez az altér azonban nem irreducibilis, mert az $f(\vec{x})=r^2 f_1(\vec{x})$ alaku függvények tere is invariáns, $r^2=x_1^2+x_2^2+x_3^2+x_4^2$, $f_1(\vec{x})\in P_4^{k-2}$. Ezt a teret $r^2P_4^{k-2}$-vel jelöljük, nyilván $r^2P_4^{k-2}\subset P_4^k$.

Tekintsük most azokat függvényeket, melyekre $f(\vec{x})\in P_4^k$ és $\Delta f(\vec{x})=0$, itt Δ a négydimenziós Laplace operátor. Ezeknek a függvényeknek a terét H_4^k-val jelöljük ez a 4 változós k-ad foku homogén <u>harmonikus</u> polinomok tere. Mivel ha $\Delta f(\vec{x})=0$ akkor $\Delta f(g^{-1}\vec{x})=0$ $g\in O_4$-re, ezért H_4^k is invariáns altere $T(g)$-nek. Jelöljük a H_4^k-ra szükitett $T(g)$ előállitást $T_4^k(g)$-vel.

Kimutatjuk, hogy

1. a $T_4^k(g)$ előállitások irreducibilisek;
2. az összes $k = 1, 2, 3 \ldots$ -al vett direkt összege kiadja $T(g)$ -t;
3. a $T_4^k(g)$ előállitást az O_3 -ra szükitve az a következő módon bomlik fel:

$$T_4^k(h) = \sum_{\ell=0}^{3} T_3^\ell(h) \qquad h \in O_3$$

$T_3^\ell(h)$ O_3 -nak a háromváltozós ℓ -edfoku homogén harmonikus polinomok terében értelmezett irreducibilis előállitása.

Először a 2. állitást vizsgáljuk meg, tehát a teljesség kérdését. Ehhez először belátjuk, hogy bármely k -adfoku négyváltozós homogén polinom felirható egy ugyanilyen de harmonikus polinom és egy $r^2 f_1(\bar{x})$ alaku polinom összegeként azaz

$$P_4^k = H_4^k + r^2 P_4^{k-2}$$

Elsőként megmutatjuk, hogy H_4^k és $r^2 P_4^{k-2}$ közös része 0, azaz hogy $r^2 P_4^{k-2}$ -nek egyetlen $r^2 f_1$ eleme sem harmonikus. Legyen $r^2 f_1 = r^{2m} f_m$ ahol f_m nem osztható r^2 -el és $f_m \neq 0$.

$$\Delta(r^2 f_1) = 2 \cdot 4 \cdot f_1 + 4 \sum_{i=1}^{4} x_i \frac{\partial f_1}{\partial x_i} + r^2 \Delta f_1$$

Euler tétele miatt

$$\sum_{i=1}^{4} x_i \frac{\partial f_1}{\partial x_i} = (k-2) f_1$$

igy
$$\Delta(r^2 f_1) = 4k f_1 + r^2 \Delta f_1$$

Hasonlóan kapható, hogy
$$\Delta(r^{2m} f_m) = 2m(6+2k-2m) r^{2m-2} f_m + r^{2m} \Delta f_m$$

Ha $\Delta(r^{2m} f_m) = 0$ lenne akkor r^{2m-2}-el leoszthatunk és f_m osztható lenne r^2-el, ami ellentmond a feltételnek, tehát $\Delta(r^{2m} f_m) \neq 0$ vagyis $H_4^k \cap r^2 P_4^{k-2} = 0$

Emiatt $\dim H_4^k \leq \dim P_4^k - \dim P_4^{k-2}$ / $\dim$-mel az illető tér dimenzióját jelöljük/. Viszont $\Delta f \in P_4^{k-2}$ tehát $\Delta f = 0$ legfeljebb $\dim P_4^{k-2}$ darab feltételt szab az f polinom együtthatóira, igy $\dim H_4^k \geq \dim P_4^k - \dim P_4^{k-2}$. Kapjuk tehát, hogy
$$\dim H_4^k = \dim P_4^k - \dim P_4^{k-2}$$

azaz a $P_4^k = H_4^k + r^2 P_4^{k-2}$ állitást bebizonyitottuk.

Nyilvánvaló, hogy ezt a felbontást P_4^{k-2}-re is lehet alkalmazni és igy tovább. Végül a következő felbontást kapjuk
$$P_4^k = \sum_{m=0}^{\left[\frac{k}{2}\right]} r^{2m} H_4^{k-2m}$$
$\left[\frac{k}{2}\right]$ $\frac{k}{2}$ egész része

Azaz minden homogén polinom előáll
$$f(\bar{x}) = \sum_{m=0}^{\left[\frac{k}{2}\right]} r^{2m} h_{k-2m}(\bar{x})$$
alakban,

$h_{k-2m} \in H^{k-2m}$

Speciálisan az egységgömbön

$$f(\vec{\xi}) = \sum_{m=0}^{[k/2]} h_{k-2m}(\vec{\xi})$$

Mivel minden folytonos függvény tetszőleges pontossággal közelithető polinomokkal, továbbá a folytonos függvények is sürü halmazt képeznek az $\mathcal{L}^2(S^3)$ - on ezért a homogén harmonikus polinomok teljes rendszert alkotnak az $\mathcal{L}^2(S^3)$ Hilbert téren. Mint látni fogjuk különböző k -kra a T_4^k előállitások inekvivalensek, továbbá irreducibilisek s ezért a megfelelő H_4^k -k ortogonálisak. Igy

$$\mathcal{L}^2(S^3) = \sum_{k=0}^{\infty} H_4^k \qquad \text{illetve} \qquad T(g) = \sum_{k=0}^{\infty} T_4^k(g)$$

Az 1. és 3. állitás bizonyitásához P_4^k egy másik egyértelmü felbontását adjuk meg. Kimutatjuk, hogy

$$P_4^k = r^2 P_4^{k-2} + \sum_{\ell=0}^{k} x_4^{k-\ell} H_3^\ell$$

Itt $x_4^{k-\ell} H_3^\ell$ az $x_4^{k-\ell} h_3^\ell(\vec{x}')$ alaku függvények tere $\vec{x}' = (x_1, x_2, x_3)$ $h_3^\ell(\vec{x}')$ háromváltozós ℓ -edfoku homogén harmonikus polinom. Először a

$$\dim P_4^k = \dim P_4^{k-2} + \sum_{\ell=0}^{k} \dim H_3^\ell$$

egyenlőséget látjuk be. Ehhez az előző felbontás alapján elegendő a $\dim H_4^k = \sum_{\ell=0}^{k} \dim H_3^\ell$ egyenlőség bizonyitása. Viszont

$$\dim H_4^k = \dim P_4^k - \dim P_4^{k-2}$$

$\dim P_4^k$ a lehetséges független négy változós homogén polinomok száma, azaz a különböző $x_1^\alpha x_2^\beta x_3^\gamma x_4^\delta$ szorzatok száma, ahol a kitevők egészek és az $\alpha+\beta+\gamma+\delta=k$ feltétel teljesül. Egyszerüen látható, hogy ez a szám $\binom{k+3}{3}$. Ebből következik, hogy $\dim P_4^{k-2}=\binom{k+1}{3}$. Igy

$$\dim H_4^k=\binom{k+3}{3}-\binom{k+1}{3}=(k+1)^2$$

$$\dim H_3^\ell=\binom{\ell+2}{2}-\binom{\ell}{2}=2\ell+1$$

Mivel $\sum_{\ell=0}^{k} 2\ell+1=(k+1)^2$, a dimenziókra vonatkozó egyenlőséget beláttuk.

Most megmutatjuk, hogy az $r^2P_4^{k-2}$ és az $x_4^{k-\ell}H_3^\ell$ terek az egész P_4^k-t kiadják. Legyen $f(\vec{x})\in P_4^k$. Ekkor irható, hogy

$$f(\vec{x})=\varphi_1(\vec{x}')+x_4\varphi_2(\vec{x}')+x_4^2\varphi_3(\vec{x})=\varphi_1(\vec{x}')+x_4\varphi_2(\vec{x}')+(r^2-r_3^2)\varphi_3(\vec{x})$$

ahol $r_3^2=x_1^2+x_2^2+x_3^2$ és $r_3^2\varphi(\vec{x})$ x_4-et kettővel alacsonyabb fokon tartalmazza mint $f(\vec{x})$. $r_3^2\varphi(\vec{x})$ x_4-ben nullad- és elsőfoku tagjait φ_1-hez illetve $x_4\varphi_2$-höz adjuk, a másod és magasabbrendü tagokból ismét kiemelünk x_4^2-et és tovább folytatjuk ezt az eljárást. Igy $f(\vec{x})$-et a következő alakra hozzuk:

$$f(\vec{x})=\tilde{\varphi}_1(\vec{x}')+x_4\tilde{\varphi}_2(\vec{x}')+r^2F(\vec{x})$$

$$\tilde{\varphi}_1(\vec{x}')\in P_3^k \quad \tilde{\varphi}_2(\vec{x}')\in P_3^{k-1} \quad F(\vec{x})\in P_4^{k-2}$$

A korábban látott felbontás alapján

$$f(\vec{x}) = \sum_{l=0}^{[k/2]} r_3^{2l} h_{k-2l}(\vec{x}') + \sum_{l=0}^{[\frac{k-1}{2}]} x_4 r_3^{2l} h_{k-2l-1}(\vec{x}') + r^2 F(\vec{x})$$

r_3^2 helyett $r^2 - x_4^2$ -et irunk, a hatványozást végrehajtjuk és az r^2-et tartalmazó tagokat az utolsó taghoz adjuk s igy $f(\vec{x})$ az

$$f(\vec{x}) = \sum_{l=0}^{k} x_4^{k-l} h_l(\vec{x}') + r^2 f_1(\vec{x})$$

alakba irható, ami éppen a kivánt felbontás.

Hasonlitsuk össze a tér két felbontását

$$P_4^k = r^2 P_4^{k-2} + H_4^k \qquad \text{és} \qquad P_4^k = r^2 P_4^{k-2} + \sum_{l=0}^{k} x_4^{k-l} H_3^l$$

A két felbontás egyértelmüsége miatt a

$$H_4^k \cong \sum_{l=0}^{k} x_4^{k-l} H_3^l$$

izomorfia áll fenn. A $T(g)$ operátorokra nézve ez operátorizomorfia is, mert az $r^2 P_4^{k-2}$ invariáns a $T(g)$ -kkel szemben, s ez azt jelenti, hogy a H_4^k téren értelmezett $T_4^k(g)$ előállitás ekvivalens a $\sum_{l=0}^{k} x_4^{k-l} H_3^l$ téren értelmezett előállitással.

Szükitsük most az O_4 -et O_3-ra a következőképpen: Tekintsük azokat a h csoportelemeket melyek pl. x_4 -et változatlanul hagyják, akkor $h \in O_3$. Az egyes H_3^l terek invariánsak az O_3 beli forgatásokra nézve tehát:

$$T_4^k(h) = \sum_{l=0}^{k} T_3^l(h) \qquad h \in O_3$$

A $T_3^l(h)$ előállitások viszont O_3 $2l+1$ dimenziós irreducibilis előállitásai, hiszen az l-edfoku homogén harmonikus polinomok terében vannak értelmezve, melyeket az egységgömbön gömbfüggvényeknek nevezünk és amelyekről jól ismert /10/, hogy O_3 irreducibilis előállitásainak bázisát adják.

6. A $T_4^k(g)$ előállitások irreducibilitása

Megkonstruáljuk a $T_4^k(g)$ előállitások infinitezimális operátorait, majd kimutatjuk, hogy a H_4^k térben nincs az infinitezimális operátorokkal szemben a triviálistól különböző altér. Ebből következik, hogy a $T_4^k(g)$ előállitások irreducibilisek.

Legyen A_{jk} az $x_j x_k$ sikban való forgatáshoz mint egyparaméteres alcsoporthoz tartozó infinitezimális operátor. Legyen $g_{jk}(\varphi)$ a φ szöggel való forgatás az $x_j x_k$ sikban.

$$T(g_{jk}(\varphi))f(\vec{x}) = f(g_{jk}(-\varphi)\vec{x}) = f(x_1, \dots, x_j\cos\varphi + x_k\sin\varphi, \dots, -x_j\sin\varphi + x_k\cos\varphi, \dots, x_4)$$

$$A_{jk}f = \left.\frac{dT(g_{jk}(\varphi))}{d\varphi}\right|_{\varphi=0} f = \left(x_k\frac{\partial}{\partial x_j} - x_j\frac{\partial}{\partial x_k}\right) f$$

Megállapitottuk tehát az infinitezimális operátorok hatását a függvénytérben.

Most felhasználjuk a $T_4^k(h) = \sum_{l=0}^{k} T_3^l(h)$ felbontást. Mivel a $T_3^l(h)$ előállitások irreducibilisek és inekvivalensek, ezért bármely $T_4^k(g)$ -vel szemben invariáns altér az $x_4^{k-l} H_3^l$ terek bizonyos k -kra vett direkt összegeként áll elő. Belátjuk, hogy csak az összes 0 és k közé eső l -re vett direkt összeg invariáns $T_4^k(g)$-re.

A bizonyitást olymódon végezzük el, hogy megmutatjuk, hogy az A_{j4} infinitezimális operátor kivezet bármely $x_4^{k-l} H_3^l$ térből.

$$A_{j4}\left[x_4^{k-\ell}h_\ell(\vec{x}')\right]=x_4^{k-\ell+1}\frac{\partial h_\ell}{\partial x_j}-(k-\ell)x_4^{k-\ell-1}x_j h_\ell(\vec{x}')$$

Segédtétel:

$$x_j h_\ell(\vec{x}')=\tilde{h}_{\ell+1}(\vec{x}')+\frac{1}{2\ell+1}r_3^2\frac{\partial h_\ell}{\partial x_j}$$

alakba irható, ahol $\tilde{h}_{\ell+1}(\vec{x}')\in H_3^{\ell+1}$, $\vec{x}'=(x_1,x_2,x_3)$

Bizonyitás:

$$\Delta_3(x_j h_\ell(\vec{x}'))=x_j\Delta_3 h_\ell(\vec{x}')+2\frac{\partial h_\ell}{\partial x_j}$$

$$\Delta_3\left(r_3^2\frac{\partial h_\ell}{\partial x_j}\right)=(4\ell+2)\frac{\partial h_\ell}{\partial x_j}+\Delta_3\frac{\partial h_\ell}{\partial x_j}=(4\ell+2)\frac{\partial h_\ell}{\partial x_j}$$

mivel $\frac{\partial h_\ell}{\partial x_j}$ $\ell-1$ -edfoku homogén harmonikus függvény. Δ_3 -al a háromdimenziós Laplace operátort jelöltük. A két egyenlőségből

$$\Delta_3\left(x_j h_\ell(\vec{x}')-\frac{1}{2\ell+1}r_3^2\frac{\partial h_\ell}{\partial x_j}\right)=0$$

azaz a Δ_3 mögött álló kifejezés homogén harmonikus $\ell+1$ -ed foku polinom, jelöljük $\tilde{h}_{\ell+1}(\vec{x}')$ -vel, s a segédtételt igazoltuk.

Irjukk segédtételünkben r_3^2 helyett $r^2-x_4^2$-et és helyettesitsük $x_j h_\ell(\vec{x}')$-t az $A_{j4}[x_4^{k-\ell}h_\ell(\vec{x}')]$ kifejezésbe. Kapjuk, hogy

$$A_{j4}\left[x_4^{k-\ell}h_\ell(\vec{x}')\right]=\frac{k+\ell+1}{2\ell+1}x_4^{k-\ell+1}\frac{\partial h_\ell}{\partial x_j}-(k-\ell)x_4^{k-\ell-1}\tilde{h}_{\ell+1}(\vec{x}')-$$

$$-\frac{k-\ell}{2\ell+1}r^2x_4^{k-\ell-1}\frac{\partial h_\ell}{\partial x_j}$$

Mivel $\frac{\partial h_\ell}{\partial x_j}\in H_3^{\ell-1}$ $\tilde{h}_{\ell+1}\in H_3^{\ell+1}$ és $x_4^{k-\ell-1}\frac{\partial h_\ell}{\partial x_j}\in P_3^{k-2}$ az $A_{j4}[x_4^{k-\ell}h_\ell(\vec{x}')]$-t felirtuk $x_4^{k-\ell+1}H_3^{\ell-1}$, $x_4^{k-\ell-1}H_3^{\ell+1}$ és $r^2P_4^{k-2}$ -be tartozó függvények lineáris kombinációjaként.

Ha $h_k(\vec{x}')\neq 0$, akkor $\ell\neq 0$ $\ell\neq k$ esetén az első két tag 0 -tól, különböző, $\ell=0$ esetén pedig csak az első, $\ell=k$ esetén pedig csak a második tag 0. Ebből látható, hogy az A_{j4} infinitezimális operátor kivezet $x_4^{k-\ell}H_3^{\ell}$ -ből. De az is látszik, hogy ha ezeknek a tereknek valamilyen direkt összegét veszem, ahol az összegzés nem minden ℓ -re terjed ki, az infinitezimális operátor abból is kivezet. Igy legalább az összes ℓ -re vonatkozó direkt összeget kell venni, hogy az igy kapott tér invariáns legyen, vagyis legfeljebb a $\sum_{\ell=0}^{k} x_4^{k-\ell}H_3^{\ell}$ tér lehet invariáns, de erről korábbról tudjuk, hogy valóban az, igy a $T_4^k(g)$ előállitások irreducibilitását bebizonyitottuk.

Az O_4 csoportnak az $\mathcal{L}^2(S^3)$ -on értelmezett kváziregulàris előállitását tehát felbontottuk a T_4^k $k=0,1,\ldots$ irreducibilis előállitások direkt összegére. A T_4^k előállitások $(k+1)^2$ dimenziósak. Ez azt jelenti, hogy a hidrogénatom energiaszintjeit egy $k+1=n$ kvantumszámmal, a főkvantumszámmal lehet jellemezni, az n -edik szint n^2 szeresen elfajult. Azt is láttuk, hogy ha O_4-et O_3-ra szükitjük akkor a T_4^k reprezentáció felbomlik az O_3 T_3^{ℓ} $2\ell+1$ dimenziós előállitásaira $\ell=0,1,\ldots,n-1$ ℓ adja a mellékkvantumszámot, ennek a továbbiakban lesz jelentősége. A T_4^k -hoz tartozó energiaértékeket is megkaphatjuk ha a

$$\Psi(\vec{\xi})=\frac{me^2}{2\pi^2\sqrt{-2mE}}\int\frac{\Psi(\vec{\xi}')}{(\vec{\xi}'-\vec{\xi})^2}\,d\Omega$$

Schrödinger egyenletben $\Psi(\vec{\xi}')$ helyére a T_4^k előállitás terébe tartozó k -adfoku négyváltozós homogén harmonikus polinomot irunk. A számitást elvégezve /1/

$$\int \frac{h_k(\vec{\xi}')}{(\vec{\xi}'-\vec{\xi})^2}\, d\Omega = \frac{2\pi^2}{k+1} h_k(\vec{\xi}) = \frac{2\pi^2}{n} h_k(\vec{\xi})$$

Ezt figyelembe véve az energiákra az

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$$

ismert összefüggés adódik.

7. A $T_u^k(g)$ előállitások speciális tulajdonságai

Az O_4 csoport $T_u^k(g)$ előállitásai, noha végtelen sokan vannak, nem meritik ki O_4 összes irreducibilis előállitásait. Csak megemlitjük, hogy O_4 összes irreducibilisei két indexszel jellemezhetők, mig a $T_u^k(g)$ előállitásokat egyetlen index k segitségével adtuk meg /9/.

Az O_4 csoport $T_u^k(g)$ irreducibiliseinek megvan az a tulajdonságuk, hogy előállitási terükben létezik olyan vektor amelyet az összes $T_u^k(h)$ $h \in O_3$ operátor invariánsan hagy, ilyen vektor az $x_4^{\ell-0} H_0^0 = x_4^\ell$. Most kimutatjuk, hogy O_4 -nek csak a $T_u^k(g)$ előállitásai birnak ezzel a tulajdonsággal, azaz nincs más olyan $D(g)$ irreducibilis előállitása O_4 -nek, melynek előállitási terében van olyan vektor, melyet minden $D(h)$ $h \in O_3$ alaku tehát O_3 -ra szükitett előállitás invariánsan hagy.

Legyen $D(g)$ egy irreducibilis előállitása O_4 -nek mely valamilyen R térben hat, és legyen $\vec{a}$ olyan vektor, hogy $D(h)\vec{a} = \vec{a}$ minden $h \in O_3$ kimutatjuk, hogy $D(g)$ ekvivalens valamelyik $T_u^k(g)$ -vel. Vezessünk be az R téren olyan belső szorzatot melyre nézve $D(g)$ uniter és értelmezzük O_4 -en a következő függvényt

$$\vec{f} \longrightarrow f(g) \quad , \quad f(g) = \left(D(g^{-1})\vec{f}, \vec{a}\right) \quad \vec{f}, \vec{a} \in R$$

Igy minden $\vec{f} \in R$ -hez hozzárendeltünk egy $f(g)$ skalárfüggvényt. Ekkor a $D(k)\vec{f}$ -hez tartozó függvény $(k \in O_4)$

$$(D(g^{-1})D(k)\vec{f},\vec{a}) = (D(g^{-1}k)\vec{f},a) = (D((k^{-1}g)^{-1})\vec{f},\vec{a}) = f(k^{-1}g)$$

Legyen $k \to P(k)$ $\quad P(k)f(g) = f(k^{-1}g)$ a csoport egy előállitása az $f(g)$ függvények terében. Igy ha $\vec{f} \to f(g)$ akkor $D(k)\vec{f} \to P(k)f(g)$

Megmutatjuk, hogy a leképezés nemcsak homomorfizmus, hanem izomorfizmus is, amiből következik, hogy $D(k)$ ekvivalens $P(k)$-val. Az izomorfiához elég megmutatni, hogy az $\vec{f} \to f(g)$ leképezés magja, vagyis azok az $\vec{f}$ -ek melyeknek képe a nulla függvény, maga is a nullvektor.

Legyen tehát $f(g) \equiv 0$. Ekkor minden k -ra $f(k^{-1}g) = P(k)f(g) = 0$. Igy ha $\vec{f}$ az $\vec{f} \to f(g)$ leképezés magjához tartozik akkor $D(k)\vec{f}$ is minden k -ra, tehát a mag invariáns a $D(k)$ -val szemben. A mag nem lehet az egész tér, mivel $a(e) = (\vec{a},\vec{a}) > 0$. $D(g)$ irreducibilitásából következik, hogy a mag a nullvektor, ezért $\vec{f} \longleftrightarrow f(g)$ izomofrizmus, tehát a két előállitás ekvivalens.

Az $\vec{f}$ vektorok tere helyett tehát vizsgálhatjuk az $f(g)$ függvények terét is. Megmutatjuk, hogy $f(g)$ konstans az O_3 szerinti baloldali mellékosztályokon. Legyen $h \in O_3$

$$f(gh) = (D(h^{-1}g^{-1})\vec{f},\vec{a}) = (D(g^{-1})\vec{f}, D(h)\vec{a}) = (D(g^{-1})\vec{f},\vec{a}) = f(g)$$

$f(g)$ -t tehát ugy is tekinthetjük, mint az egyes baloldali mellékosztályokon értelmezett függvényt, vagyis mint az O_4/O_3 homogén téren, azaz a négydimenziós egységgömbön értelmezett függvényt /2. pont/.

Ha $\vec{\xi}_4 = (0,0,0,1) \in S^3$ és $\vec{\xi} = g\vec{\xi}_4 \quad g \in O_4$

legyen $\varphi(\vec{\xi}) = f(g)$

Ekkor $P(k)\varphi(\vec{\xi}) = P(k)f(g) = f(k^{-1}g) = \varphi(k^{-1}\vec{\xi}) \quad \xi \in S^3$

vagyis $P(k)$ és a vele ekvivalens $D(g)$ előállitás a $T(g)$ előállitás irreducibilis része, vagyis ekvivalens valamelyik $T_4^k(g)$ -vel.

Ezzel bebizonyitottuk, hogy csak a $T_4^k(g)$ előállitások azok melyeket O_3 -ra szükitve, van olyan függvény az előállitási terükben, melyet minden $h \in O_3$-ra invariánsan hagynak. Fizikailag ez azt jelenti, hogy csak ezeknek az előállitásoknak a terében vannak a háromdimenziós értelemben gömbszimmetrikus állapotok, azaz a spektroszkópia nyelvén S állapotok.

8. A He atom vizsgálata

A hidrogénatom O_4 szimmetriájának alapján a He atom energiaszintjei is megkaphatók. A következőkben ezzel foglalkozunk. A He atom Schrödinger egyenlete koordinátareprezentációban:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_1+\Delta_2)-\frac{Ze^2}{r_1}-\frac{Ze^2}{r_2}+\frac{e^2}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}\right)\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=E\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$$

Vizsgáljuk meg a Hamilton operátor szimmetriáit. Az egyrészt invariáns az O_3 csoporttal szemben, mivel a Laplace operátor és $\frac{1}{r}$ is invariáns, másrészt, nem változik a Hamilton operátor alakja akkor sem, ha a két elektront felcseréljük, vagyis Δ_1 helyébe Δ_2 -t, r_1 helyébe r_2 -t irunk és viszont.

A két elektron felcserélését illetve nem felcserélését két transzformációnak tekintjük, ezek a transzformációk csoportot alkotnak, két elem permutációinak csoportját. Ennek a csoportnak a jele S_2 . A csoportnak két eleme van, jelöljük ezeket e -vel és a -val. e változatlanul hagyja a két elektront, ez az egységelem, a felcseréli őket. Nyilván $a^2=e$

Ennek a csoportnak két irreducibilis előállitása van, mindkettő egydimenziós, az egyiket T^+ -al, a másikat T^--al jelöljük:

$$T^+: \quad T^+(e)\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) \quad T^+(a)\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=\psi(\vec{r}_2,\vec{r}_1)$$

$$T^-: \quad T^-(e)\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) \qquad T^-(a)\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = -\psi(\vec{r}_2,\vec{r}_1)$$

Ennek megfelelően minden $\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ függvényt felirhatunk

$$\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \frac{1}{2}\left(\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) + \psi(\vec{r}_2,\vec{r}_1)\right) + \frac{1}{2}\left(\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) - \psi(\vec{r}_2,\vec{r}_1)\right)$$

alakban ahol az első tag a T^+ -hoz a második T^--hoz tartozó invariáns irreducibilis altere a $\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ és a $\psi(\vec{r}_2,\vec{r}_1)$ függvényekből álló kétdimenziós térnek.

Ha a hélium Schrödinger egyenletéből elhagyjuk az $\frac{e^2}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}$ tagot, akkor a Hamilton operátor két független hidrogénszerü Hamilton operátor összege. Ha csak ezt az egyenletet tekintjük, akkor a függetlenség miatt az egyenlet szeparálható, $\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2)$ feltevéssel két egyenletre bontható:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 - \frac{2e^2}{r_1}\right)\psi_1(\vec{r}_1) = E_1\psi_1(\vec{r}_1)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2 - \frac{2e^2}{r_2}\right)\psi_2(\vec{r}_2) = E_2\psi_2(\vec{r}_2)$$

Ekkor a két egyenleten külön-külön végrehajtva a Fock féle transzformációt, azok egyenként O_4 szimmetriát mutatnak. Mivel a $\psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2)$ függvények a $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ direktszorzattér elemei, a perturbálatlan probléma sajátfüggvényei $O_4 \otimes O_4$ egyes irreducibilis előállitásaihoz tartoznak. Mint az 1. pontban láttuk, ezeket a $T(g)\otimes T(g)$ alakba irhatjuk, ahol $g \in O_4$. A továbbiakban $O_4 \otimes O_4$ -nek csak azokat az irreducibiliseit vesszük figyelembe, melynek terei a $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ alterei, azaz a $T_4^{k_1} \otimes \bar{T}_4^{k_2}$ előállitásokat.

Az S_2 szimmetria természetesen a perturbálatlan problémánál is megmarad igy a teljes szimmetria ebben az esetben $O_4 \otimes O_4 \otimes S_2$, tehát az egyes energiaértékek a $T_4^{k_1} \otimes T_4^{k_2} \otimes T^{i}$ előállitásokhoz tartoznak $k_1, k_2 = 0, 1 \dots, i = +, -$ A továbbiakban ezeket az előállitásokat $T^{k_1 k_2 i}$ -saal jelöljük.

Felhivjuk a figyelmet arra, hogy a T^{00-} előállitáshoz tartozó függvény a 0 függvény, mivel $k_1 = k_2 = 0$ esetén a $T^0 \otimes T^0$ tere egydimenziós, ebben az esetben a $\psi_1(\vec{x}_1) = \psi_2(\vec{x}_2)$ s igy $\frac{1}{2}(\psi_1(\vec{x}_1)\psi_2(\vec{x}_2) - \psi_1(\vec{x}_2)\psi_2(\vec{x}_1)) = 0$. Általában a $T^{k_1 k_2 i}$ -hez tartozó energia a $T_4^{k_1}$ -hez tartozó E_1 , és a $T_4^{k_2}$ -höz tartozó E_2 összege. A korábbiak alapján

$$E_{n_1 n_2} = E_1 + E_2 = -\frac{2me^4}{\hbar^2}\left(\frac{1}{(k_1+1)^2} + \frac{1}{(k_2+1)^2}\right) = -\frac{2me^4}{\hbar^2}\left(\frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2}\right)$$

Vizsgáljuk meg két speciális esetet:

1. $n_1 = 2 \quad n_2 = 2 \qquad E_{22} = -\frac{2me^4}{\hbar^2}\,\frac{1}{2}$

2. $n_1 \to \infty \quad n_2 = 1 \qquad E_{\infty 1} = -\frac{2me^4}{\hbar^2}$

Az $E_{\infty 1}$ -nél nagyobb energiák az első elektron szempontjából a folytonos spektrumba esnek. Látjuk, viszont, hogy $E_{22} > E_{\infty 1}$ azaz az $n_1 = 2, n_2 = 2$ -nek megfelelő energianivó már a folytonos spektrumba esik, igy a hagyományos spektroszkópiai módszerekkel nem figyelhető meg. Ezért a továbbiakban csak arra az esetre szoritkozunk, mikor $n_1 = 1, 2 \dots, n_2 = 1$ $n_2 = 1$ esetén $k_2 = 0$ és T^0 egydimenziós előállitás, azaz az egységoperátor konstansszorosa.

Vegyük most figyelembe a Hamilton operátorban az $\frac{e^2}{|\vec{r}_2-\vec{r}_1|}$ perturbáló tagot is. Ennek a tagnak a felléptе elrontja az $O_4 \otimes O_4$ szimmetriát hiszen ha a perturbáló tagot is figyelembe vesszük egyenletünk nem szeparálható. Megmarad viszont az $O_3 \otimes S_2$ szimmetria, azaz a háromdimenziós forgatásokkal és a két elektron felcserélésével kapcsolatos szimmetria.

Tekintsük tehát az $\frac{e^2}{|\vec{r}_2-\vec{r}_1|}$ tagot perturbációnak, ekkor az eredeti energiaszintek felhasadását a 3. pont szerint ugy kaphatjuk, hogy $O_4 \otimes O_4 \otimes S_2$ $T^{k_1 0 i}$ előállitásait $O_3 \otimes S_2$ előállitásainak tekintjük és megvizsgáljuk, hogy $O_3 \otimes S_2$ mely irreducibilis előállitásaira bomlanak fel. Ez utóbbiak $T_3^{\ell} \otimes T^i = T_3^{\ell i}$ alakuak, T_3^{ℓ} O_3 $2\ell+1$ dimenziós irreducibilis előállitása, T^i pedig $(i=+,-)$ S_2 irreducibilis előállitása.

A redukálást ugy hajtjuk végre, hogy $T_4^{k_1}$-et felbontjuk a megfelelő T_3^{ℓ}-ekre majd alkalmazzuk a direkt szorzatra vonatkozó összefüggéseket.

$$T_4^{k_1 0 i} = T_4^{k_1} \otimes T_4^{0} \otimes T^i = T_4^{k_1} \otimes T^i = \left(\sum_{\ell=0}^{k_1} T_3^{\ell}\right) \otimes T^i = \sum_{\ell=0}^{k_1} T_3^{\ell i}$$

Az egyes szintek felbomlásait részletesen is kiirjuk

$k_1 + 1 = n$

$n=1$ $\quad T^{00+} = T_3^{0+}$

$n=2$ $\quad T^{10+} = T_3^{0+} + T_3^{1+}$ $\qquad T^{10-} = T_3^{0-} + T_3^{1-}$

$n=3$ $\quad T^{20+} = T_3^{0+} + T_3^{1+} + T_3^{2+}$ $\qquad T^{20-} = T_3^{0-} + T_3^{1-} + T_3^{2-}$

. . . $\qquad$ . . . $\qquad$ . . .

A valóságban a spektroszkópiai vizsgálatok azonban nem támasztják alá ezt az eredményt. A kapott eredmény szerint például az $n=2$ szint két nivóra hasad fel, mivel a T^{+} -hoz és T^{-} -hoz tartozó energiák közt nincs különbség, s a maximális multiplicitás, mely T_3^1 -hez tartozik $2\cdot 1+1=3$ Azaz a T_3^1 -nek megfelelő szint, abban az esetben, ha az szimmetriát is elrontjuk pl. mágneses tér alkalmazásával, 3 részre bomlana. Ezzel szemben a valóságban az $n=2$ szint 6 részre hasad fel, melyek között 5 szörös multiplicitásu is előfordul.

9. A spin figyelembevétele

A tapasztalattal való fenti ellentmondás és más hasonló ellentmondások vezettek a kvantummechanikában arra a felismerésre, hogy egy állapot leirásához elektron esetén nem elég egy alaptéren értelmezett négyzetesen integrálható függvények tere, hanem ennek a térnek és egy R_2 kétdimenziós euklideszi térnek a direkt szorzata alkalmas csak az állapot teljes leirására. Ennek a kétdimenziós térnek az egységre normált vektorait nevezzük spinállapotoknak. E kétdimenziós tér báziselemeinek szokásos jelölése α és β , minden elem a $\vec{X} = X_1\alpha + X_2\beta$ alakba irható, ahol $\sum_i X_i X_i^* = 1$

Forgassuk el azt a rendszert, melyben a spinállapotot vizsgáljuk egy $g \in O_3$ transzformációval. Az uj rendszerben a spinfüggvény komponensei a következő alakuak

$$X_i' = \sum_{j=1}^{2} u_{ij}(g) X_j$$

Mivel $\sum_{i=1}^{2} X_i' X_i'^* = 1$ szintén fennáll, ebből következik, hogy az $u_{ij}(g)$ -k egy 2x2-es unitér mátrixot alkotnak. A $\vec{X}$ és $c\vec{X}$ állapot között, ahol c egy egységnyi abszolut értékü komplex szám, nem teszünk különbséget, igy $u(g)$ és $c\,u(g)$ lényegében ugyanaz a transzformáció. Emiatt c választhatő ugy, hogy $\det u = 1$ fennálljon.

A $+1$ determinánsu 2x2-es unitér mátrixok csoportot alkotnak, az SU_2 csoportot.

A fentiek szerint tehát a g elforgatáskor a spinfüggvények $u(g)$ szerint transzformálódnak. Igy minden $g \in O_3$ -hoz hozzárendeltünk egy $u(g) \in SU_2$ mátrixot. Ez a hozzárendelés azonban, mint kimutatható nem rendelkezik az előállitásra jellemző $u(g_1)u(g_2) = u(g_1 g_2)$ tulajdonsággal, hanem csak az $u(g_1)u(g_2) = \pm u(g_1 g_2)$ összefüggés fennállását lehet biztositani. Ha a $g \rightarrow u(g)$ hozzárendelés ilyen tulajdonságu akkor azt kétértékü előállitásnak szokás nevezni. Az is belátható, hogy ez az előállitás O_3 -nak irreducibilis előállitása. A továbbiakban ezt az előállitást $T_3^{1/2}(g)$-vel jelöljük, a dimenziószám itt is $2 \cdot \frac{1}{2} + 1 = 2$

A függvénytér tehát, amelynek az állapotfüggvény egy részecske esetén eleme, az $\mathcal{L}^2 \otimes R_2$, két részecske esetén $\mathcal{L}^2 \otimes \mathcal{L}^2 \otimes R_2 \otimes R_2$

A továbbiakban szükség lesz O_3 irreducibilis előállitásainak direkt szorzataira. Két irreducibilis előállitás direkt szorzata általában nem irreducibilis előállitása a csoportnak, s meg lehet határozni a direkt szorzat irreducibilis összetevőit. O_3 esetében bizonyitás nélkül közöljük ezt a felbontást

$$T_3^{l_1} \otimes T_3^{l_2} = \sum_{m=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} T_3^{m}$$

Itt l_1 és l_2 egész vagy feles számok. A fenti állitások igazolása megtalálható Wigner könyvében /10/.

Két elektron esetében a különböző spinállapotokat ugy kaphatjuk meg, hogy $T_3^{1/2} \otimes T_3^{1/2}$-et felbontjuk irreducibilis komponensekre, az ezeknek megfelelő alterek $R_2 \otimes R_2$-ben adják a lehetséges spinállapotokat. Az előbbi redukálási szabály szerint $T_3^{1/2} \otimes T_3^{1/2} = T_3^0 + T_3^1$ Tehát $R_2 \otimes R_2$ egy egydimenziós és egy háromdimenziós irreducibilis altérre esik szét.

Most megmutatjuk, hogy az egy dimenziós teret a két elektron felcserélésére nézve antiszimmetrikus, a háromdimenziós teret a szimmetrikus függvények feszitik ki.

Legyen $R_2^{(1)}$-ben $\alpha(1), \beta(1)$ ortonormált bázis, hasonlóan $R_2^{(2)}$-ben $\alpha(2), \beta(2)$. Az első elektron spinfüggvénye legyen $\chi_1^{(1)}\alpha(1) + \chi_2^{(1)}\beta(1)$, a másodiké $\chi_1^{(2)}\alpha(2) + \chi_2^{(2)}\beta(2)$ Alkossuk meg $R_2 \otimes R_2$-ben a következő ortonormált bázist:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)\right)$$

$$\alpha(1)\alpha(2) \qquad \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)\right) \qquad \beta(1)\beta(2)$$

Ebben a bázisban a $\chi_i^{(1)}\chi_j^{(2)}$ $(i,j=1,2)$ alaku szorzatok illetve ezek lineáris kombinációi adják az egyes komponenseket. Ezek transzformációs törvénye:

$$\chi_{i'}^{(1)}\chi_{j'}^{(1)} = \sum_{i,j=1}^{2} u_{ii'}u_{jj'}\chi_i^{(1)}\chi_j^{(2)}$$

Látható, hogy ha egy kombináció i és j felcserélésére nézve szimmetrikus vagy antiszimmetrikus, akkor transzformáltja is szimmetrikus illetve antiszimmetrikus. Mivel az első bázisvektorhoz tartozó komponens antiszimmetrikus, a másik háromhoz tartozó szimmetrikus, ezért ebben a bázisban az $R_2 \otimes R_2$ felbomlik egy egydimenziós antiszimmetrikus és egy háromdimenziós szimmetrikus altér direkt összegére, melyek $T_3^{1/2} \otimes T_3^{1/2}$ -el szemben külön-külön invariánsak. Azonban $T_3^{1/2} \otimes T_3^{1/2}$ éppen egy egydimenziós és egy háromdimenziós irreducibilis előállitásra bomlik, s ez a felbontás egyértelmü. Igy T_3^0 éppen az antiszimmetrikus T_3^1 pedig a szimmetrikus spinfüggvények terében van értelmezve.

10. A He atom energiaszintjei

Felmerül a kérdés, miért szükséges a tér felbontása szimmetrikus és antiszimmetrikus részre. A feleletet a Pauli elv adja. A Pauli elv szerint a teljes függvénytérnek, azaz esetünkben az $\mathcal{L}^2\otimes\mathcal{L}^2\otimes R_2\otimes R_2$-nek csak az antiszimmetrikus alterébe tartozó függvények reprezentálhatnak fizikai állapotot. Persze ez a feltételezés csak elektronokra és más feles spinü részecskékre áll fenn, azokra melyeknél az $\mathcal{L}^2$-t kiegészitő tér O_3 valamilyen kétértékü előállitásának irreducibilis tere.

A teljes direkt szorzatnak tehát az antiszimmetrikus részét kell venni. Ezt ugy kaphatjuk meg, hogy $\mathcal{L}^2\otimes\mathcal{L}^2$ szimmetrikus alterét szorozzuk $R_2\otimes R_2$ antiszimmetrikus alterével és forditva. Ez azt jelenti, hogy a $T_4^{k,0+}$ előállitásokat T_3^0 -val a $T^{k,0-}$ előállitásokat T_3^1 -el kell szorozni, s az igy kapott előállitásokhoz tartoznak a tényleges energiaszintek. Most ismét felhasználjuk a

$$T_3^l\otimes T_3^s=\sum_{j=|l-s|}^{l+s}T_3^j$$

felbontási szabályt, és az alábbiakban részletesen kiirjuk az eredményt.

A $T_3^0\otimes T^{k,0+}$ alaku előállitásokhoz tartozó spinállapot egyszeresen elfajult ezért ezeket az állapotokat szingulett állapotoknak nevezik, és az ilyen állapotban található héliumot parahéliumnak. A parahélium szintjei:

$n=1$ $T^{00+} \otimes T_3^{0} = T_3^{0+} \otimes T_3^{0} = T_+^{0}$ 1^1S_0

$n=2$ $T^{10+} \otimes T_3^{0} = (T_3^{0+} + T_3^{1+}) \otimes T_3^{0} = T_+^{0} + T_+^{1}$ 2^1S_0 2^1P_1

$n=3$ $T^{20+} \otimes T_3^{0} = (T_3^{0+} + T_3^{1+} + T_3^{2+}) \otimes T_3^{0} = T_+^{0} + T_+^{1} + T_+^{2}$ 3^1S_0 3^1P_1 3^1D_2

A jobboldalra a megfelelő szintek spektroszkópiai jeleit irtuk, melyeket lejebb meg is magyarázunk. A + jel az eredményül kapott előállitásoknál azt jelenti, hogy a hozzátartozó pályafüggvény szimmetrikus, s azért irtuk alsó indexként, hogy jelezzük azt, hogy ennek ellenére a kapott előállitások tere antiszimmetrikus a spinfüggvény miatt.

Most a $T^{k,0-} \otimes T_3^{1}$ alaku előállitásokhoz tartozó szinteket adjuk meg, ezek az ortohélium szintjei. A háromszorosan elfajult spinállapot miatt ezeket triplett-állapotoknak nevezik. Mint már korábban emlitettük $n=1$-nek megfelelő szint itt nem létezik.

$$n=2 \qquad T^{10-} \otimes T_3^{1} = (T_3^{0-} + T_3^{1-}) \otimes T_3^{1} =$$
$$= (T_3^{0-} \otimes T_3^{1}) + (T_3^{1-} \otimes T_3^{1}) =$$
$$= T_-^{1} + \qquad 2^3S_1$$
$$+ T_-^{0} + T_-^{1} + T_-^{2} \qquad 2^3P_0 \quad 2^3P_1 \quad 2^3P_2$$

$$n=3 \quad T^{2\,0-} \otimes T_3^1 = \left(T_3^{0-} + T_3^{1-} + T_3^{2-}\right) \otimes T_3^1 =$$

$$= \left(T_3^{0-} \otimes T_3^1\right) + \left(T_3^{1-} \otimes T_3^1\right) + \left(T_3^{2-} \otimes T_3^1\right) =$$

$$= T_-^1 + \qquad 3\,^3S_1$$

$$+ T_-^0 + T_-^1 + T_-^2 \qquad 3\,^3P_0 \quad 3\,^3P_1 \quad 3\,^3P_2$$

$$+ T_-^1 + T_-^2 + T_-^3 \qquad 3\,^3D_1 \quad 3\,^3D_2 \quad 3\,^3D_3$$

$n=4$ . . . .

Hasonlóan az előző esethez, itt az alulra irt - index a pályafüggvény antiszimmetrikus voltára utal.

A szintek jelölése: $n\,^{2s+1}B_j$

Itt $2s+1$ a spinfüggvények terének dimenziója, a B betü pedig $l=0$ esetén S, $l=1$ esetén P, $l=2$ esetén D stb. l az $\mathcal{L}^2 \otimes \mathcal{L}^2$ -beli O_3 előállitás indexe, j a pálya $\otimes$ spin függvénytérben értelmezett O_3 előállitás indexe, az elfajulás mértéke $2j+1$ amiről az O_3 szimmetria elrontásával lehet meggyőződni kisérletileg. A kisérleti tapasztalat valóban egyezik a fenti eredményekkel.

ÖSSZEFOGLALÁS

Dolgozatunkban egyrészt a hidrogénatom problémájával foglalkoztunk csoportelméleti alapon. Ismételten megállapitottuk, hogy O_4-nek mely irreducibilis reprezentációihoz tartoznak energiaszintek, ezenkivül azonban meg is adtuk annak okát, hogy miért éppen ezek a reprezentációk szerepelnek. Rámutattunk arra, hogy O_4-nek azok és csak azok az előállitásai lépnek fel, melyek részreprezentációi az $\mathcal{L}^2(S^3)$ beli kvázireguláris előállitásának.

A továbbiakban annak alapján, hogy a héliumatom perturbálatlan Hamilton operátora az $O_4 \otimes O_4 \otimes S_2$ csoporttal szemben invariáns, illetve a perturbáció ezt a szimmetriát az $O_3 \otimes S_2$-re csökkenti kvalitative megadtuk a héliumatom spektrumát is.

Véleményünk szerint a hidrogénatom vizsgálatának általunk alkalmazott megközelitése, az a módszer, hogy egy végtelen dimenziós előállitás redukálásával jutottunk el az energiaspektrumhoz az elemi részek vizsgálatánál esetleg uj eredményeket is szolgáltathat majd.

- . -

Végezetül szeretnék köszönetet mondani dr. G i l d e F e r e n c tanszékvezető docensnek, aki számomra a probléma tanulmányozását javasolta és akivel munkám során értékes konzultációkat folytathattam.

IRODALOM

/1/ V.A. Fock, Zeitschrift für Physik 98, 145, 1935.

/2/ Györgyi G., Magyar Fizikai Folyóirat 15, 505, 1967.

/3/ Györgyi G., Magyar Fizikai Folyóirat 20, 163, 1972.

/4/ M. Bander - C. Itzykson, Rev.Mod.Phys. 38, 330, 1966.

/5/ G.W. Mackey, The Mathematical Foundations of Quantum Mechanics, Lecture Notes,1960.

/6/ G.W. Mackey, Induced Representations of Groups and Quantum Mechanics, Benjamin,1968.

/7/ N. Ja Vilenkin, Szpecialnije funkcii i tyeoria predsztavlenyij grupp, Nauka, Moszkva,1965.

/8/ A.H. Zemanian, Distribution Theory and Transform Analysis McGraw Hill,1965.

/9/ H. Weyl, The Classical Groups, Princeton, 1946.

/10/ E.P. Wigner, Group Theory, Academic Press, 1959.

TARTALOM