A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA

KÖZPONTI FIZIKAI KUTATÓ INTÉZETÉNEK

KÖZLEMÉNYEI

MELLÉKLET

VOL. 6. 7 NO. 5.

Györgyi Géza

AZ IMPULZUSMOMENTUM KVANTUMELMÉLETE ÉS A FORGÁSCSOPORT

BUDAPEST 1959.

Az impulzusmomentum kvantumelmélete
és a forgáscsoport

E füzet a Központi Fizikai Kutató Intézetben 1959. január 12. és március 2. között az impulzusmomentum kvantumelméletéről tartott szemináriumok anyagát tartalmazza. A szemináriumot az Atomfizikai Osztály kutatóinak kezdeményezésére és kívánságára tartottuk azzal a céllal, hogy kellő alapot adjunk a magreakcióknál fellépő szögeloszlási, szögkorrelációs és polarizációs jelenségek korszerü elméletének tanulmányozásához.

A szerző számos részletet átvett - legtöbbnyire átdolgozott ill. javitott formában - "Relativitás- és kvantumelméleti problémák vizsgálata csoportelméleti módszerekkel" cimen a Felsőoktatási Jegyzetellátó kiadásában 1957-ben megjelent egyetemi jegyzetéből. A legnagyobb segitséget a szeminárium anyagának összeállitásánál Lubarszkij "Tyeorija grupp i jijó primenyenyie v fizike", valamint Edmonds "Angular Momentum in Quantum Mechanics" c. könyve jelentette.

Szeretném köszönetemet kifejezni Jánossy Lajos professzor urnak azért, hogy e szeminárium anyagának a jelen formában való közreadására ösztönzött. Köszönet illeti még Menyhárd Nórát, aki a kézirat elkészitésében nagy segitséget nyujtott, ezenfelül kidolgozta a Függelék C és D pontját.

Györgyi Géza

TARTALOMJEGYZÉK

Oldal

Függelék Oldal

1. Mozgásállandók a klasszikus mechanikában. A Hamilton-függvény forgásinvarianciája és az impulzusmomentum megmaradásának tétele

a. Mozgásállandók a klasszikus mechanikában. Egy klasszikus mechanikai rendszert az /általános/ koordináták és impulzusok, valamint az idő függvényeként megadott H Hamilton-függvénnyel jellemezhetünk. A következőkben az egyszerüség kedvéért egyetlen tömegpont esetével foglalkozunk. Jelöljük a tömegpont helyzetvektorát $\underline{r}$ -rel, impulzusát $\underline{p}$ -vel. Ekkor a Hamilton-függvény

$$H = H(\underline{r}, \underline{p}, t).$$

Képezzük az $\underline{r}$ helyzetvektortól és a $\underline{p}$ impulzustól függő $F(r,p)$ fizikai mennyiség teljes időszerinti deriváltját:

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial \underline{r}}\dot{\underline{r}} + \frac{\partial F}{\partial \underline{p}}\dot{\underline{p}} . \qquad /1.1/$$

Hamilton kanonikus egyenletei értelmében

$$\dot{\underline{r}} = \frac{\partial H}{\partial \underline{p}} \quad , \quad \dot{\underline{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \underline{r}} .$$

$\dot{\underline{r}}$ és $\dot{\underline{p}}$ e kifejezését /1.1/-be helyettesitve a

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial \underline{r}}\frac{\partial H}{\partial \underline{p}} - \frac{\partial F}{\partial \underline{p}}\cdot\frac{\partial H}{\partial \underline{r}} \equiv [F,H]_{kl} \qquad /1.2/$$

eredményre jutunk. Az /1.2/ képletünkkel definiált $[F,H]_{kl}$ szimbolum az F és H függvényekből megalkotott <u>klasszikus</u> Poisson-féle zárójeles kifejezés.

/1.2/ szerint <u>az F fizikai mennyiség akkor és csak akkor mozgásállandó, ha H -val képezett Poisson-féle zárójeles kifejezése eltünik.</u>

b. A Hamilton-függvény invarianciatulajdonságai és a megmaradási tételek. Ha a vizsgált tömegpont $\underline{r}$ helyzetvektora és $\underline{p}$ impulzusa helyett uj $\underline{r}'$, $\underline{p}'$ kanonikus változókat akarunk bevezetni, ugy az $\underline{r}$, $\underline{p}$ és az $\underline{r}'$, $\underline{p}'$ változók kapcsolatát kifejező egyenleteket a kanonikus transzformációk elmélete szerint egy W generátorfüggvény segitségével irhatjuk fel. Ha W-t az $\underline{r}$ és $\underline{p}'$ változók függvényének választjuk, ugy e kapcsolatot

$$\underline{p} = \frac{\partial W(\underline{r}, \underline{p}')}{\partial \underline{r}} , \quad \underline{r}' = \frac{\partial W(\underline{r}, \underline{p}')}{\partial \underline{p}'} \qquad /1.3/$$

adja meg. Az azonos transzformációnak nyilvánvalóan a $W_0 = \underline{r} \cdot \underline{p}'$ generátorfüggvény felel meg. Foglalkozzunk most olyan kanonikus transzformációkkal, amelyek az azonos transzformációtól infinitezimálisan különböznek. Ezek generátorfüggvénye

$$W(\underline{r}, \underline{p}') = \underline{r} \cdot \underline{p}' + \sum_i G_i(\underline{r}, \underline{p}') \delta\alpha_i \qquad /1.4/$$

alaku. A $\delta\alpha_i$ mennyiségek az infinitezimális kanonikus transzformáció paraméterei; ezekről feltesszük, hogy függetlenek egymástól. A G_i függvények a kanonikus transzformáció infinitezimális generátorai. Ezekre fennáll:

$$\frac{\partial W}{\partial \alpha_i} = G_i .$$

Az /1.4/ generátorfüggvény választása esetén az $\underline{r}$, $\underline{p}$ és $\underline{r}'$, $\underline{p}'$ változók kapcsolata /1.3/ értelmében

$$\underline{r}' - \underline{r} \equiv \delta \underline{r} = \sum_i \frac{\partial G_i}{\partial \underline{p}} \delta\alpha_i , \qquad /1.5a/$$

$$\underline{p}' - \underline{p} \equiv \delta \underline{p} = -\sum_i \frac{\partial G_i}{\partial \underline{r}} \delta\alpha_i . \qquad /1.5b/$$

Itt megjegyezzük, hogy miután a transzformáció infinitezimális és igy $\underline{p}'$ és $\underline{p}$ elsőrendü kicsinyben különböznek egymástól, az /1.4/ generátorfüggvény második tagjában, mely maga is elsőrendü kicsiny, $\underline{p}'$-t $\underline{p}$ -vel helyettesithetjük: $G_i(\underline{r},\underline{p}')\approx G_i(\underline{r},\underline{p})$ -t irhatunk. Ennek megfelelően irtunk /1.5a/-ban $\partial/\partial\underline{p}'$ helyett $\partial/\partial\underline{p}$ -t.

Hogyan változik meg az $F(\underline{r},\underline{p})$ fizikai mennyiség az /1.5/ kanonikus transzformáció eredményeként? /1.5/ felhasználásával F megváltozását igy irhatjuk:

$$\delta F=\frac{\partial F}{\partial\underline{r}}\delta\underline{r}+\frac{\partial F}{\partial\underline{p}}\delta\underline{p}=\sum_i\left(\frac{\partial F}{\partial\underline{r}}\frac{\partial G_i}{\partial\underline{p}}-\frac{\partial F}{\partial\underline{p}}\frac{\partial G_i}{\partial\underline{r}}\right)\delta\alpha_i=\sum_i[F,G_i]_{kl}\delta\alpha_i\,.$$

Válasszuk most F -et a Hamilton-függvénnyel egyenlőnek:

$$\delta H=\sum_i[H,G_i]_{kl}\delta\alpha_i\,.$$

A Hamilton-függvénynek az /1.4/ generátorfüggvénnyel megadott kanonikus transzformáció eredményeként bekövetkező megváltozása arányos H -nak és a transzformáció infinitezimális generátorainak Poisson-féle zárójeles kifejezéseivel. Másrészről a $-[H,G_i]_{kl}=[G_i,H]_{kl}$ zárójeles kifejezés /1.2/ szerint a dG_i/dt időszerinti deriválttal egyezik meg. Ennek alapján kimondhatjuk a következő tételt:

Ha valamely klasszikus mechanikai rendszer H Hamilton-függvénye az /1.4/ generátorfüggvénnyel megadott kanonikus transzformáció alkalmazásakor változatlan marad: $\delta H=0$, ugy a transzformáció G_i infinitezimális generátorai mozgásállandók.

Tételünk azt mutatja, hogy a Hamilton-függvénynek infinitezimális kanonikus transzformációkkal szembeni invariancia-tulajdonságai és a rendszer mozgásállandói között szoros kapcsolat van.

c. A Hamilton-függvény forgásinvarianciája és az impulzusmomentum megmaradásának tétele. Vizsgáljuk meg most a

$$W=\underline{r}\cdot\underline{p}'+\underline{r}\times\underline{p}'\cdot\delta\underline{\alpha}\approx\underline{r}\cdot\underline{p}'+\underline{r}\times\underline{p}\cdot\delta\underline{\alpha}\qquad /1.6/$$

generátorfüggvénnyel leirt kanonikus transzformációt.
A transzformáció három paramétere a $\delta\underline{\alpha}$ infinitezimális vektor három komponense. A megfelelő három infinitezi-

mális generátor pedig a tömegpont $\underline{L}=\underline{r}\times\underline{p}$ impulzusmomentumának három komponense. A vektoralgebra ismert szabályait figyelembevéve írhatjuk:

$$\sum_i \frac{\partial L_i}{\partial \underline{p}}\delta\alpha_i = \frac{\partial}{\partial \underline{p}}\left[(\underline{r}\times\underline{p})\delta\underline{\alpha}\right] = \frac{\partial}{\partial \underline{p}}\left[(\delta\underline{\alpha}\times r)\underline{p}\right] = \delta\underline{\alpha}\times\underline{r},$$

$$\sum_i \frac{\partial L_i}{\partial \underline{r}}\delta\alpha_i = \frac{\partial}{\partial \underline{r}}\left[(\underline{r}\times\underline{p})\delta\underline{\alpha}\right] = -\frac{\partial}{\partial \underline{r}}\left[(\delta\underline{\alpha}\times\underline{p})\underline{r}\right] = -\delta\underline{\alpha}\times\underline{p}.$$

Ezt /1.5/-be irva kapjuk az /1.6/ generátorfüggvényhez tartozó kanonikus transzformáció képleteit:

$$\underline{r}' = \underline{r} + \delta\underline{\alpha}\times\underline{r}, \qquad /1.7a/$$

$$\underline{p}' = \underline{p} + \delta\underline{\alpha}\times\underline{p}. \qquad /1.7b/$$

Ezek a vizsgált mechanikai rendszer $\delta\underline{\alpha}$ forgásvektorú infinitezimális elforgatását jelentik.

Tegyük fel most, hogy az /1.7/ infinitezimális forgatás során a Hamilton-függvény nem változik meg: $\delta H=0$. /Egy zárt rendszer Hamilton-függvényének forgással szembeni invarianciája a tér egy alapvető szimmetriatulajdonságának, az <u>izotrópiának</u>, más szóval <u>a különböző térirányok egyenértéküségének</u> folyománya. Valamely mechanikai rendszer forgatása ugyanis egyszerüen a rendszer egyes pontjait jellemző helyzetvektorok <u>irányának</u> megváltozását jelenti, egymáshoz viszonyitott helyzetük megváltozása nélkül./ A b.pontban kimondott tétel értelmében abból, hogy az infinitezimális forgatás esetén $\delta H=0$ következik, hogy a kanonikus transzformáció

$$\frac{\partial W}{\partial \underline{\alpha}} = \underline{r}\times\underline{p}$$

infinitezimális generátora, vagyis a tömegpont $\underline{L}$ impulzusmomentuma, állandó a mozgás folyamán:

$$\frac{d\underline{L}}{dt} = 0.$$

<u>Háromdimenziós terünk alapvető szimmetriatulajdonsága: az izotrópia, tehát az impulzusmomentum megmaradásának tételét vonja maga után.</u>

2. Az impulzusmomentum a kvantummechanikában. A pályamomentum és a spin

a. A Hamilton-operátor invarianciatulajdonságai és a megmaradási tételek a kvantummechanikában. A kvantummechanikában minden fizikai mennyiséghez egy hermitikus operátort rendelünk. Az Ω hermitikus operátort valamely $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_p, \dots$ teljes függvényrendszerre vonatkoztatott $(\psi_m, \Omega\psi_n)$ matrixával jellemezhetjük. Ha e matrix átlós alaku: $(\psi_m, \Omega\psi_n) = \delta_{mn}\omega_m$, ugy a ψ_p függvények az Ω operátor sajátfüggvényei, az ω_m átlós matrixelemek az Ω operátor sajátértékei. Valamely fizikai mennyiség lehetséges értékeit a hozzárendelt operátor sajátértékei adják meg.

Alkalmazzuk most a ψ_p függvényekre az azonos transzformációtól infinitezimálisan különböző

$$U = 1 + \sum_i I_i \delta\alpha_i \qquad /2.1/$$

unitér transzformációt: $\psi_p' = U\psi_p$. Itt a

$$\frac{\partial U}{\partial \alpha_i} = I_i$$

operátorok az unitér transzformáció infinitezimális operátorai. Az U unitér voltát kifejező $U^+ = U^{-1}$, $1 + \sum_i I_i^+ \delta\alpha_i = 1 - \sum_i I_i \delta\alpha_i$ egyenletből következik, hogy az I_i infinitezimális operátorok antihermitikusak:

$$I_i^+ = -I_i. \qquad /2.2/$$

A /2.1/ unitér transzformáció alkalmazásának eredményeképpen a ψ_p függvények megváltozása:

$$\psi_p' - \psi_p \equiv \delta\psi_p = \sum_i I_i \delta\alpha_i \psi_p. \qquad /2.3/$$

Hogyan változik meg a $(\psi_m, \Omega\psi_n)$ matrixelem a /2.1/ unitér transzformáció eredményeképpen? /2.3/ és /2.2/ felhasználásával $(\psi_m, \Omega\psi_n)$ megváltozását igy irhatjuk:

$$\delta(\Psi_m, \Omega\Psi_n) = (\delta\Psi_m, \Omega\Psi_n) + (\Psi_m, \Omega\delta\Psi_n) =$$

$$= \sum_i \left[(I_i\Psi_m, \Omega\Psi_n) + (\Psi_m, \Omega I_i \Psi_n) \right] \delta\alpha_i =$$

$$= \sum_i \left[-(\Psi_m, I_i \Omega \Psi_n) + (\Psi_m, \Omega I_i \Psi_n) \right] \delta\alpha_i =$$

$$= \sum_i (\Psi_m, [\Omega, I_i] \Psi_n) \delta\alpha_i . \qquad /2.4/$$

Itt $[\Omega, I_i]$ a kvantummechanikai zárójeles kifejezés, amely az $\Omega I_i - I_i \Omega$ kommutátor jelölésére szolgál. Válasszuk /2.4/-ben Ω -t a H Hamilton-operátorral egyenlőnek:

$$\delta(\Psi_m, H\Psi_n) = \sum_i (\Psi_m, [H, I_i] \Psi_n) \delta\alpha_i . \qquad /2.5/$$

Vegyük most tekintetbe, hogy a kvantummechanika szerint egy időtől explicite nem függő Ω operátor matrixának időszerinti deriváltja:

$$\frac{d}{dt} (\Psi_m, \Omega\Psi_n) = \frac{i}{\hbar} (\Psi_m, [H, \Omega] \Psi_n) . \qquad /2.6/$$

/2.5/-ből leolvashatjuk, hogyha a Hamilton-operátor matrixa a /2.1/ unitér transzformáció alkalmazásakor nem változik meg, ugy H -nak az I_i infinitezimális operátorokkal képezett kommutátora zérus: $[H, I_i] = 0$. /2.6/ alapján ez azt jelenti, hogy az I_i operátor matrixa nem változik az időben, vagyis mozgásállandó. Ennek alapján kimondhatjuk a következő tételt:

Ha valamely kvantummechanikai rendszer H Hamilton-operátorának matrixa a /2.1/ unitér transzformáció alkalmazásakor változatlan marad: $\delta(\Psi_m, H\Psi_n) = 0$, ugy a transzformáció I_i infinitezimális operátorainak matrixai mozgásállandók.

Megjegyezzük, hogy ha a /2.3/ unitér transzformáció a Hamilton-operátor matrixát változatlanul hagyja, s igy /2.5/ értelmében $[H, I_i]=0$, ugy ha a

$$H\Psi_p = E_p \Psi_p \qquad /2.7/$$

Schrődinger-féle energiasajátértékben szereplő Ψ_p sajátfüggvényre alkalmazzuk a /2.1/ unitér operátort, a kapott $\Psi'_p = (1+\sum_i I_i \delta\alpha_i)\Psi_p$ ugyancsak H -nak az E_p sajátértékhez tartozó sajátfüggvénye lesz. Valóban: ha /2.7/-re /2.1/-et alkalmazzuk és $[H, I_i]=0$-t felhasználjuk, a

$$H(1+\sum_i I_i \delta\alpha_i)\Psi_p = E_p(1+\sum_i I_i \delta\alpha_i)\Psi_p, \qquad /2.8/$$

$$H\Psi'_p = E_p \Psi'_p$$

eredményre jutunk.

Megforditva: abból, hogy a /2.7/ Schrödinger-féle energiasajátértékegyenlet Ψ_p sajátfüggvényeiből a /2.1/ transzformáció alkalmazásával kapott Ψ'_p függvények is eleget tesznek a /2.7/-tel azonos alaku /2.8/ sajátértékegyenletnek, következik, hogy az I_i infinitezimális operátorok H -val képezett kommutátora eltünik: $[H, I_i]=0$, s igy I_i matrixa mozgásállandó. Tételünknek igy a következő alakot is adhatjuk:

Ha valamely kvantummechanikai rendszer /2.7/ energiasajátértékegyenletének az E_p energiasajátértékhez tartozó Ψ_p sajátfüggvényéből a /2.1/ transzformáció alkalmazásával kapott Ψ'_p függvény ugyancsak sajátfüggvénye H -nak az E_p sajátérték mellett - röviden szólva: ha a Schrödinger-egyenlet alakja a /2.1/ transzformáció alkalmazásakor változatlan marad - ugy a transzformáció I_i infinitezimális operátorainak matrixai mozgásállandók.

b. A pályamomentum. Hogyan változik meg egy skaláris (spin-nélküli részecskét leiró) $\varphi(r)$ sajátfüggvény, ha a részecskéhez rendelt anyaghullámteret egy $\delta\underline{\alpha}$ forgásvektorral jellemzett infinitezimális forgatásnak vetjük alá? A forgatás eredményeképpen az $\underline{r}$ helyzetvektoru pontban azt a függvényértéket találjuk, amely a forgatás előtt az $\underline{r}-\delta\underline{\alpha}\times r$ ponthoz tartozott. Az anyaghullámteret a forgatás után leiró φ' függvény értéke az $\underline{r}$ pontban eszerint:

$$\varphi'(\underline{r})=\varphi(\underline{r}-\delta\underline{\alpha}\times\underline{r})=\varphi(\underline{r})-\delta\underline{\alpha}\times\underline{r}\,\mathrm{grad}\,\varphi(\underline{r})=$$
$$=(1-\delta\underline{\alpha}\cdot r\times\mathrm{grad})\varphi(\underline{r}). \qquad /2.9/$$

Minthogy az $\underline{r}\times\mathrm{grad}$ operátor antihermitikus, /2,9/ egy /2.1/ tipusu infinitezimális unitér transzformációt ir le. A transzformáció operátora

$$U^{(\underline{r})}=1-\delta\underline{\alpha}\cdot r\times\mathrm{grad}\,. \qquad /2.10/$$

Az $I_i^{(\underline{r})}$ infinitezimális operátorok az $\underline{r}$ helyzetvektor és a $-i\hbar\,\mathrm{grad}$ impulzusoperátor vektorsorozataként definiált

$$\underline{L}=\frac{\hbar}{i}\,\underline{r}\times\mathrm{grad} \qquad /2.11/$$

pályamomentum-operátor $1/i\hbar$ -szorosának komponensei:

$$\frac{dU^{(\underline{r})}}{d\underline{\alpha}}\equiv\underline{I}^{(\underline{r})}=-r\times\mathrm{grad},$$
$$\underline{L}=i\hbar I^{(\underline{r})}. \qquad /2.12/$$

Az előző pontban bebizonyitott tétel értelmében <u>ha az anyaghullámtér forgatását leiró /2.10/ unitér transzformáció nem változtatja meg a Schrödinger-féle energiasajátértékegyenlet alakját, ugy az $I^{(\underline{r})}$ infinitezimális operátortól csak egy állandó szorzóban különböző $\underline{L}$ pályamomentum matrixa (speciálisan a pályamomentum sajátértékei) állandók a mozgás folyamán.</u>

A forgásinvariancia és az impulzusmomentum megmaradási tétele között a kvantummechanikában is szoros kapcsolatot találtunk.

<u>c. A spin.</u> A tapasztalat arra tanit bennünket, hogy az impulzusmomentum operátorának /2.11/ alakja, amely azt a helyzetvektor és az impulzusoperátor vektorszorzataként definiálja, az impulzusmomentum-operátornak nem a

legáltalánosabb kifejezése. A /2.11/ definíció alapján az impulzusmomentum komponenseinek lehetséges értékeire $\hbar$ egészszámú többszörösei adódnak. Ugyanakkor például az elektron sajátimpulzusmomentumának, spinjének komponensei a tapasztalat szerint a $\pm\frac{\hbar}{2}$ értékeket vehetik fel. Ezért kívánatos a tul szük kereteket nyujtó /2.11/ képlet helyett az impulzusmomentum számára olyan definiciót találni, amely a mindenkor egészszámú pályamomentum mellett a spinre is kiterjeszkedik.

Az elektron spinjéhez Pauli nyomán az

$$\underline{S}\left[\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix},\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\right] \qquad /2.13/$$

vektoroperátort rendeljük. $\underline{S}$ kielégíti az

$$\underline{S}\times\underline{S}=i\hbar\,\underline{S} \qquad /2.14/$$

összefüggést.

Vizsgáljuk meg most, hogy miképpen transzformálódik az elektron ξ spinfüggvénye az anyaghullámtér $\delta\underline{\alpha}$ forgásvektoru elforgatásakor? A ξ spinfüggvény transzformációs törvényét abból a feltételből határozzuk meg, hogy a spinvektorhoz rendelt $\underline{S}$ operátor várható értékének vektorként kell transzformálódnia, vagyis a helyzetvektor transzformációját megadó /1.7a/ alatti $\delta\underline{r}=\underline{r}'-\underline{r}=\delta\underline{\alpha}\times\underline{r}$ képlet analógiájára:

$$\delta(\xi,\underline{S}\xi)=\delta\underline{\alpha}\times(\xi,\underline{S}\xi). \qquad /2.15/$$

Megmutatjuk, hogy ez a feltétel teljesül, ha a spinfüggvényeket a forgatáskor a

$$\delta\xi=\xi'-\xi=\frac{1}{i\hbar}\,\delta\underline{\alpha}\,\underline{S}\,\xi \qquad /2.16/$$

törvény szerint transzformáljuk. Ekkor ugyanis

$$\begin{aligned}\delta(\xi,\underline{S}\xi)&=(\delta\xi,\underline{S}\xi)+(\xi,\underline{S}\,\delta\xi)=\\&=-\frac{1}{i\hbar}(\delta\underline{\alpha}\,\underline{S}\xi,\underline{S}\xi)+\frac{1}{i\hbar}(\xi,\underline{S}(\delta\underline{\alpha}\,\underline{S})\xi)= \qquad /2.17/\\&=\frac{1}{i\hbar}(\xi,[\underline{S}(\delta\underline{\alpha}\,\underline{S})-(\delta\underline{\alpha}\,\underline{S})\underline{S}]\xi).\end{aligned}$$

Itt felhasználtuk a /2.13/ alatti $\underline{S}$ operátor hermitikus voltát. A kétszeres vektorszorzat kifejtési tételét és a /2.14/ összefüggést tekintetbevéve irhatjuk:

$$\underline{S}(\delta\underline{\alpha}\,\underline{S})-(\delta\underline{\alpha}\,\underline{S})\underline{S}=\delta\underline{\alpha}\times(\underline{S}\times\underline{S})=i\hbar\,\delta\underline{\alpha}\times\underline{S}.$$

Ezt /2.17/-be irva valóban kivánt /2.15/ eredményt kapjuk. Ezzel beláttuk, hogy a ξ spinfüggvényt forgatáskor a /2.16/ alatt megadott

$$\xi'=\left(1+\frac{1}{i\hbar}\delta\underline{\alpha}\,\underline{S}\right)\xi \qquad /2.18/$$

törvény szerint kell transzformálnunk. Képezzük most a /2.18/ forgástranszformációt leiró

$$U^{(s)}=1+\frac{1}{i\hbar}\delta\underline{\alpha}\,\underline{S} \qquad /2.19/$$

unitér operátorból az infinitezimális operátor vektorát:

$$\frac{dU^{(s)}}{d\underline{\alpha}}\equiv\underline{I}^{(s)}=\frac{1}{i\hbar}\underline{S}.$$

Innen az elektronspin operátorára az

$$\underline{S}=i\hbar\,\underline{I}^{(s)} \qquad /2.20/$$

eredmény adódik.

<u>d. Az impulzusmomentum definiciója a kvantummechanikában.</u> A spin-nélküli részecske impulzusmomentuma és a spin esetének áttekintése után foglalkozzunk egy spinnel rendelkező részecske teljes impulzusmomentumával.

Egy spinnel rendelkező részecske $\psi(\underline{r},s)$ állapotfüggvénye a legegyszerübb esetben egy spin-nélküli részecske mozgását leiró $\varphi(\underline{r})$ függvény, valamint a $\xi(s)$ spinfüggvény szorzataként állitható elő:

$$\psi(\underline{r},s)=\varphi(\underline{r})\,\xi(s), \qquad /2.21/$$

az általános esetben pedig ilyen tagok összege alakjában irható fel:

$$\psi(\underline{r},s)=\sum_r\varphi(\underline{r})\,\xi_r(s). \qquad /2.22/$$

A /2.21/ szorzatban /vagy az ilyen szorzatok /2.22/ tipusu összegében/ φ-t /2.9/, ξ -t /2.18/ szerint kell transzformálnunk. /2.11/-et figyelembevéve /2.21/ transzformáltja igy irható:

$$\psi'(\underline{r},s)=\varphi'(\underline{r})\xi'(s)=\left(1-\frac{i}{\hbar}\delta\alpha\underline{L}\right)\varphi(\underline{r})\left(1-\frac{i}{\hbar}\delta\alpha\underline{S}\right)\xi(s)=$$

$$=\left[1+\delta\alpha\frac{1}{i\hbar}(\underline{L}+\underline{S})\right]\psi(\underline{r},s). \qquad /2.23/$$

A $\psi(\underline{r},s)$ teljes állapotfüggvény transzformációját infinitezimális forgás alkalmazása esetén eszerint az

$$U=1+\delta\alpha\frac{1}{i\hbar}(\underline{L}+\underline{S}) \qquad /2.24/$$

unitér operátor szabja meg. Az U unitér transzformációból származtatott infinitezimális forgásoperátor:

$$\frac{dU}{d\alpha}=\underline{I}=\underline{I}^{(r)}+\underline{I}^{(s)}=\frac{1}{i\hbar}(\underline{L}+\underline{S})$$

a pályamomentum $\underline{L}$ és a spin $\underline{S}$ operátora összegének $1/i\hbar$ -szorosa. A <u>teljes impulzusmomentum</u> $\underline{J}=\underline{L}+\underline{S}$ operátorát tehát ugy kapjuk, hogy az $\underline{I}$ infinitezimális forgásoperátort $i\hbar$ -sal megszorozzuk:

$$\underline{J}=\underline{L}+\underline{S}=i\hbar\underline{I}. \qquad /2.25/$$

A most kapott eredmény alapján a következő alakban adhatjuk meg az impulzusmomentum általános kvantummechanikai definicióját:

<u>Valamely kvantummechanikai rendszer impulzusmomentuma az állapotfüggvény infinitezimális forgásoperátorának $i\hbar$ -szorosa.</u>

/2.12/, /2.20/ és /2.25/ képleteink azt mutatják, hogy ez a definició a helyzetvektor és az impulzusvektorszorzataként definiált pályamomentum mellett a spinre is kiterjed, s igy a megkivánt általánossággal rendelkezik.

Megjegyezzük, hogy ha a vizsgált részecske pályamomentuma és spinje között kölcsönhatás uralkodik, ugy a helyzetvektor /valamint az impulzus és az ezekből képezhető vektorok/ elforgatását leiró /2.10/ unitér transzformáció egymagában nem hagyja változatlanul a Schrödinger-féle energiasajátértékegyenlet alakját. Ilyen esetekben a zárt rendszer Schrödinger-egyenlete csak a helyzetvektor, illetve a spin elforgatását leiró /2.10/ és /2.18/ unitér transzformációk egyidejü alkalmazása esetén marad változatlan. Ennek megfelelően ilyenkor a pályamomentum, illetve a spin matrixa nem mozgásállandó, csak a $\underline{J} = \underline{L} + \underline{S}$ teljes momentumé.

3. Az impulzusmomentum és a forgáscsoport

a. Az állapotfüggvények forgástranszformációja és az impulzusmomentum. Az impulzusmomentumnak az előző szakaszban megfogalmazott általános definiciója szerint az impulzusmomentum operátora az állapotfüggvény infinitezimális forgásoperátorának $i\hbar$ -szorosa. Ennek megfelelően egy kvantummechanikai rendszer ψ állapotfüggvényének megváltozását infinitezimális forgatáskor a következő lineáris transzformáció adja meg:

$$\delta\psi = \psi' - \psi = \frac{1}{i\hbar}\,\delta\underline{\alpha}\,\underline{J}\,\psi\,. \qquad /3.1/$$

Az állapotfüggvény megváltozását az szabja meg, hogy miképpen hat a ψ állapotfüggvényre az impulzusmomentum $\underline{J}$ operátora. Ha ψ impulzus-momentum-sajátfüggvény, ugy az infinitezimális forgatás esetére érvényes transzformációs törvénye attól függ, hogy mekkora a ψ által leirt állapot impulzusmomentuma: az impulzusmomentum értéke szorosan összefügg az infinitezimális forgástranszformációs törvény alakjával. Ha felkutatjuk az állapotfüggvény infinitezimális forgástranszformációs törvényének lehetséges alakjait, ugy egyszersmind az impulzusmomentumnak a kvantummechanika által megengedett, lehetséges értékeit is megismerjük.

Az alkalmazásokra való tekintettel nem elégedhetünk meg az infinitezimális forgástranszformációs törvények tanulmányozásával: fizikai problémák tárgyalásánál szükségünk lesz az állapotfüggvény megváltozását tetszésszerinti forgatás esetén megadó transzformációs törvényre. Az infinitezimális forgástranszformációk vizsgálata ennek meghatározása szempontjából is fundamentális jelentőségünek fog bizonyulni. Látni fogjuk ugyanis, hogy az állapotfüggvény megváltozását tetszésszerinti forgatás esetén megadó törvényt az infinitezimális forgásoperátorok egyértelmüen meghatározzák.

b. A forgáscsoport. Csoporttulajdonságok. A háromdimenziós térben végzett forgatások összessége egy sajátos matematikai strukturát: csoportot alkot. A forgatások, valamint az állapotfüggvények forgástranszformációinak tanulmányozása során ezért előnyösen használhatjuk fel a csoportok elméletében kialakult fogalmakat.

Csoportnak az $a, b, \ldots, i, \ldots$ elemek olyan C halmazát nevezzük, amely rendelkezik a következő un. csoporttulajdonságokkal: (i) bármely két i, j eleméhez hozzá van rendelve C -nek valamely p eleme. A hozzárendelést az $ij = p$ módon jelöljük és csoportmüveletnek, vagy egyszerübben szorzásnak nevezzük.

(ii) A csoportmüveletre érvényes az $(ij)k = i(jk)$ asszociativ törvény.

(iii) C -nek van olyan e eleme, amelyre $ep = pe = p$ teljesül. Itt p C-nek tetszésszerinti eleme lehet. e -t egységelemnek nevezzük.

(iiii) C minden p eleméhez találhatunk C -ben egy p^{-1} elemet, amelyre $p^{-1}p = pp^{-1} = e$ teljesül, p^{-1}-et p inverzének nevezzük.

Könnyü meggyőződni arról, hogy a háromdimenziós térben végzett forgatások rendelkeznek az (i) – (iiii) csoporttulajdonságok mindegyikével és igy valóban csoportot alkotnak. A forgatásokat az alábbiakban a forgásvektorral fogjuk jellemezni. Az $\underline{\alpha}$ forgásvektor állása a forgástengelyt, nagysága a forgás szögét adja meg.

Csoportműveletnek, szorzásnak a forgások körében két forgás egymásutáni elvégzését tekintjük. A merev testek mechanikájából ismeretes /l.Budó: Mechanika/, hogy egy meghatározott pontjában rögzitett merev test tetszésszerinti helyzetváltozása felfogható, mint egy meghatározott tengely körüli elfordulás. Nyilvánvaló ebből, hogy két egymás után végzett tengelykörüli forgatás helyettesithető egyetlen tengelykörüli forgatással, mely az előbbiekkel azonos helyzetváltozást eredményez. Két forgatás szorzata tehát ugyancsak forgatás. A háromdimenziós térbeli forgatások összessége eszerint rendelkezik az (i) csoporttulajdonsággal.

A (ii) tulajdonság az asszociativitás fennállását mutatja, hogy három egymás után végrehajtott forgatás esetében ugyanarra az eredményre jutunk, akár az első és a második, akár a második és a harmadik forgatást helyettesitjük egyetlen forgatással.

A (iii) tulajdonsággal a forgatások halmaza nyilvánvalóan rendelkezik: a zérus szögü forgatás az egységelem minden megkivánt tulajdonságát mutatja.

Ha egy $\underline{\alpha}$ forgásvektoru forgatást követően vagy megelőzően egy $-\underline{\alpha}$ forgásvektoru forgatást végzünk, a zérus szögü forgatást, vagyis az egységelemet kapjuk. Az $\underline{\alpha}$ forgásvektoru forgatás inverze tehát a $-\underline{\alpha}$ forgásvektoru forgatás. Ezzel a (iiii) csoporttulajdonság fennállásáról is meggyőződhetünk.

A háromdimenziós térben végzett forgatások összessége, minthogy mind a négy csoporttulajdonsággal rendelkezik, csoportot alkot; ezt röviden R -rel jelöljük és forgáscsoportnak nevezzük.

Megemlitjük, hogy egy csoport elemeinek olyan részhalmazát, amely maga is rendelkezik az (i)–(iiii) csoporttulajdonságokkal (ugyanazon csoportmüveletet alapulvéve), alcsoportnak nevezzük.

c. Szimmetriacsoportok. A szimmetriacsoportok ábrázolása a sajátfüggvények terében. Vessük alá most a

$$H\psi_{n\lambda_a} = E_n \psi_{n\lambda_a} \qquad /3.2/$$

Schrödinger-féle energiasajátértékegyenlet $\psi_{n\lambda_a}$ sajátfüggvényeivel leirt anyaghullámteret (a helyzetvektort és a spint egyaránt) egy $\underline{\alpha}$ forgásvektoru forgásnak. Ha a szemügyre vett rendszer zárt, ugy a forgatás eredményeként kapott $\psi_{n\lambda_a}[\underline{\alpha}]$ függvény /3.2/-vel azonos alaku sajátértékegyenletnek tesz eleget:

$$H\psi_{n\lambda_a}[\underline{\alpha}] = E_n \psi_{n\lambda_a}[\underline{\alpha}]. \qquad /3.3/$$

Tételezzük fel most, hogy a /3.2/ egyenlet E_n sajátértéke p -szeresen elfajult, vagyis /3.2/-nek adott E_n mellett p számu lineárisan független sajátfüggvénye van:

$$\psi_{n\lambda_1}, \psi_{n\lambda_2}, \dots, \psi_{n\lambda_p}. \qquad /3.4/$$

/Itt λ_i a sajátfüggvény jellemzéséhez az energiát meghatározó n kvantumszámon kivül szükséges kvantumszámok összefoglaló jele./ Mindenkor elérhetjük, hogy a /3.4/ függvények ortonormáltak legyenek:

$$(\psi_{n\lambda_i}, \psi_{n\lambda_j}) = \delta_{\lambda_i}\delta_{\lambda_j}. \qquad /3.5/$$

A /3.4/ függvények a /3.2/ egyenlet teljes megoldásrendszerét alkotják: a /3.2/ egyenlet tetszésszerinti megoldása előállitható, mint a /3.4/ függvények lineáris kombinációja. Eszerint a /3,3/ egyenletben szereplő, $\underline{\alpha}$ forgásvektoru forgatás eredményeként kapott $\psi_{n\lambda_a}[\underline{\alpha}]$ függvényt is felirhatjuk a /3.4/ alatti $\psi_{n\lambda_i}$ -k lineáris kombinációjaként:

$$\psi_{n\lambda_a}[\underline{\alpha}] = \sum_{i=1}^{p} \psi_{n\lambda_i} u_{\lambda_i \lambda_a}(\underline{\alpha}) \,. \qquad /3.6/$$

Itt $u_{\lambda_i \lambda_a}(\underline{\alpha})$ a /3.4/ sajátfüggvényeknek az $\underline{\alpha}$ forgásvektoru forgatáshoz tartozó transzformációját leiró matrix. Követeljük meg, hogy a $\psi_{n\lambda_a}[\underline{\alpha}]$ függvények – a /3.4/ függvényekhez hasonlóan – ortonormált rendszert alkossanak:

$$(\psi_{n\lambda_a}[\underline{\alpha}], \psi_{n\lambda_b}[\underline{\alpha}]) = \delta_{\lambda_a \lambda_b} \,.$$

/3.6/-ot felhasználva irhatjuk:

$$(\psi_{n\lambda_a}[\underline{\alpha}], \psi_{n\lambda_b}[\underline{\alpha}]) = \sum_{i=1}^{p} \sum_{j=1}^{p} (\psi_{n\lambda_i}, \psi_{n\lambda_j}) u^{*}_{\lambda_i \lambda_a}(\underline{\alpha}) u_{\lambda_j \lambda_b}(\underline{\alpha}) =$$

$$= \sum_{i=1}^{p} \sum_{j=1}^{p} \delta_{\lambda_i \lambda_j} u^{+}_{\lambda_a \lambda_i}(\underline{\alpha}) u_{\lambda_j \lambda_b}(\underline{\alpha}) = \sum_{i=1}^{p} u^{+}_{\lambda_a \lambda_i}(\underline{\alpha}) u_{\lambda_i \lambda_b}(\underline{\alpha}) = \delta_{\lambda_a \lambda_b} \,,$$

vagy tömör szimbolikus jelöléssel:

$$U^{+}(\underline{\alpha}) U(\underline{\alpha}) = 1 \,. \qquad /3.7/$$

A forgástranszformációt leiró $U(\underline{\alpha}) = [u_{\lambda_j \lambda_k}(\underline{\alpha})]$ matrixnak tehát unitérnak kell lennie.

Alkalmazzunk most az $\underline{\alpha}$ forgásvektoru forgatást követően egy $\underline{\beta}$ forgásvektoru forgatást az anyaghullámtérre. Az $\underline{\alpha}$ és a $\underline{\beta}$ forgásvektoru forgatások – amelyeket $F(\underline{\alpha})$-val illetve $F(\underline{\beta})$-val jelölünk – egymásutánját helyettesitsük egyetlen eredő forgatással. Ennek forgásvektorát jelöljük $\underline{\gamma}$ -val, a forgatást magát pedig $F(\underline{\gamma})$ -val. Minthogy az előző szakaszban mondottak értelmében két forgatás szorzatának az egymásutáni alkalmazásuk eredményeként előálló forgatást tekintjük, felirhatjuk:

$$F(\underline{\gamma}) = F(\underline{\beta}) F(\underline{\alpha}) \,. \qquad /3.8/$$

Az anyaghullámtérre alkalmazott /3.8/ forgatásnak a sajátfüggvényekre való hatását kétféleképpen is felirhatjuk. A $\underline{\gamma}$ forgásvektoru forgatás során a sajátfüggvényeknek /3.6/ mintájára a

$$\psi_{n\lambda_a}[\underline{\gamma}]=\sum_{j=1}^{p}\psi_{n\lambda_j}u_{\lambda_j\lambda_a}(\underline{\gamma}) \qquad /3.9/$$

törvény szerint kell transzformálódniok. Ugyanezt az eredményt kell azonban akkor is kapnunk, ha a /3.6/ képletében a $\psi_{n\lambda_i}$ függvényeket $\underline{\beta}$ forgásvektoru elforgatásnak vetjük alá, vagyis a

$$\psi_{n\lambda_i}[\underline{\beta}]=\sum_{j=1}^{p}\psi_{n\lambda_j}u_{\lambda_j\lambda_i}(\underline{\beta})$$

függvényekkel helyettesitjük:

$$\psi_{n\lambda_a}[\underline{\gamma}]=\sum_{i=1}^{p}\sum_{j=1}^{p}\psi_{n\lambda_j}u_{\lambda_j\lambda_i}(\underline{\beta})u_{\lambda_i\lambda_a}(\underline{\alpha}). \qquad /3.10/$$

/3.9/ és /3.10/ összehasonlitásának eredményeként az

$$u_{\lambda_j\lambda_a}(\underline{\gamma})=\sum_{i=1}^{p}u_{\lambda_j\lambda_i}(\underline{\beta})u_{\lambda_i\lambda_a}(\underline{\alpha}),$$

vagy a /3.7/ alatt is alkalmazott tömör szimbolikus irásmódot alkalmazva, az

$$U(\underline{\gamma})=U(\underline{\beta})U(\underline{\alpha}) \qquad /3.11/$$

összefüggésre jutunk.

A fentiekben felhasználtuk, hogy ha az anyaghullámtérre a forgáscsoport valamely elemét alkalmazzuk, vagyis egy forgatást hajtunk végre, ugy a zárt rendszerre érvényes /3.2/[x] marad. Az olyan csoportot,amelynek minden eleme változatlanul hagyja a /3.2/ egyenlet alakját, a Schrödinger-féle energiasajátértékegyenlet szimmetriacsoportjának nevezzük.

Feltételezve, hogy a forgáscsoport a /3.2/ egyenlet szimmetriacsoportja, fenti meggondolásaink során azt találtuk (l./3.6/), hogy a /3.4/ sajátfüggvényekből $\underline{\alpha}$ forgásvektoru elforgatás utján adódó $\psi_{n\lambda_a}[\underline{\alpha}]$ sajátfüggvények előállithatók az eredeti /3.4/ függvények lineáris transzformáltjaként. Ilyen módon minden $F(\underline{\alpha})$ forgatáshoz egy lineáris transzformáció $U(\underline{\alpha})=[u_{\lambda_j\lambda_k}(\underline{\alpha})]$ matrixa van hozzárendelve; ennek elemei a /3.4/ függvé-

x/ Schrödinger-féle energiasajátértékegyenlet alakja változatlan nyekre $\underline{\alpha}$ forgásvektoru forgatás esetén alkalmazandó lineáris transzformáció együtthatói.

/3.8/ és /3.11/ alapján az

$$F(\underline{\alpha}) \longrightarrow U(\underline{\alpha}) \qquad /3.12/$$

hozzárendelés figyelemreméltó sajátosságát ismerhetjük fel. /3.11/ azt mutatja, hogy ha az $F(\underline{\beta})$ ill. $F(\underline{\alpha})$ forgásokhoz rendelt $U(\underline{\beta})$ ill. $U(\underline{\alpha})$ matrixokat összeszorozzuk, eredményül az $F(\underline{\beta})$ és $F(\underline{\alpha})$ forgások szorzatához, az $F(\underline{\gamma})=F(\underline{\beta})F(\underline{\alpha})$ -hoz rendelt $U(\underline{\gamma})$ matrixot kapjuk. A /3.12/ hozzárendelésre tehát jellemző, hogy ha

$$\left.\begin{array}{l} F(\underline{\alpha}) \longrightarrow U(\underline{\alpha}) \quad \text{és} \quad F(\underline{\beta}) \longrightarrow U(\underline{\beta}), \\ \text{ugy} \quad F(\underline{\beta})F(\underline{\alpha}) \longrightarrow U(\underline{\beta})U(\underline{\alpha}) \,. \end{array}\right\} \qquad /3.13/$$

A /3.13/ tulajdonsággal rendelkező hozzárendelésről azt mondjuk, hogy <u>müvelettartó</u>.

Ha egy C csoport $a, b, \ldots$ minden eleméhez az $A, B, \ldots$ matrixok halmazának egy-egy elemét rendeljük:

$$a \longrightarrow A, \ b \longrightarrow B, \ \ldots \qquad /3.14/$$

s ez a hozzárendelés müvelettartó, vagyis ha

$$\begin{array}{l} a \longrightarrow A, \quad \text{és} \quad b \longrightarrow B, \\ \text{ugy} \quad ab \longrightarrow AB, \end{array} \qquad /3.15/$$

akkor azt mondjuk, hogy a matrixokkal a C csoport <u>ábrázolását</u> létesitettük. Az $A, B, \ldots$ matrixok sorainak ill. oszlopainak száma az ábrázolás <u>dimenziója.</u>

Megjegyezzük, hogy a /3.14/ hozzárendelés müvelettartó jellegére vonatkozó /3.15/ követelményünk maga után vonja, hogy a hozzárendelésben szereplő $A, B, \ldots$ matrixok maguk is csoportot alkotnak.

Valóban: /3.15/ azt mutatja, hogy a C csoport elemeihez rendelt matrixok összessége bármely két A, B matrixszal együtt azok szorzatát, AB -t is tartalmazza. Az (i) csoporttulajdonság tehát teljesül. A matrixszorzásra az asszociativitás törvénye tudvalevőleg érvényes. Ez azt jelenti, hogy a (ii) csoporttulajdonság is teljesül. Ha a tetszésszerinti p csoportelemhez a P, az e egység-elemhez pedig az E matrixot rendeljük, ugy a C csoportra fennálló (iii) csoporttulajdonságot kifejező $ep=pe=p$ feltételből a müvelettartás /3.15/ követelményét figyelembevéve $EP=PE=P$ következik, ami azt mutatja, hogy az $A, B, \ldots$ matrixok között is találunk egységelemet. Ezzel a (iii) csoporttulajdonság fennállásáról is meggyőződtünk. Abból, hogy a C csoportra fennálló (iiii) csoporttulajdonság szerint minden p csoportelemhez található egy a $p^{-1}p=pp^{-1}=e$ feltételnek eleget tevő p^{-1} inverz elem, valamint abból, hogy a /3.14/ hozzárendelés müvelettartó, következik, hogy a p^{-1} elemhez rendelt P^{-1} matrix eleget tesz a $P^{-1}P=PP^{-1}=E$ feltételnek. Igy a matrixokra a (iiii) csoporttulajdonság is teljesül. Megállapithatjuk tehát, hogy ha valamely csoport minden eleméhez egy-egy matrixot rendelünk müvelettartó módon, ugy a matrixok csoportot alkotnak.

Fenti eredményünket a most bevezetett kifejezésmóddal élve igy fogalmazhatjuk meg: Ha a forgáscsoport a Schrödinger-egyenletnek szimmetriacsoportja, ugy az adott energiasajátértékhez tartozó sajátfüggvényeket az anyaghullámtér elforgatásakor a forgáscsoport egy ábrázolásának matrixai transzformálják.

A /3.4/ sajátfüggvények /3.6/ forgástranszformációját meghatározó $U(\underline{\alpha})$ matrixoknak /3.7/ szerint unitérnek kell lenniök. Az olyan ábrázolást, melynek minden matrixa unitér, unitér ábrázolásnak nevezzük.

A fentiekben a forgáscsoportnál követett gondolatmenethez hasonlóan meg lehet mutatni, hogy ha a Schrödinger-egyenlet tetszésszerinti szimmetriacsoportjának pl. az azonos részecskék felcserélései vagy az anyaghullámtér eltolásai csoportjának elemeit alkalmazzuk, a sajátfüggvények mindenkor lineárisan transzformálódnak.

A transzformációk matrixai a szóbanforgó szimmetriacsoport ábrázolását létesitik. A sajátfüggvények ortonormáltságának megkövetelése esetén a szimmetriacsoportok ábrázolásai mindenkor unitérek.

d. Reducibilis és irreducibilis ábrázolások. Tegyük fel most, hogy a /3.4/ sajátfüggvények a Hamilton-operátor /3.2/ alatti

$$H\psi_{nr\varkappa_t} = E_n \psi_{nr\varkappa_t} \qquad /3.16/$$

sajátértékegyenlete mellett az $\underline{J}$ impulzusmomentumoperátor négyzetének

$$\underline{J}^2 \psi_{nr\varkappa_t} = \eta_r \psi_{nr\varkappa_t} \qquad /3.17/$$

sajátértékegyenletét is kielégiti. /Itt a korábban az egyetlen λ_i szimbolummal jelölt kvantumszámokból az impulzusmomentum-négyzet η_r sajátértékét jellemző r kvantumszámot külön feltüntettük; a sajátfüggvények jellemzéséhez n és r mellett szükséges kvantumszámokat összefoglalóan $\varkappa_t$ jelöli./ Ha n rögzitett értékéhez η_r -nek s számu értéke tartozik, ugy a /3.4/ sajátfüggvényeket most a következőképpen rendezhetjük:

$$\psi_{n1\alpha_1}, \ldots, \psi_{n1\alpha_{q_1}}; \psi_{n2\beta_1}, \ldots, \psi_{n2\beta_{q_2}}; \ldots; \psi_{nr\varkappa_1}, \ldots, \psi_{nr\varkappa_{q_r}}; \ldots \qquad /3.18/$$

$$\ldots; \psi_{ns\xi_1}, \ldots, \psi_{ns\xi_{q_s}}$$

$$(q_1 + q_2 + \ldots + q_s = p) .$$

Zárt rendszer esetén a forgáscsoport /3.16/ mellett a /3.17/ sajátértékegyenletnek is szimmetriacsoportja. Forgatáskor tehát ezen egyenlet adott η_r-hez tartozó sajátfüggvényei lineáris transzformációt szenvednek.

$$\psi_{nr\varkappa_k}[\underline{\alpha}] = \sum_{l=1}^{q_r} \psi_{nr\varkappa_l} u^{(r)}_{\varkappa_l \varkappa_k}(\underline{\alpha}) . \qquad /3.19/$$

Vezessük be most az

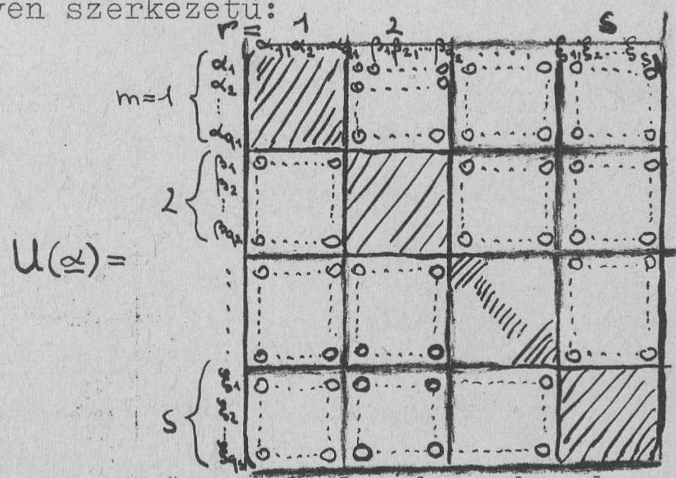
$$u_{m\varkappa_l, r\varkappa_k}(\underline{\alpha}) = \delta_{mr} u^{(r)}_{\varkappa_l \varkappa_k}(\underline{\alpha}) \qquad /3.20/$$

jelölést. Ezt felhasználva /3.19/ a

$$\psi_{nr\varkappa_k}[\underline{\alpha}] = \sum_{m=1}^{s}\sum_{l=1}^{q_m} \psi_{nm\varkappa_l}\, u_{m\varkappa_l, r\varkappa_k}(\underline{\alpha}) \qquad /3.21/$$

alakba irható. /3.20/ a /3.16/ alatti Schrödinger-egyenlet adott n -hez tartozó sajátfüggvényeinek forgástranszformációját irja le, s igy - eltekintve a λ_i összefoglaló jelzésnek a részletesebb $r, \varkappa_l$ jelöléssel való helyettesitésétől - azonos a /3.6/ képlettel. Az $(u_{m\varkappa_l, r\varkappa_k}(\underline{\alpha}))$ matrix tehát megegyezik $U(\underline{\alpha})$-val.

Abban az esetben, ha $s>1$, vagyis ha adott E_n sajátértékhez az impulzusmomentum négyzetének egynél több sajátértéke tartozik, /3.20/-ból az $U(\underline{\alpha})$ matrix érdekes sajátságát olvashatjuk le: az $u_{m\varkappa_l, r\varkappa_k}(\underline{\alpha})$ matrixelemek csak $m=r$ esetén különbözhetnek zérustól. Az $U(\underline{\alpha})$ matrix tehát ilyen szerkezetü:



/3.22/

Zérustól különböző matrixelemek csak a bevonalazott részeken találhatók, a vonalazatlan részen minden matrixelem zérus.

Ha valamely unitér ábrázolás minden matrixa az alapul választott függvényrendszer alkalmas választása utján a /3.22/ alakra hozható, ugy az ábrázolást reducibilisnek, ellenkező esetben irreducibilisnek nevezzük.

Valamely reducibilis ábrázolásra jellemző, hogy az alapul vett függvénytér egyes különböző altereibe eső függvényeket az ábrázolás egyetlen matrixa sem kombinálja egymással, az ábrázolás matrixainak alkalmazása során az egyes alterek "önmagukba transzformálódnak". A függvénytér, amelyben reducibilis ábrázolást létesitettünk, a szokásos kifejezéssel élve "invariáns alterekre esik szét". A fent példaként bemutatott esetben az egyes invariáns altereket az η_r sajátérték különböző értékeihez tartozó, egymástól /3.18/ alatt pontosvesszővel elválasztott sajátfüggvények "feszitik ki".

e. A forgáscsoport ábrázolásait meghatározó Lie-féle karakterisztikus differenciálegyenletek. Az infinitezimális operátorok csererelációi. Vegyünk szemügyre egy a

$$\psi_1, \psi_2, \ldots \tag{3.23}$$

alapfüggvényekkel kifeszitett függvényteret, amelyben a forgáscsoport ábrázolását létesitettük. A /3.23/ függvények eszerint minden $F(\alpha)$ forgatás alkalmazásakor a

$$\psi_j[\alpha] = \sum_i \psi_i u_{ij}(\alpha) \tag{3.24}$$

módon lineárisan transzformálódnak. Legyen

$$\psi = \sum_j c_j \psi_j \tag{3.25}$$

a vizsgált függvénytérben egy tetszésszerinti /Fouriersorba fejthető/ függvény. Ha itt a ψ_j függvényeket az $F(\alpha)$ forgatáshoz rendelt /3.24/ lineáris transzformációnak vetjük alá, ugy eredményül a

$$\psi[\alpha] = \sum_j c_j \psi_j[\alpha] = \sum_i \sum_j u_{ij}(\alpha) c_j \psi_i = \sum_i c_i[\alpha] \psi_i$$

függvényt kapjuk. A ψ forgástranszformációja eredményeként adódó $\psi[\alpha]$ Fourier-együtthatóit a ψ függvény c_j együtthatóiból egy $U(\alpha)$ lineáris operátor matrixának alkalmazása szolgáltatja:

$$c_i[\alpha] = \sum_j u_{ij}(\alpha) c_j .$$

Az elforgatott $\psi(\alpha)$ függvény az eredeti ψ-ből eszerint az $U(\alpha)$ lineáris operátor alkalmazásával kapható:

$$\psi[\alpha] = U(\alpha)\psi \tag{3.26}$$

Természetesen az $F(\underline{\alpha})$ forgások és az $U(\underline{\alpha})$ operátorok között éppen ugy fennáll egy müvelettartó megfeleltetés, mint a forgások és az $U(\underline{\alpha})$ operátor $(U_{ij}(\underline{\alpha}))$ matrix-előállitása között. Ezért a /3.26/ alatti $U(\underline{\alpha})$ operátorokról is azt mondjuk, hogy a forgáscsoport ábrázolását létesitik.

Minthogy az $F(\underline{\alpha})$ forgatás inverze az ugyanazon forgástengely körüli, ellentétes értelmü, α szögü $F(-\underline{\alpha})$ forgatás, az ezekhez rendelt $U(\underline{\alpha})$ és $U(-\underline{\alpha})$ operátoroknak is egymás inverzeinek kell lennie:

$$U(-\underline{\alpha}) = U^{-1}(\underline{\alpha}) \,, \quad U(\underline{\alpha})U(-\underline{\alpha}) = 1 \,.$$

Ezt felhasználva felirhatjuk a következő azonosságot:

$$U(\underline{\beta}) = U(\underline{\beta})U(\underline{\alpha})U(-\underline{\alpha}) \,. \qquad /3.27/$$

Jelöljük az $F(\underline{\beta})$ és $F(\underline{\alpha})$ forgatások szorzatának, az $F(\underline{\gamma}) = F(\underline{\beta})F(\underline{\alpha})$ forgatásnak forgásvektorát $\underline{\gamma}$ -val. Tekintettel az U operátorokkal létesitett ábrázolás müvelettartó jellegére, a megfelelő operátorok között fenn kell állnia a megfelelő

$$U(\underline{\beta})U(\underline{\alpha}) = U(\underline{\gamma})$$

egyenletnek. Ezt /3.27/-be irva

$$U(\underline{\beta}) = U(\underline{\gamma})U(-\underline{\alpha}) \qquad /3.28/$$

adódik. Az $F(\underline{\beta})F(\underline{\alpha})$ szorzat $\underline{\gamma}$ forgásvektora természetesen $\underline{\alpha}$ és $\underline{\beta}$ függvénye:

$$\underline{\gamma} = \underline{\gamma}(\underline{\alpha}, \underline{\beta}) \,. \qquad /3.29/$$

Differenciáljuk most /3.28/-at a $\underline{\beta}$ forgásvektor β_i komponense szerint, /3.29/-et figyelembevéve:

$$\frac{\partial U(\underline{\beta})}{\partial \beta_i} = \sum_{r=1}^{3} \frac{\partial U(\underline{\gamma})}{\partial \gamma_r} \frac{\partial \gamma_r}{\partial \beta_i} U(-\alpha) \,. \qquad /3.30/$$

Legyen most $\gamma=0$. Ekkor természetesen $\beta=-\alpha$ kell, hogy legyen. Jelöljük a $(\partial \gamma_r/\partial \beta_i)_{\beta=-\alpha}$ derivált tenzort $S_{ri}(\beta)$-val; $S_{ri}(\beta)$ nyilván független az ábrázolást létesitő $\mathcal{U}$ operátorok alakjától, azt a forgáscsoport szerkezete meghatározza. Vegyük ezenkivül tekintetbe, hogy $(\partial \mathcal{U}(\gamma)/\partial \gamma_r)_{\gamma=0}$ az ábrázolás I_r infinitezimális operátora. /3.30/ tehát igy irható:

$$\frac{\partial \mathcal{U}(\beta)}{\partial \beta_i}=\sum_{r=1}^{3} I_r S_{ri}(\beta)\mathcal{U}(\beta). \qquad /3.31/$$

Ezek a differenciálegyenletek az ábrázolás Lie-féle karakterisztikus differenciálegyenletei. Minthogy S_{ri} az ábrázolás konkrét alakjától függetlenül adott, /3.31/ felirásához csak az ábrázolás I_r infinitezimális operátorait kell ismernünk. Tekintettel arra, hogy a /3.31/ differenciálegyenletek a kezdeti feltétel $\mathcal{U}(0)=1$ megadása esetén az $\mathcal{U}(\beta)$ operátort egyértelmüen meghatározzák, megállapithatjuk: A forgáscsoport valamely ábrázolását az I_r infinitezimális operátorok megadásával egyértelmüen jellemezhetjük.

Az I_r infinitezimális operátorok azonban nem adhatók meg tetszésünk szerint: azoknak meghatározott integrálhatósági feltételeket kell kielégiteniök. A /3.31/ egyenlet megoldásaként adódó $\mathcal{U}(\beta)$ operátor különböző sorrendben képezett vegyes parciális deriváltjainak meg kell egyezniök egymással:

$$\frac{\partial^2 \mathcal{U}(\beta)}{\partial \beta_j \partial \beta_i}=\frac{\partial^2 \mathcal{U}(\beta)}{\partial \beta_i \partial \beta_j}.$$

/3.31/-et ide behelyettesitve a

$$\sum_{r=1}^{3} I_r\left(\frac{\partial S_{ri}}{\partial \beta_j}-\frac{\partial S_{rj}}{\partial \beta_i}\right)\mathcal{U}(\beta)=\sum_{r=1}^{3} I_r\left(\frac{\partial \mathcal{U}(\beta)}{\partial \beta_i}S_{rj}-\frac{\partial \mathcal{U}(\beta)}{\partial \beta_j}S_{ri}\right)$$

eredményre jutunk. Irjunk itt $\beta=0$-t. Ekkor $(S_{ri})_{\beta=0}=$ $=(\partial \gamma_r/\partial \beta_i)_{\alpha=\beta=0}=\delta_{ri}$, a $(\partial \mathcal{U}(\beta)/\partial \beta_i)_{\beta=0}$ deriváltak pedig az I_i infinitezimális operátorokkal egyeznek meg. Tekintetbe véve, hogy $U(0)=1$ egyenletünk az $\varepsilon_{jir} = (\partial S_{ri}/\partial\beta_j - \partial S_{rj}/\partial\beta_i)_{\beta=0}$ jelölés bevezetésével az

$$I_j I_i - I_i I_j = \sum_{r=1}^{3} \varepsilon_{jir} I_r \qquad /3.32/$$

alakot ölti. Az ε_{jir} együtthatók kiszámitásához nem kell meghatároznunk a definiciós képletben szereplő S_{ri} tenzort. Elég annyit tudnunk, az ε_{jir} együtthatók, éppugy, mint az S_{ri} tenzor, amelyből azokat származtattuk, függetlenek a szemügyre vett ábrázolástól; értékük tetszésszerinti ábrázolás esetén mindig ugyanakkora. Célszerü ezért az ε_{jir} együtthatókat egy egyszerü ábrázolás explicit felhasználásával meghatározni. A forgáscsoport legismertebb /de nem a legegyszerübb!/ ábrázolása az $\underline{r}$ helyzetvektor x_1, x_2, x_3 derékszögü komponensei által kifeszitett függvénytérben létesitett ábrázolás. E függvénytér függvényei a

$$\varphi(\underline{r}) = a_1 x_1 + a_2 x_2 + a_3 x_3 \equiv \underline{a}\cdot\underline{r}$$

alakba irhatók és az a_1, a_2, a_3 kifejtési együttható megadásával jellemezhetők. A $\varphi(\underline{r})$ függvény /szemléletesen: a függvény nivófelületei/ $\delta\underline{\alpha}$ forgásvektoru infinitezimális elforgatása esetén a térnek abba a rögzitett pontjába, amelyhez az elforgatás előtt a $\varphi(\underline{r})$ függvényérték tartozott, az elforgatás eredményeképpen a

$$\varphi(\underline{r} - \delta\underline{\alpha}\times\underline{r}) = \underline{a}\cdot(\underline{r} - \delta\underline{\alpha}\times\underline{r}) = (\underline{a} + \delta\underline{\alpha}\times\underline{a})\cdot\underline{r}$$

függvényérték kerül. Az elforgatás eredményeként adódó

$$\varphi'(\underline{r}) = \underline{a}'\cdot\underline{r} = (\underline{a} + \delta\underline{\alpha}\times\underline{a})\cdot\underline{r}$$

függvény a_1', a_2', a_3' kifejtési együtthatóit az

$$\begin{aligned} a_1' &= a_1 - \delta\alpha_3 a_2 + \delta\alpha_2 a_3 \\ a_2' &= \delta\alpha_3 a_1 + a_2 - \delta\alpha_1 a_3 \\ a_3' &= -\delta\alpha_2 a_1 + \delta\alpha_1 a_2 + a_3 , \end{aligned} \qquad /3.33/$$

összefoglalva az

$$\underline{a}' = (1 + \delta\underline{\alpha}\times)\underline{a} = (1 + (\delta\underline{\alpha}\,\underline{I}))\underline{a} \qquad /3.34/$$

infinitezimális transzformáció szolgáltatja. Ha /3.33/-at az

$$\begin{pmatrix} a_1' \\ a_2' \\ a_3' \end{pmatrix} = \left[\begin{pmatrix} 1&0&0 \\ 0&1&0 \\ 0&0&1 \end{pmatrix} + \delta\alpha_1 \begin{pmatrix} 0&0&0 \\ 0&0&-1 \\ 0&1&0 \end{pmatrix} + \delta\alpha_2 \begin{pmatrix} 0&0&1 \\ 0&0&0 \\ -1&0&0 \end{pmatrix} + \delta\alpha_3 \begin{pmatrix} 0&-1&0 \\ 1&0&0 \\ 0&0&0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}$$

alakba irjuk, majd ezt /3.34/-gyel összehasonlitjuk, a $\underline{I}$ infinitezimális operátor-vektor komponenseire az

$$I_1 = \begin{pmatrix} 0&0&0 \\ 0&0&-1 \\ 0&1&0 \end{pmatrix}, \quad I_2 = \begin{pmatrix} 0&0&1 \\ 0&0&0 \\ -1&0&0 \end{pmatrix}, \quad I_3 = \begin{pmatrix} 0&-1&0 \\ 1&0&0 \\ 0&0&0 \end{pmatrix}.$$

eredményt kapjuk. Közvetlen számitással meggyőződhetünk arról, hogy ezek az

$$I_1 I_2 - I_2 I_1 = I_3, \quad I_2 I_3 - I_3 I_2 = I_1, \quad I_3 I_1 - I_1 I_3 = I_2$$

felcserélési relációknak tesznek eleget. A /3.32/-ben szereplő ε_{jir} együtthatók értéke eszerint: $\varepsilon_{123} = \varepsilon_{231} = \varepsilon_{312} = -\varepsilon_{213} = -\varepsilon_{321} = -\varepsilon_{132} = 1$, a többi zérus. ε_{jir} -et egy mondatban igy jellemezhetjük:

<u>$\varepsilon_{123} = 1$ és ε_{jir} minden indexpárban antiszimmetrikus.</u>

Az általános definició értelmében valamely kvantummechanikai rendszer $\underline{J}$ impulzusmomentumoperátora az állapotfüggvény $\underline{I}$ infinitezimális forgásoperátorának $i\hbar$ -szorosa:

$$\underline{J} = i\hbar \underline{I}.$$

/3.32/ eredményünk lehetővé teszi, hogy nyomban felirjuk az impulzusmomentum csererelációit:

$$J_j J_i - J_i J_j = i\hbar \sum_{r=1}^{3} \varepsilon_{jir} J_r,$$

vagy vektoralakba tömöritve:

$$\underline{J} \times \underline{J} = i\hbar \underline{J}. \qquad /3.35/$$

*

A következőkben az impulzusmomentumot a $\hbar$ Planck-állandó egységül választásával fogjuk megadni. Ennek megfelelően mindenütt, ahol eddig $\underline{J}$ -t irtunk, a jövőben $\hbar\underline{J}$-t fogunk irni. /3.35/ például az uj egységgel kifejezve a

$$\underline{J}\times\underline{J} = i\,\underline{J} \qquad /3.36/$$

alakot ölti. A $\underline{J}$ impulzusmomentum-operátor és az $\underline{I}$ infinitezimális forgásoperátor kapcsolata most

$$\underline{J} = i\,\underline{I}\,. \qquad /3.37/$$

f. A csererelációk megoldása. Az impulzusmomentum lehetséges értékei. A következőkben célunk az, hogy megkeressük az I_r infinitezimális forgásoperátorok /3.32/ csererelációinak megoldásait: Választ akarunk adni arra a kérdésre, hogy az I_r infinitezimális operátorok matrixai számára milyen kifejezéseket enged meg /3.32/?

A /3.32/ csererelációk összes megoldásait felkutatva egyszersmind módunk nyilik a forgáscsoport összes lehetséges ábrázolásának megszerkesztésére. A 24. oldalon megismert tétel szerint ugyanis valamely ábrázolást infinitezimális operátorainak megadása egyértelmüen jellemez.

Tekintettel az infinitezimális operátorok és az impulzusmomentum /3.37/ kapcsolatára, az I_r operátorok összes, a csererelációk által megengedett matrix előállitását meghatározva egyszersmind az impulzusmomentum-operátor lehetséges matrixelőállitásait is megismerjük.

Az I_1, I_2, I_3 operátorok helyett előnyösebbnek fog bizonyulni a

$$J_+ = iI_1 - I_2 = J_1 + iJ_2\,, \quad J_- = iI_1 + I_2 = J_1 - iJ_2\,, \quad J_3 = iI_3 \qquad /3.38/$$

operátorok matrixainak felkutatása. /3.32/-ből következik, hogy a /3.38/ operátorok felcserélési relációi:

$$J_3 J_+ - J_+ J_3 = J_+ ,$$ /3.38a/

$$J_3 J_- - J_- J_3 = J_- ,$$ /3.38b/

$$J_+ J_- - J_- J_+ = 2 J_3 .$$ /3.38c/

Vegyük most szemügyre a forgáscsoportnak egy végesdimenziós függvénytérben létesitett unitér ábrázolását. A 3. koordinátatengely körüli forgatások a forgáscsoportnak egy felcserélhető alcsoportját alkotják. /A "felcserélhető" jelző azt jelenti, hogy a szóbanforgó csoport bármely két eleme felcserélhető./ A vizsgált ábrázolásnak azok a matrixai, amelyek a 3. tengely körüli $\underline{\alpha}(0,0,\alpha)$ forgásvektoru $F_3(\alpha)$ forgatásokat ábrázolják, az ábrázolás müvelettartó tulajdonságából következően felcserélhető matrixok kell, hogy legyenek. Meg lehet mutatni, hogy felcserélhető unitér matrixok rendszere mindenkor egyszerre átlós alakra hozható. Azt, hogy felcserélhető hermitikus matrixok egyszerre átlós alakot ölthetnek, már tudjuk a kvantummechanikából. Származtassunk le ezért az $F_3(\alpha)$ forgatásokhoz az ábrázolásban rendelt $U_3(\alpha)$ unitér matrixok mindegyikéből egy hermitikus matrixot a következő módon:

$$H(\alpha) = i \log U_3(\alpha).$$ /3.39/

Figyelembe véve az $U_3(\alpha)$ unitér voltát kifejező $U_3^+(\alpha) = U_3^{-1}(\alpha)$ relációt, könnyü belátni, hogy $H(\alpha)$ valóban hermitikus:

$$H^+(\alpha) = -i \log U_3^+(\alpha) = -i \log U_3^{-1}(\alpha) = i \log U_3(\alpha) = H(\alpha).$$

/3.39/-ből kifejezhetjük $U_3(\alpha)$ -t:

$$U_3(\alpha) = e^{-iH(\alpha)} .$$ /3.40/

Abból, hogy az $F_3(\alpha)$ forgatásokat ábrázoló $U_3(\alpha)$ matrixok felcserélhetők, következik, hogy a belőlük származtatott /3.39/ hermitikus matrixok ugyancsak felcserélhetők és igy egyszerre átlós alakra hozhatók. Ha a közös sajátfüggvényrendszer függvényeit ω_m-mel jelöljük, ugy a $H(\alpha)$ operátorok sajátértékegyenlete:

$$H(\alpha)\omega_m = \mu_m(\alpha)\,\omega_m .$$

Itt $\mu_m(\alpha)$ a $H(\alpha)$ operátor sajátértéke. Az ω_m függvények természetesen a /3.40/ $U_3(\alpha)$ operátornak is sajátfüggvényei az $\exp(-i\mu_m(\alpha))$ sajátértékek mellett:

$$U_3(\alpha)\omega_m = e^{-i\mu_m(\alpha)}\omega_m . \qquad /3.41/$$

A $H(\alpha)$ operátorok ω_m sajátfüggvényeinek teljes rendszerét alapfüggvényrendszernek választva a /3.41/ egyenletből látható módon az $U_3(\alpha)$ operátorok matrixa is átlós alakot ölt. A /3.41/-ben szereplő $\mu_m(\alpha)$ függvényt az ábrázolás müvelettartó jellegére vonatkozó követelményből határozhatjuk meg. A 3. tengely körüli α és β szögü forgások szorzata egy $\alpha+\beta$ szögü forgás. Ennek megfelelően az $U_3(\alpha)$ matrixokra fenn kell hogy álljon az

$$U_3(\alpha)U_3(\beta) = U_3(\alpha+\beta)$$

egyenlet. A /3.41/-ben szereplő sajátértékekre ebből az

$$e^{-i(\mu_m(\alpha)+\mu_m(\beta))} = e^{-i\mu_m(\alpha+\beta)}$$

feltételt kapjuk. A $\mu_m(\alpha)$ függvényre igy adódó

$$\mu_m(\alpha)+\mu_m(\beta) = \mu_m(\alpha+\beta)$$

egyenlet a lineáris függvények függvényegyenlete. $\mu_m(\alpha)$ -nak tehát arányosnak kell lennie α -val:

$$\mu_m(\alpha) = m\alpha .$$

Az ω_m függvények megváltozását a 3. tengely körüli α szögü forgatás esetén megadó /3.41/ képlet eszerint

$$U_3(\alpha)\omega_m = e^{-im\alpha}\omega_m . \qquad /3.41a/$$

E képlet felhasználásával felirhatjuk a 3. tengely körüli forgatáshoz tartozó infinitezimális operátor hatását megadó

$$I_3\omega_m = \left(\frac{\partial U_3(\alpha)}{\partial \alpha}\right)_{\alpha=0} \omega_m = -im\omega_m$$

képletet. ω_m tehát a $J_3 = i I_3$ operátor m sajátértékhez tartozó sajátfüggvénye:

$$J_3\omega_m = m\omega_m \,. \qquad /3.42/$$

Vizsgáljuk meg most a J_3 operátor hatását az ω_m -ből a J_+ , majd a J_- operátor alkalmazásával kapott függvényre. /3.38a-b/ és /3.42/ felhasználásával kapjuk:

$$J_3(J_+\omega_m) = J_+(J_3+1)\omega_m = (m+1)(J_+\omega_m), \qquad /3.43a/$$

$$J_3(J_-\omega_m) = J_-(J_3-1)\omega_m = (m-1)(J_-\omega_m). \qquad /3.43b/$$

Innen látható, hogy a /3.42/ sajátértékegyenlet ω_m megoldásából a $J_\pm$ operátor alkalmazásával J_3 -nak $m\pm 1$ sajátértékhez tartozó sajátfüggvényét kapjuk meg. J_+ ismételt alkalmazásával egy megadott ω_m -ből kiindulva m egyre nagyobb értékeihez jutunk el. Az m sajátértékek e sorozatának korlátosnak kell lennie, ellenkező esetben a szemügyre vett függvénytér végtelendimenziós volna, ellentétben feltevésünkkel. Jelöljük az m sajátértékek sorozatában a legnagyobb értéket j -vel. Erre teljesülnie kell a

$$J_+\omega_j = 0 \qquad /3.44/$$

feltételnek. Ha ugyanis /3.44/-gyel ellentétben $J_+\omega_j \neq 0$ volna, ugy /3.43a/ értelmében a függvény a J_3 operátor $m = j+1$ sajátértékhez tartozó sajátfüggvénye volna. Ez azonban nem lehetséges, miután j éppen az m sajátértékek sorozatának legnagyobb tagját jelenti. – A /3.44/ összefüggéssel definiált ω_j függvényből kiindulva /3.43b/ értelmében J_- ismételt alkalmazásával eljuthatunk rendre az $m = j-1, j-2, \ldots$ sajátértékekhez tartozó sajátfüggvényekhez:

$$\omega_{j-1} = J_- \omega_j \qquad m = j-1\text{-hez tartozik}, \qquad /3.45/$$

$$\omega_{j-2} = J_- \omega_{j-1} \qquad m = j-2\text{-höz tartozik, stb.}$$

A sajátfüggvények e sorozata egyszer véget kell, hogy érjen, hiszen feltételezésünk szerint a vizsgált függvénytér végesdimenziós.

Mutassuk ki most, hogy a J_+ operátor hatását a /3.45/ eljárással definiált ω_m függvényekre a következő képlet adja meg:

$$J_+ \omega_m = r_{m+1} \omega_{m+1}, \qquad /3.46/$$

ahol

$$r_{m+1} = j(j+1) - m(m+1). \qquad /3.46a/$$

A /3.46/ állitást teljes indukcióval bizonyitjuk be. /3.44/ azt mutatja, hogy $m=j$ esetén igaz az állitásunk a r_{j+1} együttható zérus értéke mellett. Tételezzük fel most, hogy a bizonyitandó /3.46/ egyenlet m valamely értékére fennáll. E feltételezés és a /3.38c/ csererelháció, valamint az $\omega_{m-1} = J_- \omega_m$ kapcsolat felhasználásával a

$$J_+ \omega_{m-1} = J_+ J_- \omega_m = (J_- J_+ + 2 J_3) \omega_m$$

eredményt kapjuk. Ha itt tekintetbe vesszük a /3.42/ sajátértékegyenletet, valamint a feltételezett /3.46/ egyenletet, a kivánt alaku

$$J_+ \omega_{m-1} = r_m \omega_m$$

összefüggésre jutunk, ahol

$$r_m = r_{m+1} + 2m. \qquad /3.47/$$

Meggondolásunk egy rekurziós relációt szolgáltatott r_m -re. Az $r_j = 0$ kezdeti feltétel mellett /3.47/ megoldása

$$r_{m+1} = j(j+1) - m(m+1) \qquad /3.48/$$

amint azt /3.46a/ alatt állitottuk. Tekintettel arra, hogy feltevésünk szerint a vizsgált függvénytér végesdimenziós, az m sajátértékek között kell lenni egy legkisebbnek, amelynél az ω_m sajátfüggvények /3.45/ sorozata végetér. Ez akkor következik be, ha ω_m még $\neq 0$, de $\omega_{m-1}=0$. Ekkor /3.46/ szerint $v_m=0$ kell, hogy legyen, ami /3.48/ szerint azt jelenti, hogy

$$j(j+1)-m(m+1)=0.$$

Ennek az m-ban másodfoku egyenletnek két megoldása $m=j+1$ és $m=-j$. Itt csak a második megoldás jöhet szóba: $j+1$ nem léphet fel az m sajátértékek sorozatában, hiszen feltevésünk szerint j az m sajátértékek között a legnagyobb. Eredményünk szerint tehát a J_3 operátor /3.45/ alatt definiált sajátfüggvényeihez tartozó sajátértékek sorozata

$$m=j, j-1, j-2, \dots, -j+2, -j+1, -j.$$

j-re azt a megkötöttséget kaptuk, hogy j-től $-j$-ig egészszámu lépésekkel el kell jutnunk. $j-(-j)=2j$ -nek tehát /$j\geq -j$ miatt nemnegativ/ egész számnak kell lennie:

$$j=0, \tfrac{1}{2}, 1, \tfrac{3}{2}, \dots$$

Vezessük be most az ω_m függvények helyett az állandó szorzóban különböző

$$\psi_m=\left[\frac{(j+m)!}{(j-m)!}\right]^{\frac{1}{2}}\omega_m \quad (m=j, j-1, \dots, -j) \qquad /3.49/$$

függvényeket. ψ_m-re a $J_\pm$ operátorok hatását a szimmetrikus

$$J_\pm\psi_m=\sqrt{j(j+1)-m(m\pm 1)}\,\psi_{m\pm 1} \qquad /3.50/$$

képletek adják meg. Természetesen ψ_m éppugy, mint ω_m, sajátfüggvénye J_3-nak az m sajátérték mellett:

$$J_3\psi_m=m\psi_m. \qquad /3.51/$$

/3.50/ és /3.51/ képleteink megadják a $J_\pm$ és J_3 operátorok hatását a $\psi_j, \psi_{j-1}, \dots, \psi_{-j}$ függvényekre, s igy természetesen a belőlük származtatható

$$I_1 = \frac{1}{2i}(J_+ + J_-),\ I_2 = -\frac{1}{2}(J_+ - J_-),\ I_3 = \frac{1}{i}J_3 \qquad /3.52/$$

infinitezimális operátorok hatását is meghatározzák.

A /3.49/ alatt definiált

$$\psi_j, \psi_{j-1}, \ldots, \psi_{-j+1}, \psi_{-j} \qquad /3.53/$$

függvények /3.51/ szerint a hermitikus J_3 operátor különböző sajátértékeihez tartozó sajátfüggvényei, és igy ortogonális függvényrendszert alkotnak. Ha pl. ψ_j -t normáltnak is választjuk, ugy /3.50/ biztositja a /3.53/ függvényrendszer összes többi függvényének normáltságát. Eszerint /3.53/ a szemügyre vett függvénytérben egy $2j+1$ dimenziós alteret kifeszitő ortonormált függvényrendszer.

/3.50/ és /3.51/ eredményeink, valamint a /3.52/ képlet figyelembe vételével könnyü meggyőződni arról, hogy ha az I_i infinitezimális operátorokat a /3.53/ függvények bármelyikére alkalmazzuk, a kapott eredmény mindenkor a /3.53/ függvények valamely lineáris kombinációja lesz. Infinitezimális forgatáskor tehát a /3.53/ függvényrendszer által kifeszitett függvénytér önmagába transzformálódik. Tekintettel arra, hogy a /3.31/ Lie-féle karakterisztikus differenciálegyenletek segitségével az infinitezimális operátorokból kiindulva tetszésszerinti forgatáshoz rendelt $U(\beta)$ operátor megszerkeszthető, megállapithatjuk, hogy a /3.53/ függvényrendszer által kifeszitett függvénytér nemcsak infinitezimális forgatás, hanem a háromdimenziós térben végzett tetszésszerinti elforgatás esetén is önmagába transzformálódik.

Azt találtuk tehát, hogy a szemügyre vett függvénytérnek a /3.53/ függvények által kifeszitett $2j+1$

dimenziós altere tetszésszerinti forgatással szemben invariáns függvénytér. Ebben tehát a forgáscsoport $2j+1$ dimenziós ábrázolása valósul meg. Az I_1, I_2, I_3 infinitezimális operátorok hatását megadó /3.52/, /3.50-51/ képletek a 25. oldalon mondottak értelmében ezt az ábrázolást egyértelmüen jellemzik. E képletekből kiindulva a /3.31/ Lie-féle karakterisztikus differenciálegyenletek segitségével az ábrázolás tetszésszerinti forgatáshoz rendelt matrixát meghatározhatjuk. A forgáscsoportnak a /3.52/, 3.50-51/ képletekkel definiált $2j+1$ dimenziós ábrázolását röviden a $D^{(j)}$ szimbolummal jelöljük.

Az infinitezimális elforgatás $\underline{I}$ operátora /2.11--12/ értelmében tetszésszerinti, az $\underline{r}$ helyzetvektortól függő $\varphi(\underline{r})$ skalárfüggvény esetére:

$$\underline{I} = -\underline{r} \times \mathrm{grad}\,.$$

Az I_1, I_2, I_3 infinitezimális operátorokból /3.38/ szerint képezett J_+, J_-, J_3 operátoroknak az $Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$ / l = egész/ gümbfüggvényekre való hatását a /3.50-51/ képletekkel azonos alaku

$$J_\pm Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = \sqrt{l(l+1)-m(m\pm1)}\; Y_{lm\pm1}(\vartheta,\varphi),$$

$$J_3 Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = m\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$$

képletek adják meg. [Lásd pl. Blohincev: A kvantummechanika alapjai. V.függelék, /32-34/.]

A fentebb mondottakat figyelembe véve, ebből következik, hogy az $Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$ $(m=l, l-1, \dots, -l)$ gömbfüggvények forgatáskor a forgáscsoport $D^{(l)}$ irreducibilis ábrázolása szerint transzformálódnak.

g. A forgáscsoport $D^{(j)}$ ábrázolásának tulajdonságai. A következőkben megmutatjuk, hogy a forgáscsoport $D^{(j)}$ ábrázolása irreducibilis ábrázolás. A 21. oldalon mondottak szerint egy csoport reducibilis ábrázolásának függvényterében mindenkor található olyan /valódi/ altér, amely bármely csoportelem alkalmazásakor önmagába transzformálódik /invariáns altér/. Olyan függvénytérben viszont, melyben a szóbanforgó csoportnak irreducibilis ábrázolása valósul meg, valódi invariáns alteret nem lehet találni.

Ha tehát kimutatjuk, hogy a /3.53/ függvényekkel kifeszitett $2j+1$ dimenziós T_{2j+1} függvénytérben nem található valódi invariáns altér, ugy ezzel egyszersmind igazoljuk, hogy a $D^{(j)}$ ábrázolás irreducibilis.

Tegyük fel most - a bizonyitandó állitással ellentétben -, hogy a $D^{(j)}$ ábrázolás reducibilis. T_{2j+1} -ben ekkor kell lennie egy $2j+1$-nél kisebb dimenziószámu T_n altérnek $(n<2j+1)$, amely minden forgatáskor önmagába transzformálódik. Vizsgáljuk meg, miképpen változnak meg a T_n altér vektorai a 3. koordinátatengely körüli forgatások alkalmából? A 28. oldalon mondottak értelmében e forgatásokat természetesen a T_n altérben is felcserélhető unitér matrixok ábrázolják, amelyek egyszerre átlós alakra hozhatók. E matrixok sajátértékei - a /3.41a/-ban szereplő sajátértékhez hasonlóan - $\exp(-im\alpha)$ alakuak. Jelöljük azt a normált függvényt, amely a 3. tengely körüli α szögü forgatáskor $\exp(-im\alpha)$-val szorzódik, $\hat{\psi}_m$ -mel. E függvényre érvényesek a következő egyenletek:

$$U_3(\alpha)\hat{\psi}_m = e^{-im\alpha}\hat{\psi}_m,$$

$$I_3\hat{\psi}_m = \left(\frac{\partial U_3(\alpha)}{\partial \alpha}\right)_{\alpha=0}\hat{\psi}_m = -im\hat{\psi}_m,$$

$$J_3\hat{\psi}_m = iI_3\hat{\psi}_m = m\hat{\psi}_m.$$

/3.54/

A J_3 hermitikus operátornak a $2j+1$ dimenziós T_{2j+1} függvénytérben $2j+1$ sajátfüggvénye van. Ezeket az előző pontban mind meghatároztuk és /3.53/ alatt soroltuk fel. $\hat{\psi}_m$-nek tehát, minthogy /3.54/ értelmében a J_3 operátor m sajátértékhez tartozó sajátfüggvénye, meg kell egyeznie a /3.53/ függvényrendszer megfelelő függvényével, ψ_m-mel. Alkalmazzuk most a T_n altérben talált $\hat{\psi}_m \equiv \hat{\psi}_m$ függvényre először az 1., azután a 2. koordinátatengely körüli $\delta\alpha$ szögü infinitezimális forgatáshoz rendelt unitér transzformációt. A transzformáció eredményeként adódó függvény

$$\psi_m' = (1 + I_1 \delta\alpha)\psi_m$$

ill.

$$\psi_m'' = (1 + I_2 \delta\alpha)\psi_m .$$

A T_n-beli ψ_m-ből forgástranszformáció utján előálló ψ_m' ill. ψ_m'' függvények természetesen ugyancsak T_n-hez tartoznak. De T_n-hez kell, hogy tartozzék ψ_m, ψ_m' és ψ_m'' tetszésszerinti lineáris kombinációja, igy például az

$$i\psi_m' \pm \psi_m'' - (i \pm 1)\psi_m = (iI_1 \pm I_2)\delta\alpha\,\psi_m = J_\pm \psi_m \delta\alpha$$

kombináció is. Tekintetbe véve, hogy /3.50/ szerint $J_\pm \psi_m$ a $\psi_{m\pm 1}$ függvénnyel arányos, arra az eredményre jutottunk, hogy a T_n altér $\psi_{m\pm 1}$ -et is magában foglalja. Gondolatmenetünket megismételhetjük, ψ_m helyett a $\psi_{m\pm 1}$ függvényekből kiindulva, s igy azt találjuk, hogy a $\psi_{m\pm 2}$ függvények is beletartoznak a T_n függvénytérbe. Tovább ismételve eljárásunkat a /3.53/ függvényrendszer minden függvényéhez eljuthatunk. Következésképpen a T_n függvénytér tartalmazza a /3.53/ alatt felsorolt $2j+1$ ortonormált függvény mindegyikét. A T_n függvénytérnek eszerint <u>legalább</u> $2j+1$ dimenziósnak kell lennie. Eredményünk tehát ellentmond feltételezésünknek, amely szerint T_n a /3.53/ függvényekkel kifeszitett T_{2j+1} függvénytérnek $2j+1$ -nél <u>kevesebb</u> dimenziós, valódi altere. A $D^{(j)}$ ábrázolás ennélfogva nem lehet reducibilis. Ezzel igazoltuk állitásunkat: <u>a forgáscsoport $D^{(j)}$ ábrázolása irreducibilis ábrázolás.</u>

*

Azzal, hogy a forgáscsoport $D^{(j)}$ ábrázolásait felkutattuk, <u>lényegében</u> a forgáscsoport összes végesdimenziós unitér ábrázolását megismertük. Ahhoz azonban, hogy ezt az állitásunkat pontosabban megfogalmazhassuk, előbb be kell vezetnünk az ábrázolások ekvivalenciájának fogalmát.

Vegyük szemügyre egy csoportnak az ortonormált

$$\psi_1, \psi_2, \dots \psi_n \qquad /3.55/$$

alapfüggvényekkel kifeszitett T függvénytérben létesitett unitér ábrázolását. A C csoport p jelü elemét ábrázoló operátort, mely a /3.55/ függvényekre hat, $U(p)$ -vel jelöljük:

$$\psi_e[p] = U(p)\psi_e . \qquad /3.56/$$

Alkalmazzuk most a T függvénytér minden ψ függvényére egy nemszinguláris S lineáris transzformációt. A /3.55/ alapfüggvények helyett a transzformáció a

$$\hat{\psi}_e = S\psi_e \qquad (e = 1, 2, \dots, n) \qquad /3.57/$$

uj alapfüggvényeket vezeti be. Követeljük meg, hogy a /3.57/-tel definiált $\hat{\psi}_e$ függvények a /3.55/ alatti ψ_e függvényekhez hasonlóan ortonormált rendszert alkossanak:

$$(\hat{\psi}_e, \hat{\psi}_k) = (S\psi_e, S\psi_k) = (\psi_e, S^+S\psi_k) = \delta_{ek} .$$

Innen látható, hogy az S^+S operátor matrixa az egységmatrix; S^+S tehát az egységoperátorral egyenlő:

$$S^+S = 1, \quad S^{-1} = S. \qquad /3.57a/$$

Az S operátornak tehát unitérnek kell lennie.

Mibe viszi át az S transzformáció a /3.56/ függvényt? Ha $S\psi_e[p]$-t – /3.57/ analógiájára – $\hat{\psi}_e[p]$-vel jelöljük, ezenkivül tekintetbe vesszük a /3.57/-ből S^{-1} -gyel való szorzással kapott $\psi_e = S^{-1}\hat{\psi}_e$ egyenletet, ugy irhatjuk:

$$\hat{\psi}_e[p] = S\psi_e[p] = SU(p)\psi_e = SU(p)S^{-1}\hat{\psi}_e \equiv \hat{U}(p)\hat{\psi}_e ;$$

$$\hat{\psi}_e[p] = \hat{U}(p)\hat{\psi}_e . \qquad /3.58/$$

látható, hogy a C csoport minden egyes / p jelü/ eleméhez a /3.57/ alatti transzformált alapfüggvényeknek is egy-egy $\hat{U}(p)$ lineáris transzformációja van rendelve. $\hat{U}(p)$-t az

$$\hat{U}(p) = S\,U(p)\,S^{-1} \qquad /3.59/$$

reláció definiálja.

Könnyü meggyőződni róla, hogy a p csoportelemek és az $\hat{U}(p)$ operátorok közötti

$$p \longrightarrow \hat{U}(p) \qquad /3.60/$$

hozzárendelés – hasonlóan a p csoportelemeknek az $U(p)$ operátorokkal való

$$p \longrightarrow U(p) \qquad /3.61/$$

ábrázolásához – ugyancsak müvelettartó. Ha p_1-nek az $\hat{U}(p_1)$, p_2 -nek az $\hat{U}(p_2)$ operátor felel meg:

$$p_1 \longrightarrow \hat{U}(p_1) \quad , \quad p_2 \longrightarrow \hat{U}(p_2),$$

ugy a $p_1 p_2$ szorzathoz rendelt $\wedge$-os U operátort a következőképpen kapjuk meg. $p_1 p_2$ -höz a /3.61/ ábrázolás – – amely természetesen müvelettartó – az

$$U(p_1 p_2) \equiv U(p_1)U(p_2)$$

operátort rendeli. A $p_1 p_2$ -höz rendelt $\wedge$ -os operátort /3.59/ felhasználásával kapjuk:

$$\hat{U}(p_1 p_2) = S\,U(p_1 p_2)\,S^{-1} = S\,U(p_1)U(p_2)\,S^{-1} =$$

$$= S\,U(p_1)\,S^{-1}S\,U(p_2)\,S^{-1} = \hat{U}(p_1)\hat{U}(p_2)$$

$p_1 p_2$ -höz a /3.60/ megfeleltetés tehát a p_1 -hez és p_2 -höz rendelt $\wedge$ -os operátor szorzatát rendeli, ami éppen azt jelenti, hogy a /3.60/ megfeleltetés

<u>müvelettartó.</u> Az $U(p)$ operátorokból a /3,59/ transzformáció utján kapott $\hat{U}(p)$ operátorok tehát ugyancsak a C csoport egy ábrázolását létesitik. - /3.59/ és /3.57a/ alapján meggyőződhetünk arról, hogy az unitér $U(p)$ operátorokból az unitér S alkalmazásával előálló $\hat{U}(p)$ operátorok ugyancsak unitérek:

$$\hat{U}^{-1}(p) = SU^{-1}(p)S^{-1} = SU^{+}(p)S^{+} = (SU(p)S^{+})^{+} =$$
$$= (SU(p)S^{-1})^{+} = \hat{U}^{+}(p).$$

Meggondolásaink eredményét a következőkben foglalhatjuk össze: Ha egy C csoport $p \rightarrow U(p)$ unitér ábrázolásának az ortonormált $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_n$ alapfüggvényrendszerrel kifeszitett függvényterében egy uj $\hat{\varphi}_\ell = S\psi_\ell$ $(\ell = 1, 2, \ldots, n)$ ortonormált alapfüggvényrendszert vezetünk be az S unitér transzformáció segitségével, ugy az uj $\hat{\varphi}_\ell$ alapfüggvények transzformációját megszabó $\hat{U}(p)$ operátorok ugyancsak a C csoport $p \rightarrow \hat{U}(p)$ unitér ábrázolását létesitik. Az $\hat{U}(p)$ és az $U(p)$ operátorok kapcsolatát /3.59/ adja meg.

A fentiekből láthatjuk, hogy valamely C csoport egy $p \rightarrow U(p)$ unitér ábrázolásából egy S unitér transzformáció alkalmazása:

$$\hat{U}(p) = SU(p)S^{-1} \qquad /3.59/$$

utján a C csoport ujabb unitér ábrázolását nyerjük. A fentiek alapján világos azonban, hogy a $p \rightarrow U(p)$ és a $p \rightarrow \hat{U}(p)$ ábrázolások "lényegében" azonosak; különbözőségük csupán az alapfüggvényrendszer különböző megválasztásából ered. Ezért <u>két ábrázolást, amelynek operátorai között fennáll a /3.59/ kapcsolat, ekvivalensnek fogunk nevezni.</u>

Miután bevezettük az ábrázolások ekvivalenciájának fogalmát, most már igazolhatjuk a következő állítást:

A forgáscsoport tetszésszerinti végesdimenziós irreducibilis, unitér ábrázolása ekvivalens a $D^{(j)}$ ábrázolások valamelyikével.

Vegyük szemügyre a forgáscsoport tetszésszerinti A végesdimenziós, irreducibilis, unitér ábrázolását. Az A ábrázolás T függvényterében a 3. koordinátatengely körüli forgatásokat természetesen most is felcserélhető unitér $U_3(\alpha)$ operátorok ábrázolják. A $U_3(\alpha)$ operátorok közös ψ_m sajátfüggvényeikre a /3.41a/-val analóg

$$U_3(\alpha)\psi_m = e^{-im\alpha}\psi_m$$

képlet által megadott módon hatnak. Egy meghatározott ψ_m sajátfüggvényből kiindulva a $\mathcal{J}_\pm$ operátorok ismételt alkalmazásával megszerkeszthetjük a sajátfüggvények/3.53/ tipusu ortonormális rendszerét, amely egy invariáns függvényrendszert feszit ki: a $D^{(j)}$ ábrázolás $2j+1$ dimenziós T_{2j+1} függvényterét. Feltételezésünk szerint az A ábrázolás irreducibilis, igy T függvényterében valódi invariáns altér nincs. A T_{2j+1} függvényterét a fentiekben a T függvénytér függvényeiből szerkesztettük meg. Ha T_{2j+1} a T függvénytérnek nem valódi altere, ugy szükségképpen azonos kell, hogy legyen vele. Ezzel bebizonyitottuk, hogy az A ábrázolás tere azonos a $D^{(j)}$ ábrázolás terével, s igy a két ábrázolás legfeljebb az alapfüggvényrendszer választásában különbözhet egymástól. Ez pedig azt jelenti, hogy a forgáscsoport szemügyre vett végesdimenziós, irreducibilis, unitér, de különben tetszésszerinti A ábrázolása ekvivalens $D^{(j)}$-vel, amivel állitásunkat igazoltuk.

*

Most megmutatjuk, hogy ha egy kvantummechanikai rendszer sajátfüggvényei közül $2j+1$ függvény forgatáskor a forgáscsoport $D^{(j)}$ irreducibilis ábrázolása szerint transzformálódik, ugy e függvények az impulzusmomentum négyzetének a $j(j+1)$ sajátértékhez tartozó sajátfüggvényei. - A $\underline{J}$ impulzusmomentum-operátor komponensei /3.37/ szerint az I_1, I_2, I_3 infinitezimális forgásoperátorok i -szeresével egyenlők. /3.38/ felhasználásával irhatjuk:

$$\underline{J}^2\psi_m = (J_1^2+J_2^2+J_3^2)\psi_m = [\tfrac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) + J_3^2]\psi_m .$$

Az itt szereplő J_+, J_-, J_3 operátorok hatását megadó /3.5o/ /3.51/ képleteket tekintetbe véve kapjuk:

$$\underline{J}^2\psi_m = \left\{\tfrac{1}{2}[j(j+1)-m(m-1)+j(j+1)-m(m+1)]+m^2\right\}\psi_m = j(j+1)\psi_m.$$

Ezzel állitásunkat igazoltuk. Eredményük az adódott, hogy az impulzusmomentum négyzetének lehetséges értékei $j(j+1)$ alakuak $(j=0,\frac{1}{2},1,\frac{3}{2},\dots)$; j adott értékéhez J_3 -nak $2j+1$ különböző sajátértéke tartozik. Ezek: $m=j, j-1,\dots,-j$.
A következőkben annak jelzésére, hogy a /3.53/ függvények a $\underline{J}^2$ operátor $j(j+1)$ sajátértékéhez tartozó sajátfüggvényei, ψ-t m mellett még egy j indexszel is el fogjuk látni: ψ_{jm}.

h. Spinorok. $D^{(j)}$ matrixai. A következőkben célul a $D^{(j)}$ ábrázolás tetszésszerinti forgatáshoz rendelt matrixainak meghatározását tüzzük ki.

Első lépésként foglalkozzunk egy kétdimenziós függvénytér (pl. egy 1/2 spinü részecske) két független spinállapotát leiró alapfüggvények által kifeszitett spintér unitér transzformációival. Ha a függvénytér $\xi_{1/2}, \xi_{-1/2}$ alapfüggvényeit a

$$\xi'_{1/2} = \xi_{1/2}a + \xi_{-1/2}c \qquad /3.62/$$

$$\xi'_{-1/2} = \xi_{1/2}b + \xi_{-1/2}d$$

lineáris transzformációnak vetjük alá, ugy az alapfüggvényekkel a $\xi = c_{1/2}\xi_{1/2} + c_{-1/2}\xi_{-1/2}$ alakban kifejezett ξ függvény

$$\xi' = c_{1/2}\xi'_{1/2} + c_{-1/2}\xi'_{-1/2} = c'_{1/2}\xi_{1/2} + c'_{-1/2}\xi_{-1/2}$$

transzformáltjának $c'_{1/2}$, $c'_{-1/2}$ kifejtési együtthatóit a

$$c'_{1/2} = a c_{1/2} + b c_{-1/2}$$

$$c'_{-1/2} = c \cdot c_{1/2} + d c_{-1/2}$$

lineáris transzformáció szolgáltatja. Az

$$U = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \qquad /3.63/$$

transzformációs matrix unitér voltát kifejező $UU^+=1$ feltételből következik, hogy

$$\det UU^+ = \det U \det U^+ = |\det U|^2 = 1.$$

Az unitér U matrix determinánsának abszolut értéke tehát 1-gyel egyenlő. Legyen $\det U = \exp i\mu$. Ha U-t $\exp(-i\mu/2)$-vel megszorozzuk, egységnyi determinánsu /unimoduláris/ matrixot kapunk:

$$U_0 = e^{-i\frac{\mu}{2}} U \;, \quad \det U_0 = 1.$$

Látható, hogy bármely U unitér matrix felirható, mint egy U_0 unimoduláris matrix és egy - ξ, ξ^* függvényekben bilineáris kifejezéseket /fizikai mennyiségeket/ változatlanul hagyó - $\exp i\mu/2$ fázistranszformáció szorzata. Ha vizsgálatunkban azokra a transzformációkra kivánunk szoritkozni, amelyek a ξ, ξ^* -ban bilineáris kifejezések értékét érintik, ugy elegendő az unimoduláris unitér U matrixokkal foglalkoznunk:

$$\det U = 1 \;, \quad ad - cb = 1.$$

Az U unitér voltát kifejező feltétel:

$$U^+ = U^{-1} \;, \quad \begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}.$$

Innen az U unitér operátor matrixelemei között a $d = a^*$, $c = -b^*$ összefüggéseket kapjuk. Legyen $a = s - iv_3$, $b = -v_2 - iv_1$ ekkor a /3.63/ alatti U matrix az

$$U = \begin{pmatrix} s - iv_3 & -iv_1 - v_2 \\ -iv_1 + v_2 & s + iv_3 \end{pmatrix} \qquad /3.64/$$

alakban irható fel. A $\det U = 1$ feltétel a most bevezetett s, v_1, v_2, v_3 mennyiségek között az $s^2 + v_1^2 + v_2^2 + v_3^2 = 1$, $s^2 + \underline{v}^2 = 1$ kapcsolatot adja. Ezért irhatjuk:

$$s = \cos\frac{\alpha}{2}\ ; \quad v = n \sin\frac{\alpha}{2}\ ; \quad n^2 = 1. \qquad /3.65/$$

Vezessük be most a

$$\underline{\sigma}\left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1, & 0 \\ 0, & -1 \end{pmatrix}\right] \qquad /3.66/$$

Pauli-féle matrix vektort. Ennek komponenseire fennállnak a következő relációk:

$$\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma_3^2 = 1,$$

$$\sigma_2\sigma_3 = -\sigma_3\sigma_2 = i\sigma_1, \quad \sigma_3\sigma_1 = -\sigma_1\sigma_3 = i\sigma_2, \quad \sigma_1\sigma_2 = -\sigma_2\sigma_1 = i\sigma_3.$$

A 29. oldalon definiált ε_{ijr} szimbolum segitségével e relációkat a következő egyetlen kifejezésbe tömörithetjük:

$$\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} + i\varepsilon_{ijr}\sigma_r \qquad /3.67/$$

/Itt - és a következőkben - a kétszer előforduló vektorindexekre 1-től 3-ig összegezni kell./

/3.65/ és /3.66/ felhasználásával a /3.64/ alatti U matrixot a következő alakba irhatjuk:

$$U(\underline{\alpha}) = \cos\frac{\alpha}{2} - i\underline{n}\,\underline{\sigma}\sin\frac{\alpha}{2} \qquad (\underline{\alpha} = \underline{n}\alpha). \qquad /3.68/$$

Vizsgáljuk meg most, miképpen transzformálódik a ξ függvénnyel felirt

$$\underline{s} = (\xi, \underline{\sigma}\xi) \qquad /3.69/$$

kifejezés, ha ξ -re a /3.68/ alatti $U(\alpha)$ operátort alkalmazzuk? $\underline{s}$ transzformáltja a következőképpen alakitható át:

$$\underline{s}' = (\xi', \underline{\sigma}\xi') = (U\xi, \underline{\sigma}U\xi) = (\xi, U^{+}\underline{\sigma}U\xi). \qquad /3.70/$$

Foglalkozzunk most $U^{+}\underline{\sigma}U$ -val. /3.68/ felhasználásával irhatjuk:

$$U^{+}\underline{\sigma}U = \left(\cos\frac{\alpha}{2} + i\underline{n}\underline{\sigma}\sin\frac{\alpha}{2}\right)\underline{\sigma}\left(\cos\frac{\alpha}{2} - i\underline{n}\underline{\sigma}\sin\frac{\alpha}{2}\right) =$$
$$= \underline{\sigma}\cos^2\frac{\alpha}{2} - i\left[\underline{\sigma}(\underline{n}\underline{\sigma}) - (\underline{n}\underline{\sigma})\underline{\sigma}\right]\sin\frac{\alpha}{2}\cos\frac{\alpha}{2} +$$
$$+ (\underline{n}\underline{\sigma})\underline{\sigma}(\underline{n}\underline{\sigma})\sin^2\frac{\alpha}{2}. \qquad /3.71/$$

A $\sin\frac{\alpha}{2}\cos\frac{\alpha}{2}$ -t tartalmazó tagot a kettős vektorszorzat kifejtési tétele és a $\underline{\sigma}$ vektorra érvényes $\underline{\sigma}\times\underline{\sigma} = 2i\underline{\sigma}$ összefüggés felhasználásával a következő alakra hozhatjuk:

$$-i\left[\underline{\sigma}(\underline{n}\underline{\sigma}) - (\underline{n}\underline{\sigma})\underline{\sigma}\right]\sin\frac{\alpha}{2}\cos\frac{\alpha}{2} = -i\underline{n}\times(\underline{\sigma}\times\underline{\sigma})\sin\frac{\alpha}{2}\cos\frac{\alpha}{2} = \qquad /3.72/$$
$$= \underline{n}\times\underline{\sigma}\sin\alpha.$$

$\sin^2\frac{\alpha}{2}$ együtthatója igy alakitható át /3.67/ figyelembe vételével:

$$\left[(\underline{n}\underline{\sigma})\underline{\sigma}(\underline{n}\underline{\sigma})\right]_i = n_r n_s \sigma_r \sigma_i \sigma_s = n_r n_s \sigma_r(\delta_{is} + i\varepsilon_{isp}\sigma_p) =$$
$$= n_r n_i \sigma_r + i\varepsilon_{isp} n_r n_s(\delta_{rp} + i\varepsilon_{rpq}\sigma_q) =$$
$$= n_i(\sigma_r n_r) - \varepsilon_{isp} n_s \varepsilon_{pqr} n_r \sigma_q = \left[\underline{n}(\underline{\sigma}\underline{n}) - \underline{n}\times(\underline{\sigma}\times\underline{n})\right]_i.$$
$$/3.73/$$

Használjuk fel még, hogy a $\underline{\sigma}$ vektoroperátor - mint minden vektor - a következőképpen bontható fel $\underline{n}$ -nel párhuzamos és merőleges komponensének összegére:

$$\underline{\sigma} = \underline{n}(\underline{\sigma}\,\underline{n}) + \underline{n}\times(\underline{\sigma}\times\underline{n}). \qquad /3.74/$$

/3.72-74/ figyelembevételével /3.71/-ből a következő kifejezés adódik $U^{+}\underline{\sigma}U$ -ra:

$$U^{+}\underline{\sigma}U = \underline{n}(\underline{\sigma}\,\underline{n}) + \underline{n}\times(\underline{\sigma}\times\underline{n})\cos\alpha + \underline{n}\times\underline{\sigma}\sin\alpha.$$

Ha ezt /3.70/-be helyettesitjük, azt találjuk, hogy az $\underline{s}$ kifejezés a következőképpen változik meg a $\xi' = U\xi$ transzformáció következtében:

$$\underline{s}' = \underline{n}(\underline{s}\,\underline{n}) + \underline{n}\times(\underline{s}\times\underline{n})\cos\alpha + \underline{n}\times\underline{s}\sin\alpha.$$

Ábránk mutatja, hogy e képlet az $\underline{s}$ vektor $\underline{\alpha} = \alpha\underline{n}$ forgásvektoru elforgatását irja le:

Azt találtuk tehát, hogy a ξ függvénynek a /3.68/ alatti $U(\underline{\alpha})$ operátorral való minden transzformációjához az $\underline{s}$ vektornak egy $\underline{\alpha}$ forgásvektoru elforgatása tartozik. Megforditva már nem állithatjuk, hogy minden forgáshoz egy /3.68/ tipusu $U(\underline{\alpha})$ operátor tartozik. Ha ugyanis pl. az $\underline{s}$ vektort tetszésszerinti tengely körül $\alpha = 2\pi$ szöggel forgatjuk el, ugy az változatlan marad, a megfelelő $U(2\pi\underline{n})$ operátor viszont -1-gyel egyenlő. Az $\alpha = 0$ szögü forgáshoz, melynek során $\underline{s}$ ugyancsak változatlan marad, ugyanakkor az $U(0) = 1$ operátor tartozik. Általában bármely $\underline{\alpha}$ forgásvektoru forgatáshoz két egymástól előjelben különböző operátor tartozik: az $U(\alpha\underline{n})$ és az $U([\alpha + 2\pi n]\underline{n}) = -U(\alpha\underline{n})$. Ezért azt mondjuk, hogy a /3.68/ operátorok a forgáscsoport kétértelmü ábrázolását létesitik.

Határozzuk meg a forgáscsoport $U(\underline{\alpha})$ operátorokkal létesitett kétértelmü ábrázolásának infinitezimális operátorait. Infinitezimális forgatás esetén /3,68/-ból

$$\mathcal{U}(\underline{\alpha}) = 1 - \frac{i}{2}\,\underline{\sigma}\,\delta\underline{\alpha}$$

adódik; ebből az infinitezimális operátorokra a

$$\underline{I} = \left(\frac{\partial\mathcal{U}(\underline{\alpha})}{\partial\underline{\alpha}}\right)_{\underline{\alpha}=0} = -\frac{i}{2}\underline{\sigma}, \qquad /3.75/$$

$$I_1 = -\frac{i}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad I_2 = -\frac{i}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad I_3 = -\frac{i}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

eredményt kapjuk. Származtassuk le most az infinitezimális operátorokból a /3.38/ képletekkel definiált J_1, J_2, J_3 ill. J_+, J_- operátorok matrixait:

$$J_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad J_3 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; \qquad /3.76/$$

$$J_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \qquad /3.76a/$$

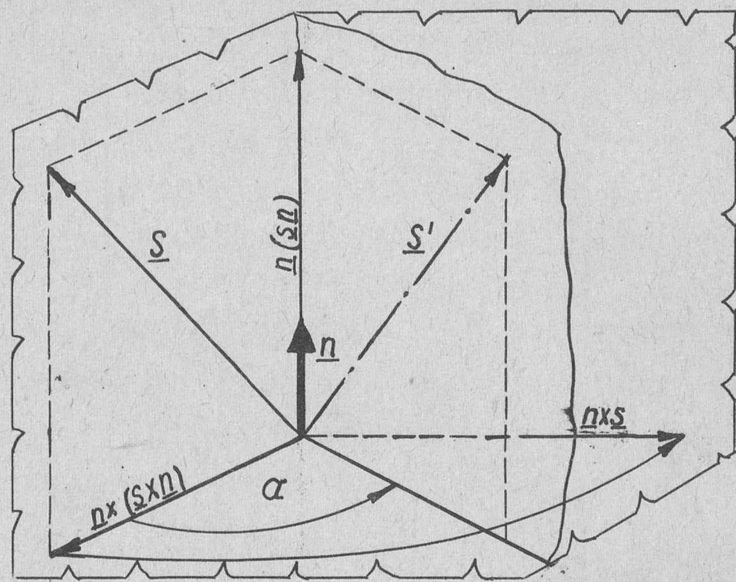
Hasonlitsuk össze eredményünket a $\psi_{1/2}$, $\psi_{-1/2}$ alapfüggvényekkel kifeszitett függvénytérben létesitett $D^{(1/2)}$ ábrázolás $J_\pm$, J_3 operátorának matrixaival. Ezek /3.50-51/ szerint a következő alakuak:

$$(\psi_{m_1}, J_+\psi_{m_2}): \begin{array}{c|cc} & m_2 = 1/2 & -1/2 \\ \hline m_1 = 1/2 & 0 & 1 \\ -1/2 & 0 & 0 \end{array}, \quad (\psi_{m_1}, J_-\psi_{m_2}): \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$(\psi_{m_1}, J_3\psi_{m_2}): \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

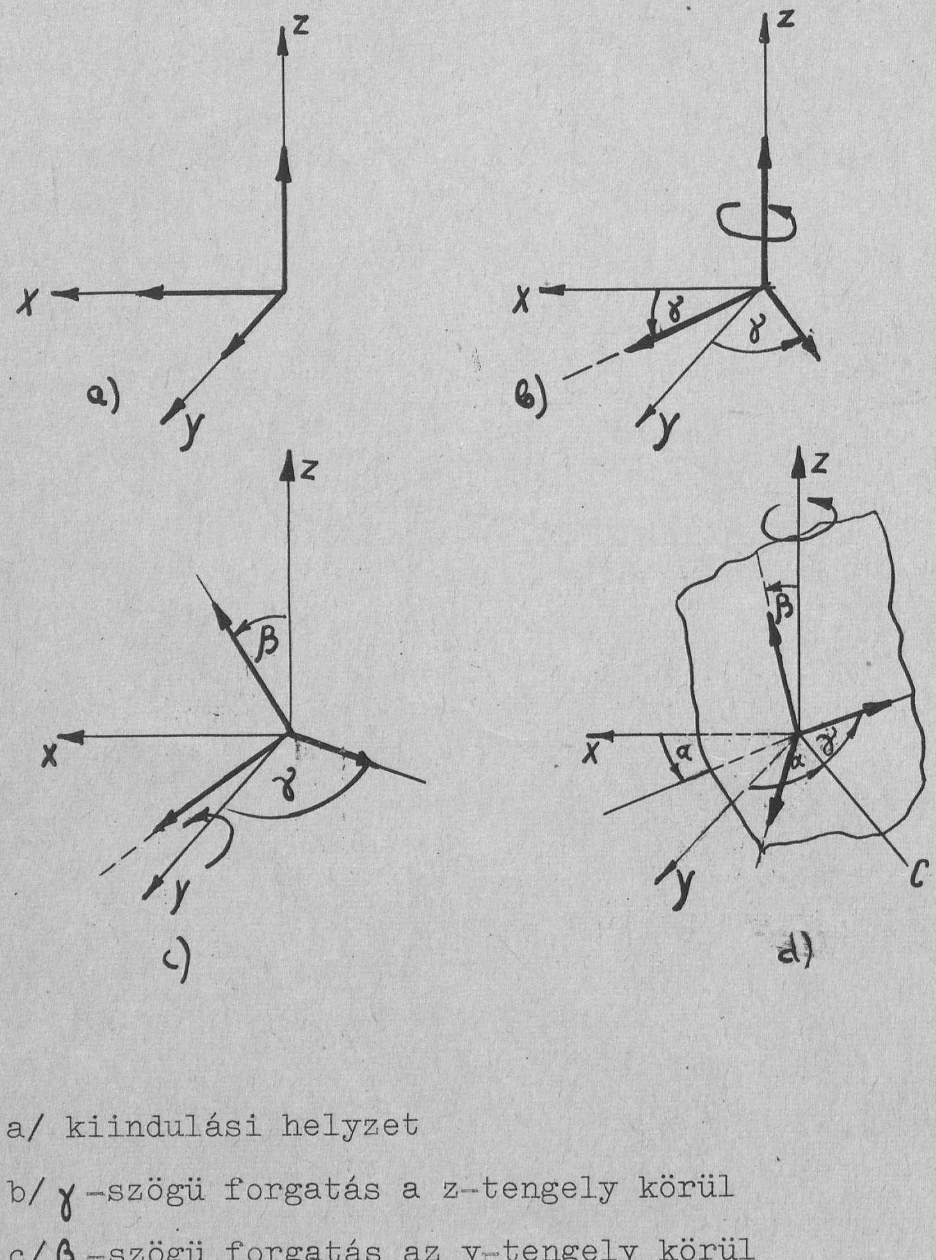
/3.76-76a/-val összevetve e képleteket megállapithatjuk, hogy a /3.68/ alatti $\mathcal{U}(\underline{\alpha})$ unitér operátorból leszármaztatott infinitezimáloperátorok matrixai megegyeznek a forgáscsoport $D^{(1/2)}$ irreducibilis ábrázolásához tartozó infinitezimáloperátorok matrixaival. A /3.68/ alatti $\mathcal{U}(\underline{\alpha})$ unitér operátor tehát éppen a forgáscsoport $D^{(1/2)}$ irreducibilis ábrázolásában az $\underline{\alpha}$ forgásvektoru forgatáshoz rendelt operátor.

Ha a valamely kvantummechanikai rendszer sajátfüggvényei a $D^{(1/2)}$ ábrázolás szerint transzformálódnak,



1. ábra

Ez az ábra a 45.old. szövegét illusztrálja. /13. sor, kettőspont után./



a/ kiindulási helyzet

b/ γ-szögü forgatás a z-tengely körül

c/ β-szögü forgatás az y-tengely körül

d/ α-szögü forgatás a z-tengely körül

Ezek az ábrák a 47. old. szövegét illusztrálják.
/Alulról 3 sor, kettőspont után./

ugy a 41. oldalon mondottak értelmében a rendszer impulzusmomentuma $j = 1/2$ -del egyenlő. A $D^{(1/2)}$ ábrázolás szerint transzformálódnak tehát speciálisan az $1/2$ spinü részecskék spinfüggvényei is. Ez közvetlenül is látható, ha összehasonlitjuk a $D^{(1/2)}$ ábrázolás szerint transzformálódó állapotfüggvényü rendszer impulzusmomentumának /3.76/ matrixait az elektron /s minden $1/2$ spinü rész/ $\underline{s}$ spinoperátorának /2.13/ alatt megadott matrixaival: a /3.76/ matrixok /az időközben egységül választott $\hbar$ állandótól eltekintve/ megegyeznek az $\underline{s}$ spinoperátor komponenseinek matrixaival. Tekintettel arra, hogy a $D^{(1/2)}$ ábrázolás irja le az $1/2$ spinü részecskék spinfüggvényeinek forgástranszformációját, a $D^{(1/2)}$ ábrázolás szerint transzformálódó ξ mennyiséget <u>spinornak</u> nevezzük.

*

A következőkben az $\underline{\alpha}$ forgásvektor komponensei helyett az α, β, γ Euler szögeket fogjuk használni a háromdimenziós térben végzett forgatások jellemzésére. Az Euler-szögeket a következőképpen definiáljuk:

Először koordinátarendszerünk z -tengelye körül γ szöggel forgatunk.

Ezután ugyanezen koordinátarendszer y -tengelye körül végzünk egy β-szögü forgatást.

Végül ismét egy a z -tengely körüli α -szögü forgatást alkalmazunk.

E három forgatás eredményét a következő ábrák mutatják;az elforgatásnak alávetett objektumot a vastagon kihuzott vektorháromláb szemlélteti:

Minthogy az α, β, γ Euler-szög-hármassal jellemzett forgatás a 3. ill. a 2. tengely körüli forgatásokból épül fel, irjuk fel /3.68/ alapján az $\underline{\alpha}(0,0,\alpha)$ és $\underline{\beta}(0,\beta,0)$ forgásvektorokkal jellemzett $\bar{F}_3(\alpha)$ és $\bar{F}_2(\beta)$ forgásokhoz rendelt $U_3(\alpha)$ és $U_2(\beta)$ matrixokat:

$$U_3(\alpha) \equiv U(0,0,\alpha) = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\alpha}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\alpha}{2}} \end{pmatrix}, \quad U_2(\beta) \equiv U(0,\beta,0) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2} & -\sin\frac{\beta}{2} \\ \sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix}.$$

Az α, β, γ Euler-szög-hármassal jellemzett forgatáshoz rendelt $U(\alpha,\beta,\gamma)$ operátor matrixa ezekkel igy irható fel:

$$U(\alpha,\beta,\gamma) = U_3(\alpha) U_2(\beta) U_3(\gamma) = \begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{2}(\alpha+\gamma)} \cos\frac{\beta}{2} & -e^{-\frac{i}{2}(\alpha-\gamma)} \sin\frac{\beta}{2} \\ e^{\frac{i}{2}(\alpha-\gamma)} \sin\frac{\beta}{2} & e^{\frac{i}{2}(\alpha+\gamma)} \cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \quad (3.77)$$

Definiáljuk most a $D^{(1/2)}(\alpha,\beta,\gamma)$ operátort, amely a forgáscsoport $D^{(1/2)}$ irreducibilis ábrázolása szerint transzformálódó ξ spinoroknak a <u>koordinátarendszer</u> $\alpha\beta\gamma$ Euler-szög-hármassal jellemzett elforgatása esetén fellépő változását irja le:

$$\xi' = D^{(1/2)}(\alpha\beta\gamma)\,\xi .$$

A ξ spinorral leirt anyaghullámtér /spinvektor/ $-\underline{\alpha}$ forgásvektoru elforgatása esetén a $\xi_{1/2}$, $\xi_{-1/2}$ alapfüggvények ugyanugy változnak meg, mintha az anyaghullámteret /spinvektort/ rögzitetten tartva, a koordinátarendszert vetjük alá $\underline{\alpha}$ forgásvektoru forgatásnak. A $D^{(1/2)}(\alpha\beta\gamma)$ operátor eszerint a következőképpen fejezhető ki a /3.77/ alatti $U(\alpha\beta\gamma)$ -val:

$$D^{(1/2)}(\alpha\beta\gamma) = U(-\alpha-\beta-\gamma)$$

$D^{(1/2)}(\alpha\beta\gamma)$ matrixa tehát a következő alaku:

$$D^{(1/2)}(\alpha\beta\gamma) = \begin{pmatrix} e^{\frac{i}{2}(\alpha+\gamma)} \cos\frac{\beta}{2} & e^{\frac{i}{2}(\alpha-\gamma)} \sin\frac{\beta}{2} \\ -e^{-\frac{i}{2}(\alpha-\gamma)} \sin\frac{\beta}{2} & e^{-\frac{i}{2}(\alpha+\gamma)} \cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \quad /3.78/$$

Miután az $\alpha\beta\gamma$ ábrázolás matrixainak /3.78/ alakját megismertük, megszerkeszthetjük bármely $D^{(j)}$ ábrázolás matrixát. Képezzük ebből a célból a $D^{(j)}$ ábrázolás terét kifeszítő $\xi_{1/2}$, $\xi_{-1/2}$ alap-spinorokból a következő hatványszorzatot:

$$\psi_{jm} = \left[\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}\right]^{1/2} \xi_{1/2}^{j+m}\, \xi_{-1/2}^{j-m} \qquad (m = j, j-1, \dots, -j). \qquad /3.79/$$

Ki fogjuk mutatni, hogy a ψ_{jm} mennyiségek a forgáscsoport $D^{(j)}$ ábrázolása szerint transzformálódnak. Az anyaghullámtér /spinvektor/ 3. tengely körüli α szögü elforgatásakor $\xi_{1/2}$, $\xi_{-1/2}$ az $U(\alpha 0 0) = U(0 0 \alpha)$ matrixok szerint transzformálódnak. /3.77/ alapján irhatjuk:

$$\xi'_{1/2} = e^{-\frac{i}{2}\alpha}\xi_{1/2},$$

$$\xi'_{-1/2} = e^{\frac{i}{2}\alpha}\xi_{-1/2}.$$

Könnyü meggyőződni róla, hogy a /3.79/ alatt definiált ψ_{jm} mennyiségek transzformációs törvénye ugyanezen forgatás esetére

$$\psi'_{jm} = e^{-\frac{i}{2}[(j+m)-(j-m)]\alpha}\psi_{jm} = e^{-im\alpha}\psi_{jm}. \qquad /3.80/$$

Ez megegyezik a $D^{(j)}$ ábrázolásra jellemző /3.41a/ transzformációs képlettel. /3.80/-ból következik, hogy a /3.79/-cel definiált ψ_{jm} -ek a $D^{(j)}$ ábrázolást definiáló /3.50-51/ képletek egyikének, /3.51/-nek eleget tesznek.

Ahhoz, hogy állitásunkat, mely szerint ψ_{jm} a forgáscsoport $D^{(j)}$ irreducibilis ábrázolása szerint transzformálódik, bebizonyitsuk, még azt kell igazolnunk, hogy a ψ_{jm} mennyiségek a $D^{(j)}$ ábrázolást definiáló összefüggések közül a másik kettőt, a /3.50/ alatti képleteket is kielégitik.

Infinitezimális forgatás esetén ψ_{jm} transzformáltját, ψ'_{jm} -t az $\underline{I}$ infinitezimális forgás-operátorok definiciója értelmében,

$$\psi'_{jm} = (1 + \underline{I}\,\delta\underline{\alpha})\psi_{jm}$$

adja. Más alakban is felirhatjuk $\psi'_{jm} = \left[\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}\right]^{1/2} \xi'^{\,j+m}_{1/2}\, \xi'^{\,j-m}_{-1/2}$ -t

minthogy a ξ spinorok infinitezimális forgatás esetére érvényes transzformációs képleteit ismerjük:

$$\xi' = (1 - \tfrac{i}{2}\underline{\sigma}\,\delta\underline{\alpha})\xi\,.$$

ψ'_{jm} -t ennek felhasználásával a következő alakban fejezhetjük ki:

$$\psi'_{jm} = (1+\underline{I}\,\delta\underline{\alpha})\psi_{jm} = \left[\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}\right]^{1/2}\left[(1-\tfrac{i}{2}\underline{\sigma}\,\delta\underline{\alpha})\xi_{1/2}\right]^{j+m}\left[(1-\tfrac{i}{2}\underline{\sigma}\,\delta\underline{\alpha})\xi_{-1/2}\right]^{j-m} =$$

$$= \left[\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}\right]^{1/2}\left\{\xi^{j+m}_{1/2}\,\xi^{j-m}_{-1/2} - \frac{i}{2}\left[(j+m)(\underline{\sigma}\,\xi_{1/2})\,\xi^{j+m-1}_{1/2}\,\xi^{j-m}_{-1/2} + (j-m)\,\xi^{j+m}_{1/2}(\underline{\sigma}\,\xi_{-1/2})\,\xi^{j-m-1}_{-1/2}\right]\delta\underline{\alpha}\right\}.$$

Innen az I_1, I_2 infinitezimális operátorok hatását kifejező képleteket leolvashatjuk:

$$I_1\psi_{jm} = \left[\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}\right]^{\frac{1}{2}}\left(-\frac{i}{2}\right)\left[(j+m)(\sigma_1\,\xi_{1/2})\,\xi^{j+m-1}_{1/2}\,\xi^{j-m}_{-1/2} + (j-m)\,\xi^{j+m}_{1/2}(\sigma_1\,\xi_{-1/2})\,\xi^{j-m-1}_{-1/2}\right],$$

$$I_2\psi_{jm} = \left[\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}\right]^{1/2}\left(-\frac{i}{2}\right)\left[(j+m)(\sigma_2\,\xi_{1/2})\,\xi^{j+m-1}_{1/2}\,\xi^{j-m}_{-1/2} + (j-m)\,\xi^{j+m}_{1/2}(\sigma_2\,\xi_{-1/2})\,\xi^{j-m-1}_{-1/2}\right].$$

A $J_{\pm} = iI_1 \mp I_2$ operátorok hatását most kapott eredményeink segitségével könnyen felirhatjuk:

$$J_{\pm}\psi_{jm}=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{(2j)!}{(j+m)!\,(j-m)!}}\left\{(j+m)\left[(\sigma_1\pm i\sigma_2)\xi_{\frac{1}{2}}\right]\xi_{\frac{1}{2}}^{j+m-1}\xi_{-\frac{1}{2}}^{j-m}+(j-m)\xi_{\frac{1}{2}}^{j+m}\left[(\sigma_1\pm i\sigma_2)\xi_{-\frac{1}{2}}\right]\xi_{-\frac{1}{2}}^{j-m-1}\right\} \quad (3.81)$$

Vegyük itt figyelembe, hogy a $\sigma_1 \pm i\sigma_2$ operátorok a következőképpen hatnak a $\xi_{1/2}$, $\xi_{-1/2}$ alap-spinorokra:

$$(\sigma_1+i\sigma_2)\xi_{1/2}=0 \qquad (\sigma_1-i\sigma_2)\xi_{1/2}=2\xi_{-1/2}$$
$$(\sigma_1+i\sigma_2)\xi_{-1/2}=2\xi_{1/2} \qquad (\sigma_1-i\sigma_2)\xi_{-1/2}=0. \quad /3.82/$$

/3.82/ és /3.79/ felhasználásával /3.81/ a következő alakra hozható:

$$J_{\pm}\psi_{jm}=\left[j(j+1)-m(m\pm1)\right]^{1/2}\psi_{j\,m\pm1}\,.$$

Minthogy kapott eredményünk /3.50/-nel egyezik, korábbi megállapitásunkat figyelembevéve kijelenthetjük:

A /3.79/ alatt definiált ψ_{jm} kifejezések eleget tesznek a $D^{(j)}$ ábrázolást definiáló /3.50-51/ egyenleteknek. Ezzel igazoltuk fenti állitásunkat, amely szerint a $\xi_{1/2}$, $\xi_{-1/2}$ spinorokból felépitett, /3.79/ alatt definiált ψ_{jm} mennyiségek a forgáscsoport $D^{(j)}$ irreducibilis ábrázolása szerint transzformálódnak.

Tekintettel arra, hogy a $\xi_{1/2}$, $\xi_{-1/2}$ alap-spinoroknak a koordinátarendszer $\alpha\beta\gamma$ Euler-szögü elforgatásához rendelt transzformációs matrixát /3.78/ alatt meghatároztuk, a $\xi_{1/2}$, $\xi_{-1/2}$ -ből felépitett, a $D^{(j)}$ ábrázolás szerint transzformálódó, /3.79/ alatti ψ_{jm} mennyiségek tetszésszerinti forgatáshoz tartozó forgásmatrixát könnyüszerrel felirhatjuk.

A koordinátarendszernek a 3. tengely körüli α szögü elforgatása esetén $\xi_{1/2}$, $\xi_{-1/2}$ /3.78/ szerint a

$$\xi'_{1/2} = e^{\frac{i}{2}\alpha}\xi_{1/2}\,, \quad \xi'_{-1/2} = e^{-\frac{i}{2}\alpha}\xi_{-1/2}$$

módon transzformálódik. A /3.79/ alatti ψ_{jm} mennyiségek transzformációs törvénye ugyanekkor

$$\psi'_{jm} = e^{im\alpha}\psi_{jm}. \qquad /3.83/$$

Ha a ψ_{jm} mennyiségeknek a koordinátarendszer $\alpha\beta\gamma$ Euler-szögü forgatáskor fellépő megváltozását leiró matrixot $D^{(j)}_{m'm}(\alpha\beta\gamma)$ -val jelöljük:

$$\psi'_{jm} = \sum_{m'}\psi_{jm'}D^{(j)}_{m'm}(\alpha\beta\gamma), \qquad /3.84/$$

ugy a 3. tengely körüli α-szögü forgatáshoz rendelt matrix $D^{(j)}_{m'm}(\alpha 0 0) = D^{(j)}_{m'm}(0 0 \alpha)$. Ennek konkrét alakját /3.83/ és /3.84/ egybevetésével állapithatjuk meg:

$$D^{(j)}_{m'm}(\alpha 0 0) = D^{(j)}_{m'm}(0 0 \alpha) = \delta_{m'm}e^{im\alpha}. \qquad /3.85/$$

Ha pedig a 2. tengely körül β-szöggel forgatjuk el koordinátarendszerünket, ugy ψ_{jm} megváltozását a $\xi_{1/2}$, $\xi_{-1/2}$ spinorok /3.78/ alapján felirható

$$\xi'_{1/2} = \xi_{1/2}\cos\frac{\beta}{2} - \xi_{-1/2}\sin\frac{\beta}{2},$$

$$\xi'_{-1/2} = \xi_{1/2}\sin\frac{\beta}{2} + \xi_{1/2}\cos\frac{\beta}{2}$$

transzformációs képlete határozza meg:

$$\psi'_{jm} = \left[\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}\right]^{\frac{1}{2}}\left(\xi_{1/2}\cos\frac{\beta}{2} - \xi_{-1/2}\sin\frac{\beta}{2}\right)^{j+m}\left(\xi_{1/2}\sin\frac{\beta}{2} + \xi_{-1/2}\cos\frac{\beta}{2}\right)^{j-m} =$$

$$= \left[\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}\right]^{\frac{1}{2}}\sum_{m'}\sum_{\sigma}\binom{j+m}{j-m'-\sigma}\binom{j-m}{\sigma}\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{(j+m-j+m'+\sigma)+\sigma}\cdot(-1)^{j-m'-\sigma}\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{(j-m'-\sigma)+(j-m-\sigma)}\cdot$$

$$\cdot\,\xi_{1/2}^{(j+m-j+m'+\sigma)+(j-m-\sigma)}\,\xi_{-1/2}^{(j-m'-\sigma)+\sigma} = \sum_{m'}\left[\frac{(j+m')!(j-m')!}{(j+m)!(j-m)!}\right]^{\frac{1}{2}}\sum_{\sigma}\binom{j+m}{j-m'-\sigma}\binom{j-m}{\sigma}(-1)^{j-m'-\sigma}\cdot$$

$$\cdot\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2\sigma+m+m'}\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{2j-2\sigma-m-m'}\left[\frac{(2j)!}{(j+m')!(j-m')!}\right]^{\frac{1}{2}}\xi_{1/2}^{j+m'}\xi_{-1/2}^{j-m'} =$$

$$= \sum_{m'}\left[\frac{(j+m')!(j-m')!}{(j+m)!(j-m)!}\right]^{\frac{1}{2}}\sum_{\sigma}\binom{j+m}{j-m'-\sigma}\binom{j-m}{\sigma}(-1)^{j-m'-\sigma}\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2\sigma+m+m'}\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{2j-2\sigma-m-m'}\cdot\psi_{jm'}.$$

A 2. tengely körüli β-szögü forgatás matrixa $D^{(j)}_{m'm}(0\beta 0)$. Ennek kifejezését /3.86/ és /3.84/ egybevetésével olvashatjuk le:

$$D^{(j)}_{m'm}(0\beta 0)=\left[\frac{(j+m')!(j-m')!}{(j+m)!(j-m)!}\right]^{\frac{1}{2}}\sum_{\sigma}{}'\binom{j+m}{j-m'-\sigma}\binom{j-m}{\sigma}(-1)^{j-m'-\sigma}\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2\sigma+m+m'}\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{2j-2\sigma-m-m'}, \quad (3.87)$$

Az általános $\alpha\beta\gamma$ Euler-szögü forgatás matrixát a matrix-szorzás szabályai segitségével /3.85/-ből és /3.87/-ből kaphatjuk meg:

$$D^{(j)}_{m'm}(\alpha\beta\gamma)=\sum_{m''m'''}D^{(j)}_{m'm''}(\alpha 00)\,D^{(j)}_{m''m'''}(0\beta 0)\,D^{(j)}_{m'''m}(00\gamma)= \quad /3.88/$$

$$=e^{im'\alpha}\left[\frac{(j+m')!(j-m')!}{(j+m)!(j-m)!}\right]^{\frac{1}{2}}\sum_{\sigma}{}'\binom{j+m}{j-m'-\sigma}\binom{j-m}{\sigma}(-1)^{j-m'-\sigma}\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2\sigma+m'+m}\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{2j-2\sigma-m-m'}\cdot e^{im\gamma}.$$

Ezzel kitüzött feladatunkat megoldottuk: meghatároztuk a forgáscsoport $D^{(j)}$ irreducibilis ábrázolása szerint transzformálódó Ψ_{jm} függvényeknek a koordinátarendszer $\alpha\beta\gamma$ Euler-szög-hármassal jellemzett - tetszésszerinti - elforgatásához tartozó transzformációs matrixait.

4. Impulzusmomentumok összeadása a kvantummechanikában

a. A forgáscsoport $D^{(j_1)} \times D^{(j_2)}$ szorzatábrázolásainak kiredukálása. Vegyük szemügyre most egy j_1 és egy j_2 impulzusmomentumu kvantummechanikai rendszer

$$\varphi_{j_1 j_1}, \varphi_{j_1 j_1-1}, \dots, \varphi_{j_1 m_1}, \dots, \varphi_{j_1 -j_1}, \qquad /4.1a/$$

$$\chi_{j_2 j_2}, \chi_{j_2 j_2-1}, \dots, \chi_{j_2 m_2}, \dots, \chi_{j_2 -j_2} \qquad /4.1b/$$

sajátfüggvényeit. Ezek a oldalon mondottak szerint a forgáscsoport $D^{(j_1)}$ ill. $D^{(j_2)}$ ábrázolása szerint transzformálódnak. A koordinátarendszer $\alpha\beta\gamma$ Euler-szög-hármassal jellemzett elforgatása esetén tehát $\varphi_{j_1 m_1}$ -re ill. $\chi_{j_2 m_2}$ -re a

$$\varphi'_{j_1 m_1} = \sum_{m'_1} \varphi_{j_1 m'_1} D^{(j_1)}_{m'_1 m_1}(\alpha\beta\gamma), \qquad /4.2a/$$

$$\chi'_{j_2 m_2} = \sum_{m'_2} \chi_{j_2 m'_2} D^{(j_2)}_{m'_2 m_2}(\alpha\beta\gamma) \qquad /4.2b/$$

transzformációs képletek érvényesek. A szemügyre vett kvantummechanikai rendszerek egyesitésével kapott rendszert - kölcsönhatásmentes esetben - a $\varphi_{j_1 m_1}\chi_{j_2 m_2}$ alaku, $(2j_1+1)(2j_2+1)$ számu szorzat-függvénnyel, vagy ezek alkalmas lineáris kombinációival irhatjuk le.

A koordinátarendszer $\alpha\beta\gamma$ Euler-szög-hármassal jellemzett elforgatása esetén a $\varphi_{j_1 m_1}\chi_{j_2 m_2}$ szorzatok /4.2/ szerint a következőképpen transzformálódnak:

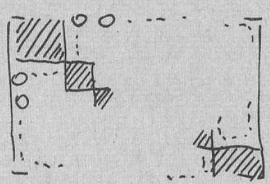
$$\varphi'_{j_1 m_1}\chi'_{j_2 m_2} = \sum_{m'_1} \sum_{m'_2} \varphi_{j_1 m'_1}\chi_{j_2 m'_2} D^{(j_1)}_{m'_1 m_1}(\alpha\beta\gamma) D^{(j_2)}_{m'_2 m_2}(\alpha\beta\gamma). \qquad /4.3/$$

Könnyü meggyőződni róla, hogy a $\varphi_{j_1 m_1}\chi_{j_2 m_2}$ szorzatok transzformációját meghatározó matrixok ugyancsak a forgáscsoport egy ábrázolását létesitik. Ezen ábrázolás matrixai /4.3/ szerint a következő alakuak:

$$A_{m'_1 m'_2, m_1 m_2}(\alpha\beta\gamma) = D^{(j_1)}_{m'_1 m_1}(\alpha\beta\gamma) D^{(j_2)}_{m'_2 m_2}(\alpha\beta\gamma), \qquad /4.4/$$

vagyis a $D^{(j_1)}$ és $D^{(j_2)}$ ábrázolások matrixainak <u>direkt szorzata</u> alakjában irhatók fel. Ezért a /4.4/ matrixokkal létesitett ábrázolást a $D^{(j_1)}$ és a $D^{(j_2)}$ ábrázolásokból képezett <u>szorzatábrázolásnak</u> nevezzük és $D^{(j_1)}\times D^{(j_2)}$ -vel jelöljük. A $D^{(j_1)}\times D^{(j_2)}$ ábrázolás általában reducibilis.

Vessük fel most a kérdést: ha a $D^{(j_1)}\times D^{(j_2)}$ szorzatábrázolás matrixait olyan alakra hozzuk, hogy az ábrázolás reducibilis volta szembeszökővé válik, vagyis az ábrázolás minden matrixa



/4.5/

tipusu alakot ölt, ahol a sávozott négyzetekben álló álmatrixok <u>irreducibilis</u> ábrázolás matrixai, ugy <u>milyen</u> $D^{(j)}$ irreducibilis ábrázolások matrixait találjuk a sávozott kockákban?

Ha sávozott kockákban a $D^{(j_a)}, D^{(j_b)}, \ldots, D^{(j_c)}$ ábrázolások matrixai lépnek fel, ugy ezt szimbolikusan a

$$D^{(j_1)}\times D^{(j_2)} = D^{(j_a)} + D^{(j_b)} + \ldots + D^{(j_c)} \qquad /4.6/$$

egyenlettel fejezhetjük ki. Egyenletünk tartalmát szavakban igy fogalmazhatjuk meg:

Ha a $D^{(j_1)}\times D^{(j_2)}$ szorzatábrázolás matrixait a /4.5/ tipusu alakra hozzuk, ahol a sávozott négyzetekben irreducibilis ábrázolási matrixok állnak - röviden: ha a $D^{(j_1)}\times D^{(j_2)}$ szorzatábrázolást <u>kiredukáljuk</u> - , ugy a szorzatábrázolás a $D^{(j_a)}, D^{(j_b)}, \ldots, D^{(j_c)}$ irreducibilis ábrázolások direkt összegére <u>bomlik fel.</u>

Milyen $j_a, j_b, \ldots, j_l$ értékek fordulnak elő a $D^{(j_1)} \times D^{(j_2)}$ szorzatábrázolás irreducibilis ábrázolásokra való /4.6/ felbontásában?

E kérdés megválaszolása céljából első lépésként kutassuk fel a $\varphi_{j_1m_1}\chi_{j_2m_2}$ szorzatok által kifeszitett függvénytérben azokat a függvényeket, amelyek a 3.tengely körüli α szögü forgatás esetén $e^{-im\alpha}$ -val szorzódnak meg. Minthogy a $D^{(j_1)}$ ill. $D^{(j_2)}$ irreducibilis ábrázolás szerint transzformálódó $\varphi_{j_1m_1}$ ill. $\chi_{j_2m_2}$ függvényeknek a 3.tengely körüli α szögü forgatás esetén /3.41a/ értelmében $e^{-im_1\alpha}$ -val ill. $e^{-im_2\alpha}$ -val kell szorzódniok:

$$U_3(\alpha)\varphi_{j_1m_1} = e^{-im_1\alpha}\varphi_{j_1m_1},$$

$$U_3(\alpha)\chi_{j_2m_2} = e^{-im_2\alpha}\chi_{j_2m_2},$$

a $\varphi_{j_1m_1}\chi_{j_2m_2}$ szorzat a forgatás eredményeképpen az $e^{-im\alpha}$ $(m = m_1 + m_2)$ tényezővel szorzódik meg. $m = m_1 + m_2$ legnagyobb értékét akkor és csak akkor veszi fel, ha m_1 -nek és m_2 -nek egyaránt a legnagyobb értéket: j_1 -et és j_2 -t adjuk. A $\varphi_{j_1m_1}\chi_{j_2m_2}$ szorzatok által kifeszitett függvénytérben létesitett ábrázolás eszerint egyetlen függvényt:

a $\varphi_{j_1j_1}\chi_{j_2j_2}$ -t az

$$U_3(\alpha)\varphi_{j_1j_1}\chi_{j_2j_2} = e^{-i(j_1+j_2)\alpha}\varphi_{j_1j_1}\chi_{j_2j_2}$$

képlet szerint transzformál. Ezen maximális $m = j_1 + j_2$

értékhez tartozó függvényből kiindulva a /3.45/ alatt bemutatott eljárás segitségével megszerkeszthetjük függvényterünk $m = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \ldots, -j_1 - j_2$ értékekhez tartozó függvényeinek egy sorozatát, melyek a 3.szakasz f.pontjában mondottak szerint egy a $D^{(j_1+j_2)}$ irreducibilis ábrázolás szerint transzformálódó invariáns alteret alkotnak a szemügyre vett függvénytérben. Az $m = j_1 + j_2$ maximális m-értéknél eggyel kisebb $m = j_1 + j_2 - 1$ értékhez két függvényt találunk: a $\varphi_{j_1 j_1 - 1} \chi_{j_2 j_2}$ és a $\varphi_{j_1 j_1} \chi_{j_2 j_2 - 1}$ függvényeket. Minthogy függvényterünk alapfüggvényei között - melyeket mind m meghatározott értéke jellemez - az $m = j_1 + j_2 - 1$ értékhez csak e két függvény tartozik, a $D^{(j_1+j_2)}$ ábrázolás szerint transzformálódó $\psi_{j_1+j_2 m}$ $(m = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \ldots, -j_1 - j_2)$ függvények közül az $m = j_1 + j_2 - 1$ indexü ezek lineáris kombinációja kell, hogy legyen. A $\varphi_{j_1 j_1 - 1} \chi_{j_2 j_2}$ és a $\varphi_{j_1 j_1} \chi_{j_2 j_2 - 1}$ szorzatok másik független $m = j_1 + j_2 - 1$ értékkel jellemzett lineáris kombinációjából kiindulva - amelyet célszerüen az előbbire ortogonálisnak választunk - ismét a /3.45/ alatti eljárás segitségével egy a $m = j_1 + j_2 - 1, \ldots, -j_1 + j_2 - 1$ értékhez tartozó függvényekkel kifeszitett alteret szerkeszthetünk meg, mely $D^{(j_1+j_2-1)}$ szerint transzformálódik. Tekintettel arra, hogy a csökkenés sorrendjében következő $m = j_1 + j_2 - 2, j_1 + j_2 - 3$ értékekhez mindig eggyel több szorzatfüggvény tartozik, ilymódon függvényterünkben egymásután olyan, a $D^{(j)}$ ábrázolás szerint transzformálódó, a $\psi_{jj}, \psi_{jj-1}, \ldots, \psi_{jm}, \ldots \psi_{j-j}$ alapfüggvények által kifeszitett altereket szerkeszthetünk meg, amelyeket a j index $j = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2 \ldots$ szorzata jellemez. Hol ér véget e sorozat?

A $\varphi_{j_1 m_1} \chi_{j_2 m_2}$ szorzatok által kifeszitett függvénytér $(2j_1+1)(2j_2+1)$ dimenziós. Az előbbiekben, a $D^{(j_1)} \times D^{(j_2)}$ ábrázolás kiredukálását célzó eljárásunk során olyan

$$\psi_{jj}, \psi_{jj-1}, \ldots, \psi_{jm}, \ldots, \psi_{j-j} \qquad (j = j_1+j_2, j_1+j_2-1, \ldots)$$

ortonormált alapfüggvényrendszert vezettünk be, melynek j rögzitett értékéhez tartozó függvényei a $D^{(j)}$ irreducibilis ábrázolás szerint transzformálódó, $2j+1$ dimenziós invariáns alteret feszitenek ki. $(2j_1+1)(2j_2+1)$ dimenziós függvényterünk $2j+1$ dimenziós altereinek dimenziószáma összegül $(2j_1+1)(2j_2+1)$ -et kell, hogy adjon. A számtani sor összegképletét felhasználva:

$$\sum_{j_{min}}^{j_{max}=j_1+j_2} (2j+1) = (j_1+j_2+1)^2 - j_{min}^2 = (2j_1+1)(2j_2+1),$$

$$j_{min}^2 = (j_1+j_2+1)^2 - (2j_1+1)(2j_2+1) = (j_1-j_2)^2$$

adódik, ahonnan pozitiv négyzetgyököt vonva a

$$j_{min} = |j_1 - j_2|$$

értéket kapjuk. Eredményünk szerint tehát a $D^{(j_1)} \times D^{(j_2)}$ szorzatábrázolás /4.6/ felbontásában előforduló $j_a, j_b, \ldots$ értékek a következők: $j_1+j_2, j_1+j_2-1, \ldots, |j_1-j_2|$. A /4.6/ felbontás röviden tehát:

$$D^{(j_1)} \times D^{(j_2)} = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} D^{(j)}. \qquad /4.7/$$

Későbbi felhasználásra való tekintettel kiemeljük, hogy minden forgástranszformáció esetén változatlanul maradó, invariáns - vagyis a $D^{(0)}$ ábrázolás szerint transzformálódó - függvény csak akkor van a $D^{(j_1)} \times D^{(j_2)}$ szorzatábrázolás függvényterében, ha $j_1 = j_2$. Ebben az esetben a függvénytérben e g y invariáns függvényt találunk.

Eredményünk fizikai interpretációja a következő: Egy j_1 és egy j_2 impulzusmomentumu, $\varphi_{j_1m_1}$ és $\chi_{j_2m_2}$ sajátfüggvényekkel rendelkező kvantummechanikai rendszer egyesitésével kapott rendszer $\varphi_{j_1m_1}\chi_{j_2m_2}$ szorzatalaku sajátfüggvényeiből - alkalmas lineáris kombinációk bevezetésével - olyan függvényeket alkothatunk meg, amelyek a forgáscsoportnak a /4.7/ felbontásban szereplő irreducibilis ábrázolásai szerint transzformálódnak. Tekintettel arra, hogy a oldalon mondottak szerint a $D^{(j)}$ ábrázolás szerint transzformálódó állapotfüggvény j impulzusmomentumu /pontosabban: az impulzusmomentum-operátor négyzetének $j(j+1)$ sajátértékéhez tartozó/ állapotot ir le, a /4.7/ felbontás a következőket jelenti: egy j_1 és egy j_2 impulzusmomentumu kvantummechanikai rendszer egyesitésével kapott rendszer lehetséges impulzusmomentum-értékei: $j = j_1+j_2, j_1+j_2-1, \ldots, |j_1-j_2|$

b. <u>A Celbsch-Gordan sor.</u> Az előző pontbeli meggondolásaink arra az eredményre vezettek, hogy a $\varphi_{j_1m_1}\chi_{j_2m_2}$ függvényekből olyan ψ_{jm} lineáris kombinációkat képezhetünk, amelyek a forgáscsoport $D^{(j)}$ irreducibilis ábrázolásai szerint transzformálódnak:

$$\psi_{jm} = \sum_{m=m_1+m_2}' \varphi_{j_1m_1}\chi_{j_2m_2}(j_1j_2m_1m_2|j_1j_2jm) \quad /4.8/$$

ψ_{jm} -nek a $\varphi_{j_1m_1}\chi_{j_2m_2}$ szorzatok szerinti /4.8/ kifejtése a <u>Clebsch-Gordan-féle sor.</u> A $(j_1j_2m_1m_2|j_1j_2jm)$ sorfejtési együtthatók a <u>Clebsch-Gordan</u> vagy <u>vektorösszeadási együtthatók.</u> - Hely és irásmunka megtakaritása céljából a Clebsch-Gordan együtthatókat szimbolizáló zárójelek mindkét oldalán feltüntetett j_1j_2 indexeket a következőkben csak az egyik oldalon irjuk ki. $(j_1j_2m_1m_2|j_1j_2jm)$ helyett a rövidség kedvéért tehát $(j_1j_2m_1m_2|jm)$ -et irunk:

$$\psi_{jm} = \sum_{m=m_1+m_2}' \varphi_{j_1m_1}\chi_{j_2m_2}(j_1j_2m_1m_2|jm). \quad /4.9/$$

Minthogy a ψ_{jm} függvényektől megköveteljük, hogy - ugyanugy, mint a $\varphi_{j_1m_1}\chi_{j_2m_2}$ függvények - ortonormált rendszert alkossanak, a Clebsch-Gordan együtthatók matrixának unitérnek kell lennie:

$$\sum_{m_1+m_2=m}' (j_1j_2m_1m_2|jm)(j_1j_2m_1m_2|j'm')^* = \delta_{jj'}\delta_{mm'} . \quad /4.10/$$

A /4.9/, /4.10/ összefüggések természetesen csak egy közös fázistényező erejéig határozzák meg a Clebsch-Gordon együtthatókat. E határozatlanságot ugy küszöböljük ki, hogy megköveteljük: $(j_1 j_2 j_1 m_2 | jm)$ mindenkor valós, nem negativ szám legyen:

$$(j_1 j_2 j_1 m_2 | jm) \geq 0 \qquad /4.11/$$

A következőkben célunknak azt tüzzük ki, hogy a Clebsch-Gordon együtthatókat, mint a j_1, j_2, m_1, m_2, j, m indexek /kvantumszámok/ függvényeit meghatározzuk. Feladatunk megoldásában a forgáscsoport $D^{(j)}$ ábrázolása szerint transzformálódó mennyiségek spinorok segitségével való /3.79/ előállitása lesz segitségünkre.

Első lépésként vezessünk be egy ω_{jm} $(m = j, j-1, \dots, -j)$ függvényrendszert, amely ugyanazon $D^{(j)}$ ábrázolás szerint transzformálódik, mint ψ_{jm}. /Ennélfogva $|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$/. A következőkben megmutatjuk, hogy a ψ_{jm} és ω_{jm} függvényekből képezett

$$\mu_{00} = \sum_{m=-j}^{j} \frac{(-1)^{j+m}}{\sqrt{2j+1}} \omega_{jm} \psi_{j-m} \qquad /4.12/$$

normált kombináció a $D^{(j)}$ ábrázolás minden transzformációjának alkalmazása esetén változatlanul maradó, invariáns kifejezés. /Wigner jelölését használva /4.10/-et a

$$\mu_{00} = \sum_{m,m'=-j}^{j} \binom{j}{m\,m'} \omega_{jm} \psi_{jm'} \qquad /4.12a/$$

alakban irhatjuk fel, ahol a $\binom{j}{m\,m'} = \frac{(-1)^{j+m}}{\sqrt{2j+1}} \delta_{m,-m'}$

$$\binom{j}{m\,m'} = \frac{(-1)^{j+m}}{\sqrt{2j+1}} \delta_{m,-m'}$$

szimbolum a metrikus tenzor szerepét játssza; /4.12a/ a vektorok skaláris szorzatával állitható párhuzamba./

/4.12/ invarianciáját elegendő infinitezimális transzformációk esetére bizonyitani. Ha ugyanis beláttuk, hogy μ_{00} minden infinitezimális forgástranszformáció esetén változatlan marad, ugy az invariancia a /3.31/ Lie-féle karakterisztikus differenciálegyenletekből már tetszésszerinti forgatás esetére is következik.

/4.12/ forgásinvariáns voltának bizonyitása céljából alkalmazzuk ψ_{jm} -re és ω_{jm} -re az

$$1+\delta\underline{\alpha}\,\underline{I} = 1 - i\delta\underline{\alpha}\,\underline{J} = 1 - i\left(\tfrac{1}{2}\delta\alpha_- J_+ + \tfrac{1}{2}\delta\alpha_+ J_- + \delta\alpha_3 J_3\right) \qquad /4.13/$$

infinitezimális forgástranszformációt. /Itt $\delta\alpha_\pm = \delta\alpha_1 \pm i\delta\alpha_2$
μ_{00} forgástranszformáltja ekkor

$$\mu'_{00} = \sum_{m=-j}^{j} \frac{(-1)^{j+m}}{\sqrt{2j+1}} (1 - i\delta\underline{\alpha}\,\underline{J})\psi_{j-m}(1 - i\delta\underline{\alpha}\,\underline{J})\omega_{jm}.$$

A következőkben megmutatjuk, hogy μ_{00} megváltozása:

$$\delta\mu_{00} \equiv \mu'_{00} - \mu_{00} = -i\,\delta\underline{\alpha}\sum_{m=-j}^{j} \frac{(-1)^{j+m}}{\sqrt{2j+1}}\left[(\underline{J}\psi_{j-m})\omega_{jm} + \psi_{j-m}(\underline{J}\omega_{jm})\right] \qquad /4.14/$$

zérussal egyenlő. Ha e kifejezésben a $\delta\underline{\alpha}\,\underline{J}$ skaláris szorzatot a /4.13/ alatt felirt alakban irjuk ki, ugy $-i\delta\alpha_-$, $-i\delta\alpha_+$, $-i\delta\alpha_3$ együtthatói rendre a következő kifejezések lesznek:

$$-i\delta\alpha_- : \sum_{m=-j}^{j} \frac{(-1)^{j+m}}{\sqrt{2j+1}}\left[(J_+\psi_{j-m})\omega_{jm} + \psi_{j-m}(J_+\omega_{jm})\right],$$

$$-i\delta\alpha_+ : \sum_{m=-j}^{j} \frac{(-1)^{j+m}}{\sqrt{2j+1}}\left[(J_-\psi_{j-m})\omega_{jm} + \psi_{j-m}(J_-\omega_{jm})\right],$$

$$-i\delta\alpha_3 : \sum_{m=-j}^{j} \frac{(-1)^{j+m}}{\sqrt{2j+1}}\left[(J_3\psi_{j-m})\omega_{jm} + \psi_{j-m}(J_3\omega_{jm})\right].$$

A J_+, J_-, J_3 operátorok hatását megadó /3.50-51/ képleteket felhasználva azt találjuk, hogy mindhárom kifejezés zérus és igy /4.14/ értelmében $\delta\mu_{00} = 0$,
μ_{00} valóban invariáns.

Helyettesitsük most /4.12/-be ψ_{jm} helyére a /4.9/ kifejezést. μ_{00} ekkor a

$$\mu_{00}=\sum_{m_1+m_2+m=0}{}' \frac{(-1)^{j+m}}{\sqrt{2j+1}}(j_1 j_2 m_1 m_2 | j -m)\, \varphi_{j_1 m_1}\chi_{j_2 m_2}\omega_{jm} \qquad /4.14/$$

alakot ölti. Vezessük be most Wignert követve a

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix}=\frac{(-1)^{j_2-j_1+m}}{\sqrt{2j+1}}(j_1 j_2 m_1 m_2 | j -m) \qquad /4.15/$$

jelölést. Ez a <u>Wigner-féle 3-j szimbolum.</u> E jelölés felhasználásával /4.14/ a következő alakba irható:

$$\mu_{00}=(-1)^{j+j_1-j_2}\sum_{m_1+m_2+m=0}{}' \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix}\varphi_{j_1 m_1}\chi_{j_2 m_2}\omega_{jm}\,. \qquad /4.16/$$

/4.15/ felhasználásával meggyőződhetünk róla, hogy a Clebsch-Gordon együtthatókra kirótt /4.11/ követelésünk a Wigner-féle 3-j szimbolumokra vonatkozóan a

$$(-1)^{j_2-j_1+m}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix}\geq 0 \qquad /4.17/$$

feltételt jelenti.

Használjuk fel most ismét a 3. szakasz h. pontjában talált eredményünket, melynek értelmében a $D^{(1/2)}$ ábrázolás szerint transzformálódó spinorokból a /3.79/ minta szerint felépitett mennyiségek forgástranszformáció alkalmazása esetén a $D^{(j)}$ ábrázolás szerint transzformálódnak. Tegyünk fel, hogy $\varphi_{j_1 m_1}, \chi_{j_2 m_2}, \omega_{jm}$ a /3.79/ minta szerint spinorokból épül fel:

$$\varphi_{j_1 m_1}=\left[\frac{(2j_1)!}{(j_1+m_1)!\,(j_1-m_1)!}\right]^{\frac{1}{2}}\xi_{\frac{1}{2}}^{j_1+m_1}\xi_{-\frac{1}{2}}^{j_1-m_1}\,, \qquad /4.18a/$$

$$\chi_{j_2 m_2}=\left[\frac{(2j_2)!}{(j_2+m_2)!\,(j_2-m_2)!}\right]^{\frac{1}{2}}\eta_{\frac{1}{2}}^{j_2+m_2}\eta_{-\frac{1}{2}}^{j_2-m_2}\,, \qquad /4.18b/$$

$$\omega_{jm}=\left[\frac{(2j)!}{(j+m)!\,(j-m)!}\right]^{\frac{1}{2}}\zeta_{\frac{1}{2}}^{j+m}\zeta_{-\frac{1}{2}}^{j-m}\,. \qquad /4.18c/$$

/4.18/ alapján kijelenthetjük, hogy a $\varphi_{j_1 m_1}\chi_{j_2 m_2}\omega_{jm}$ szorzatfüggvények által kifeszitett függvénytér azonos a $\xi_{\frac{1}{2}}, \xi_{-\frac{1}{2}}; \eta_{\frac{1}{2}}, \eta_{-\frac{1}{2}}; \zeta_{\frac{1}{2}}, \zeta_{-\frac{1}{2}}$ spinorokból képezett

$$\xi_{\frac{1}{2}}^{j_1+m_1}\xi_{-\frac{1}{2}}^{j_1-m_1}\eta_{\frac{1}{2}}^{j_2+m_2}\eta_{-\frac{1}{2}}^{j_2-m_2}\zeta_{\frac{1}{2}}^{j+m}\zeta_{-\frac{1}{2}}^{j-m} \qquad /4.19/$$

hatványszorzatok kifeszitette függvénytérrel.

Minthogy a $\varphi_{j_1m_1}, \chi_{j_2m_2}, \omega_{jm}$ függvények rendre a $D^{(j_1)}, D^{(j_2)}, D^{(j)}$ irreducibilis ábrázolás szerint transzformálódnak, a $\varphi_{j_1m_1}\chi_{j_2m_2}\omega_{jm}$ szorzatok transzformációját a $D^{(j_1)} \times D^{(j_2)} \times D^{(j)}$ $(|j_1-j_2| \leq j \leq j_1+j_2)$ szorzatábrázolás szabja meg. Ha tekintetbe vesszük a $D^{(j_1)} \times D^{(j_2)}$ szorzatábrázolás irreducibilis ábrázolásokra való felbontását megadó /4.7/ képletet, ugy a $D^{(j_1)} \times D^{(j_2)} \times D^{(j)}$ ábrázolást a

$$D^{(j_1)} \times D^{(j_2)} \times D^{(j)} = \sum_{j_3=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} D^{(j_3)} \times D^{(j)} \qquad /4.20/$$

alakban bonthatjuk fel. A $|j_1-j_2| \leq j \leq j_1+j_2$ egyenlőtlenségre való tekintettel a j_3 összegező index /4.19/-ben egyszer és <u>csak egyszer</u> a $j_3 = j$ értéket is felveszi, igy a /4.20/ felbontás a $D^{(j)} \times D^{(j)}$ ábrázolást <u>pontosan egyszer</u> tartalmazza.

Idézzük most fel, hogy a oldalon mondottak szerint a $D^{(j_3)} \times D^{(j)}$ ábrázolás függvényterében csak akkor találunk invariáns függvényt, ha $j_3 = j$ s ekkor is csupán <u>egy</u> ilyen függvénye van a függvénytérnek. Ezt tekintetbe véve megállapithatjuk: a $D^{(j_1)} \times D^{(j_2)} \times D^{(j)}$ szorzatábrázolás függvényterében mindenkor <u>pontosan egy invariáns</u> függvény található.

Tekintettel arra, hogy a $D^{(j_1)} \times D^{(j_2)} \times D^{(j)}$ szorzatábrázolásnak a $\varphi_{j_1m_1}\chi_{j_2m_2}\omega_{jm}$ szorzatfüggvények által kifeszitett függvényterében talált /4.16/ alatti μ_{00} függvényről beláttuk, hogy invariáns, <u>ez</u> a függvény tehát függvényterünk <u>egyetlen</u> invariáns függvénye.

Ugyanakkor azonban függvényterünkben - melyben a /4.18/ képleteket követő megállapitás értelmében /nem normált/ alapfüggvényeknek a $\xi_{\frac{1}{2}}^{j_1+m_1}\ \xi_{-\frac{1}{2}}^{j_1-m_1}\ \eta_{\frac{1}{2}}^{j_2+m_2}\ \eta_{-\frac{1}{2}}^{j_2-m_2}\ \zeta_{\frac{1}{2}}^{j+m}\ \zeta_{-\frac{1}{2}}^{j-m}$ hatványszorzatokat is választhatjuk - könnyüszerrel felirhatunk egy invariáns függvényt, mely μ_{00}-tól <u>alakilag</u> különbözik.

Alkalmazzuk most a $D^{(1/2)}$ ábrázolás szerint transzformálódó $\xi_{\pm\frac{1}{2}}, \eta_{\pm\frac{1}{2}}, \zeta_{\pm\frac{1}{2}}$ spinorokra - az összes lehetséges párositások mellett /ezek száma $\binom{3}{2}=3$ / - a /4.12/ képletet. Tekintettel arra, hogy az előzőkben meggyőződtünk a /4.12/ kombináció forgásinvarianciájáról, kijelenthetjük, hogy a $\xi_{\pm\frac{1}{2}}, \eta_{\pm\frac{1}{2}}, \zeta_{\pm\frac{1}{2}}$ spinorokból képezett

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\eta_{\frac{1}{2}}\zeta_{-\frac{1}{2}}-\zeta_{\frac{1}{2}}\eta_{-\frac{1}{2}}),\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\zeta_{\frac{1}{2}}\xi_{-\frac{1}{2}}-\xi_{\frac{1}{2}}\zeta_{-\frac{1}{2}}),\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi_{\frac{1}{2}}\eta_{-\frac{1}{2}}-\eta_{\frac{1}{2}}\xi_{-\frac{1}{2}}) \qquad /4.21/$$

kifejezések invariánsak a koordinátarendszer forgatásaival szemben. Alkossuk meg most e kifejezésekből a következő hatványszorzatot:

$$(\eta_{\frac{1}{2}}\zeta_{-\frac{1}{2}}-\zeta_{\frac{1}{2}}\eta_{-\frac{1}{2}})^{j_2+j-j_1}(\zeta_{\frac{1}{2}}\xi_{-\frac{1}{2}}-\xi_{\frac{1}{2}}\zeta_{-\frac{1}{2}})^{j+j_1-j_2}(\xi_{\frac{1}{2}}\eta_{-\frac{1}{2}}-\eta_{\frac{1}{2}}\xi_{-\frac{1}{2}})^{j_1+j_2-j}. \qquad /4.22/$$

E kombináció a $\xi_{\frac{1}{2}}, \xi_{-\frac{1}{2}};\ \eta_{\frac{1}{2}}, \eta_{-\frac{1}{2}};\ \zeta_{\frac{1}{2}}, \zeta_{-\frac{1}{2}}$ spinorpárokban rendre $2j_1$-, $2j_2$- $2j$ -edfoku, tehát a /4.19/ hatványszorzatok által kifeszitett függvénytér - mely a $D^{(j_1)}\times D^{(j_2)}\times D^{(j)}$ szorzatábrázolás függvényterével azonos - függvényei közül való. A /4.2/ kombinációk invarianciájából következik, hogy a belőlük megalkotott /4.22/ kifejezés is invariáns. Most idézzük fel, hogy az előzőkben arra a megállapitásra jutottunk, hogy függvényterünkben a /4.16/ alatti μ_{00} az <u>egyetlen</u> invariáns függvény! Ebből következik, hogy a /4.22/-nek - egy ϱ állandó szorzótól eltekintve - meg kell egyeznie μ_{00} -lal:

$$\mu_{00}=\varrho(j_1 j_2 j)(\eta_{\frac{1}{2}}\zeta_{-\frac{1}{2}}-\zeta_{\frac{1}{2}}\eta_{-\frac{1}{2}})^{j_2+j-j_1}(\zeta_{\frac{1}{2}}\xi_{-\frac{1}{2}}-\xi_{\frac{1}{2}}\zeta_{-\frac{1}{2}})^{j+j_1-j_2}(\xi_{\frac{1}{2}}\eta_{-\frac{1}{2}}-\eta_{\frac{1}{2}}\xi_{-\frac{1}{2}})^{j_1+j_2-j}. \qquad /4.23/$$

A ϱ együtthatót abból a feltételből kell meghatároznunk, hogy /4.23/ jobb oldala - éppugy, mint a /4.16/ alatti μ_{00} - normált legyen. E feltételből $|\varrho|$-ra - hosszadalmassága miatt itt nem részletezett - számitással a

$$|\varrho(j_1j_2j)| = \left[\frac{(2j_1)!\,(2j_2)!\,(2j)!}{(j_2+j-j_1)!\,(j+j_1-j_2)!\,(j_1+j_2-j)!\,(j_1+j_2+j+1)!}\right]^{\frac{1}{2}} \qquad /4.23a/$$

kifejezés adódik.

Helyettesitsük be most a /4.18/ kifejezéseket /4.16/-ba:

$$\mu_{00} = (-1)^{j_1+j_2-j}\sum_{m_1+m_2+m=0}{}' \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix}\left[\frac{(2j_1)!\,(2j_2)!\,(2j)!}{(j_1+m_1)!\,(j_1-m_1)!\,(j_2+m_2)!\,(j_2-m_2)!\,(j+m)!\,(j-m)!}\right]^{\frac{1}{2}}\cdot$$

$$\cdot\,\xi_{\frac{1}{2}}^{j_1+m_1}\,\xi_{-\frac{1}{2}}^{j_1-m_1}\,\eta_{\frac{1}{2}}^{j_2+m_2}\,\eta_{-\frac{1}{2}}^{j_2-m_2}\,\zeta_{\frac{1}{2}}^{j+m}\,\zeta_{-\frac{1}{2}}^{j-m}\,. \qquad /4.24/$$

Másrészről, ha /4.23/ egyes tényezőire a binomiális tételt alkalmazzuk, μ_{00}-ra a

$$\mu_{00} = \varrho\sum_{\alpha_1\alpha_2\alpha}{}'(-1)^{\alpha_1+\alpha_2+\alpha}\frac{(j_2+j-j_1)!\,(j+j_1-j_2)!\,(j_1+j_2-j)!}{\alpha_1!\,(j_2+j-j_1-\alpha_1)!\,\alpha_2!\,(j+j_1-j_2-\alpha_2)!\,\alpha!\,(j_1+j_2-j-\alpha)!}\cdot$$

$$\cdot\,\xi_{\frac{1}{2}}^{j_1+j_2-j-\alpha+\alpha_2}\,\xi_{-\frac{1}{2}}^{j+j_1-j_2-\alpha_2+\alpha}\,\eta_{\frac{1}{2}}^{j_2+j-j_1-\alpha_1+\alpha}\,\eta_{-\frac{1}{2}}^{j_1+j_2-j-\alpha+\alpha_1}\,\zeta_{\frac{1}{2}}^{j+j_1-j_2-\alpha_2+\alpha_1}\cdot$$

$$\cdot\,\zeta_{-\frac{1}{2}}^{j_2+j-j_1-\alpha_1+\alpha_2}$$

kifejezést kapjuk. Vezessük be itt $\alpha_1, \alpha_2, \alpha$ helyett az m_1, m_2 és z összegező indexeket a következő definicióval:

$$\alpha_1 = z+j-j_1-m_2\,, \quad \alpha_2 = z+j-j_2+m_1\,, \quad \alpha = z\,.$$

Ekkor μ_{00} imént felirt kifejezése a következő alakot ölti:

$$\mu_{00} = \varrho\,(j_2+j-j_1)!\,(j+j_1-j_2)!\,(j_1+j_2-j)!\,\cdot$$

$$\cdot\sum_{m_1m_2}{}'(-1)^{2j-j_1-j_2+m_1-m_2}\,\xi_{\frac{1}{2}}^{j_1+m_1}\,\xi_{-\frac{1}{2}}^{j_1-m_1}\,\eta_{\frac{1}{2}}^{j_2+m_2}\,\eta_{-\frac{1}{2}}^{j_2-m_2}\,\zeta_{\frac{1}{2}}^{j+m}\,\zeta_{-\frac{1}{2}}^{j-m}\,\cdot$$

$$\cdot\sum_{z}{}'(-1)^{z}\left[(z+j-j_1-m_2)!\,(j_2+m_2-z)!\,(z+j-j_2+m_1)!\,(j_1-m_1-z)!\,z!\,(j_1+j_2-j-z)!\right]^{-1}\cdot \qquad /4.25/$$

/4.25/-öt /4.24/-gyel összehasonlitva a következő kifejezést kapjuk a Wigner-féle $3j$ -szimbolumra:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} = (-1)^{j-2j_1+m_1-m_2} \varrho (j_2+j-j_1)!(j+j_1-j_2)!(j_1+j_2-j)! \cdot$$

$$\cdot \left[\frac{(j_1+m_1)!(j_1-m_1)!(j_2+m_2)!(j_2-m_2)!(j+m)!(j-m)!}{(2j_1)!(2j_2)!(2j)!} \right]^{\frac{1}{2}} \cdot \qquad /4.26/$$

$$\cdot \sum_z (-1)^z \left[z!(j_1+j_2-j-z)!(z+j-j_1-m_2)!(j_2+m_2-z)!(z+j-j_2+m_1)!(j_1-m_1-z)! \right]^{-1},$$

/Itt $m_1+m_2+m=0$. Az összegezés z azon értékeire értendő, amelyek mellett egyik faktoriális-kifejezésben sem áll negativ szám./ Állapitsuk meg most a ϱ normálási együttható előjelét a /4.17/ feltétel alapján. Az $m_1=j_1$ esetben /4.26/ nevezőjében az első tényező z !, az utolsó $(-z)$! Minthogy a faktoriális kifejezésekben csak nem negativ szám állhat, z egyetlen értéket vehet fel: a $z=0$-t. Ekkor a $\sum$ jel alatt álló kifejezés nemnegativ és igy a /4.17/ előjel-feltétel a következő alakban irható fel:

$$\varrho(-1)^{j_2-j_1+m}(-1)^{j-2j_1+j_1-m_2} \geq 0 .$$

Vegyük most tekintetbe azt, hogy j_2-j_1-m mindenkor egész szám és hogy esetünkben $m_1=-m_2-m=j_1$ Ekkor feltételünk igy irható:

$$\varrho(-1)^{j+j_1-j_2} \geq 0,$$

amiből

$$\varrho = |\varrho|(-1)^{j_2-j-j_1}$$

következik: Figyelembe véve $|\varrho|$ /4.23a/ alatti kifejezését, irjuk be ezt az eredményt /4.26/-ba. Igy a Wigner-féle $3j$ szimbolum következő előállitásához jutunk /tekintetbe véve á $(-1)^{j_2-j-j_1} \cdot (-1)^{j-2j_1+m_1-m_2} =$
$= (-1)^{j_2-j_1+m+(m_1+m_2+m_1-m_2-2j_1)} = (-1)^{j_2-j_1+m}$ egyenlőséget:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} =$$

$$= (-1)^{j_2-j_1+m} \left[\frac{(j_2+j-j_1)!(j+j_1-j_2)!(j_1+j_2-j)!}{(j_1+j_2+j+1} \right]^{\frac{1}{2}} \cdot$$

$$\cdot \sum_z (-1)^z \frac{[(j_1+m_1)!(j_1-m_1)!(j_2+m_2)!(j_2-m_2)!(j+m)!(j-m)!]^{\frac{1}{2}}}{z!(j_1+j_2-j-z)!(z+j-j_1-m_2)!(j_2+m_2-z)!(j-j_2+m_1+z)!(j_1-m_1-z)!} \qquad /4.27/$$

$$(m_1+m_2+m=0).$$

/4.15/ segitségével a Clebsch–Gordon együtthatók kifejezését is felirhatjuk:

$$(j_1 j_2 m_1 m_2 | jm) = \left[\frac{(2j+1)(j_2+j-j_1)!\,(j+j_1-j_2)!\,(j_1+j_2-j)!}{(j_1+j_2+j+1)!} \right]^{\frac{1}{2}} \cdot$$

$$\cdot \sum_z{}' (-1)^z \frac{\left[(j_1+m_1)!\,(j_1-m_1)!\,(j_2+m_2)!\,(j_2-m_2)!\,(j+m)!\,(j-m)!\right]^{\frac{1}{2}}}{z!\,(j_1+j_2-j-z)!\,(z+j-j_1-m_2)!\,(j_2+m_2-z)!\,(j-j_2+m_1+z)!\,(j_1-m_1-z)!}$$

$$(m_1+m_2=m).$$

Számitsuk ki példaként a Clebsch–Gordon együtthatók értékét arra az esetre, amikor a /4.1/ alatt felirt függvényrendszerek egyike $\frac{1}{2}$ impulzusmomentumu kvantummechanikai rendszert ir le. Legyen mondjuk $j_2=\frac{1}{2}$; j_1 helyett irjunk l -et. m_2 lehetséges értékei: $\pm\frac{1}{2}$; m_1 megfelelő értékei: $m\mp\frac{1}{2}$. j az $l+\frac{1}{2}$, $l-\frac{1}{2}$ értékeket veheti fel /kivéve $l=0$ esetén, amikor csak a $j=\frac{1}{2}$ eset valósulhat meg/.

Határozzuk meg először a $j=l+\frac{1}{2}$ esethet tartozó Clebsch–Gordon–együtthatókat, a $(j-\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ m\mp\frac{1}{2}\ \pm\frac{1}{2}|jm)$ kifejezéseket.

Vizsgáljuk meg először is a /4.28/–ban álló $\sum'$ nevezőjét. Az első tényező $z!$, a második $(j-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}-j-z)!=(-z)!$. Minthogy a faktoriális–jel előtt álló z –nek és $-z$ –nek egyaránt nemnegativ számnak kell lennie, z egyetlen értéket vehet fel, a zérust, s igy a $\sum'$ is egyetlen tagból áll:

$$(j-\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\ m\mp\tfrac{1}{2}\ \pm\tfrac{1}{2}|jm)=$$

$$=\left[\frac{(2j+1)!\,(2j-1)!\,0!}{(2j+1)!}\right] \frac{\left[(j-\frac{1}{2}+m\mp\frac{1}{2})!\,(j-\frac{1}{2}-m\pm\frac{1}{2})!\,(\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2})!\,(\frac{1}{2}\mp\frac{1}{2})!\,(j+m)!\,(j-m)!\right]^{\frac{1}{2}}}{0!\,0!\,(\frac{1}{2}\mp\frac{1}{2})!\,(\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2})!\,(j-\frac{1}{2}+m\mp\frac{1}{2})!\,(j-\frac{1}{2}-m\pm\frac{1}{2})!}=$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2j}}\left[\frac{(j+m)!\,(j-m)!}{(j-\frac{1}{2}+m\mp\frac{1}{2})!\,(j-\frac{1}{2}-m\pm\frac{1}{2})!}\right]^{\frac{1}{2}}$$

Innen:

$$\left.\begin{aligned} (j-\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\ m-\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}|jm) &= \sqrt{\frac{j+m}{2j}}\,, \\ (j-\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\ m+\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}|jm) &= \sqrt{\frac{j-m}{2j}}\,. \end{aligned}\right\} \qquad /4.29/$$

A $j=l-\frac{1}{2}$ esetben külön kell vizsgálnunk az $m_2=\pm\frac{1}{2}$ eseteket.

Az $m_2=\frac{1}{2}$ esetben a /4.28/ Σ' nevezőjében a következő tényezők sorakoznak: $z!(1-z)!(z-1)!\dots$ Innen z-re a $z\geq 0$, $1\geq z$, $z\geq 1$ feltételek adódnak, aminek csak $z=1$ tehet eleget. A /4.28/ alatti Σ' ismét egyetlen tagból áll, amely a $(-1)^z$ tényező miatt negativ:

$$(j+\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\ m-\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}|jm)=$$

$$=-\left[\frac{(2j+1)!\,0!\,(2j)!\,1!}{[2(j+1)]!}\right]^{\frac{1}{2}}\frac{[(j+m)!(j-m+1)!\,1!\,0!\,(j+m)!\,(j-m)!]^{\frac{1}{2}}}{1!\,0!\,0!\,0!\,(j+m)!\,(j-m)!}= \qquad /4.30a/$$

$$=-\frac{1}{\sqrt{2(j+1)}}\left[\frac{(j-m+1)!}{(j-m)!}\right]^{\frac{1}{2}}=-\sqrt{\frac{j-m+1}{2(j+1)}}.$$

Az $m_2=-\frac{1}{2}$ esetben a /4.28/ alatti Σ' nevezőjében a tényezők: $z!(1-z)!\,z!(-z)!\dots$. Innen z-re egyebek között a $z\geq 0$, $z\leq 0$ feltételek adódnak, aminek csak $z=0$ tehet eleget. A Σ' ismét egyetlen tagjára redukálódik.

$$(j+\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\ m+\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}|jm)=$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2(j+1)}}\,\frac{[(j+m+1)!(j-m)!\,0!\,1!\,(j+m)!\,(j-m)!]^{\frac{1}{2}}}{0!\,1!\,0!\,0!\,(j+m)!\,(j-m)!}= \qquad /4.30b/$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2(j+1)}}\left[\frac{(j+m+1)!}{(j+m)!}\right]^{\frac{1}{2}}=\sqrt{\frac{j+m+1}{2(j+1)}}.$$

/4.29-30/ eredményeinket a következő táblázatba foglalhatjuk:

m_2 \ j	$l+\frac{1}{2}$	$l-\frac{1}{2}$
$\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{j+m}{2j}}$	$-\sqrt{\frac{j-m+1}{2(j+1)}}$
$-\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{j-m}{2j}}$	$\sqrt{\frac{j+m+1}{2(j+1)}}$

/4.31/

Eredményeink lehetővé teszik, hogy atommagok erős spin-pálya-kölcsönhatást feltételező egy-részecskemodellje alapján összefüggést vezessünk le a páratlan tömegszámu atommagok j impulzusmomentuma és μ mágneses momentuma között.

Az atommagban meghatározott impulzusmomentummal keringő nukleon eredő impulzusmomentumának ψ_{jm} sajátfüggvényeit /4.8/ értelmében a következőképpen épithetjük fel a pályamomentum φ_{lm} és a spin $\chi_{sm_s} \equiv \chi_{m_s}$ sajátfüggvényeiből /s mindig $\frac{1}{2}$, ezért elhagyjuk/:

$$\psi_{jm} = (l \tfrac{1}{2}\; m-\tfrac{1}{2}\; \tfrac{1}{2} | jm)\varphi_{lm-\frac{1}{2}}\chi_{\frac{1}{2}} + (l \tfrac{1}{2}\; m+\tfrac{1}{2}\; -\tfrac{1}{2} | jm)\varphi_{lm+\frac{1}{2}}\chi_{-\frac{1}{2}} \,. \qquad /4.32/$$

Az egyrészecske-modell feltételezése szerint a páratlantömegszámu atommagok impulzusmomentumát és mágneses momentumát egyetlen nukleonjuk a "páratlan" vagy "utolsó" nukleon szolgáltatja.

Ha az utolsó nukleont a /4.32/ sajátfüggvény irja le, ugy impulzusmomentuma j. A mágneses momentumot tudvalevőleg az $m=j$ mágneses kvantumszámu állapotban kell meghatároznunk:

$$\psi_{jj} = (l \tfrac{1}{2}\; j-\tfrac{1}{2}\; \tfrac{1}{2} | jj)\varphi_{lj-\frac{1}{2}}\chi_{\frac{1}{2}} + (l \tfrac{1}{2}\; j+\tfrac{1}{2}\; -\tfrac{1}{2} | jj)\varphi_{lj+\frac{1}{2}}\chi_{\frac{1}{2}} \,. \qquad /4.33/$$

Tekintettel arra, hogy a pályamomentum φ_{lm_l} ill. a spin χ_{m_s} sajátfüggvényével leirt állapotban a mágneses pálya- ill. spinmomentum $g_l m_l$ -lel ill. $g_s m_s$ -sel egyenlő /ahol g_l ill. g_s a pálya- ill. spinmomentum giromágneses együtthatója/ a /4.33/ sajátfüggvénnyel leirt részecske mágneses momentumának μ várható értékét a következő kifejezés szolgáltatja:

$$\mu = \sum_{m_s=\pm\frac{1}{2}} |(l \tfrac{1}{2}\; j-m_s\; m_s | jj)|^2 \left[g_l (j-m_s) + g_s m_s \right]. \qquad /4.34/$$

Innen /4.31/ figyelembe vételével a $j=l+\frac{1}{2}$ esetben

$$\mu = g_l (j-\tfrac{1}{2}) + g_s \tfrac{1}{2},$$

a $j=l-\frac{1}{2}$ esetben a

$$\mu = g_l \left(j+\frac{1}{2}\frac{j}{j+1} \right) - g_s \frac{1}{2}\frac{j}{j+1} \qquad /4.35/$$

eredményt kapjuk.

A közismert Schmidt-Schüler-görbék a /4.34-35/ alatt kapott $\mu(j)$ függvényeket ábrázolják.

*

A Clebsch-Gordan együtthatók másik alkalmazásaként a Σ hyperonok és K-mezonok

$$\left.\begin{array}{lll} (k_1) & \pi^- + p \longrightarrow \Sigma^- + K^+ & (v_1) \\ & \longrightarrow \Sigma^0 + K^0 & (v_1') \\ (k_2) & \pi^+ + p \longrightarrow \Sigma^+ + K^+ & (v_2) \end{array}\right\} \qquad /4.36/$$

keletkezési folyamatainak hatáskeresztmetszetei között vezetünk le egyenlőtlenségeket a töltésfüggetlenség feltevése alapján.

A töltésfüggetlenség feltevése értelmében valamely folyamat hatáskeresztmetszetét meghatározó átmeneti mátrixelem független a résztvevő részecskék töltésállapotát jelző 3. izospin-komponens M_T kvantumszámától, csak a T teljes izospintől függ:

$$(T', M_T' | S | T, M_T) = \delta_{TT'} \, \delta_{M_T M_T'} \, \alpha(T) . \qquad /4.37/$$

Itt $\delta_{TT'}$ ill. $\delta_{M_T M_T'}$ a teljes izospin ill. a 3. izospin komponens megmaradását juttatja kifejezésre. Ha az átmeneti matrixelemet olyan kezdeti és végállapot között kivánjuk képezni, amelyek nem sajátállapotai a teljes izospinnek, ugy azokat célszerü sorbafejteni az izospin sajátállapotai szerint:

$$|k\rangle = \sum_{T, M_T} |T M_T)(T M_T | k) , \quad |v\rangle = \sum_{T, M_T} |T M_T)(T M_T | v) . \qquad /4.38/$$

Ha v és k M_T meghatározott értékével jellemezhető, ugy természetesen M_T-re nem kell összegezni.

Ezen előkészületek után irjuk fel a /4.36/ folyamatok átmeneti matrixelemeit. Figyelembe véve, hogy a pion és a Σ-rész izospinje 1, a nukleoné és a kaoné 1/2, azt találjuk, hogy a /4.36/ alatti k_1, k_2, v_1, v_1', v_2 állapotok /4.38/ tipusu sorfejtésében az izospin $T=1+\frac{1}{2}=\frac{3}{2}$, $1-\frac{1}{2}=\frac{1}{2}$ értékei lépnek fel. Az izospin 3. komponensének értéke a szereplő részecskék esetében

$$\begin{array}{lccccccccc} & p & \pi^+ & \pi^- & \Sigma^+ & \Sigma^0 & \Sigma^- & K^+ & K^0 \\ M_T = & \frac{1}{2} & 1 & -1 & 1 & 0 & -1 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{array}$$

A /4.36/ alatti kétrészecske-állapotokat az egyes részecskék T_1, T_2 izospinjével és az M_{T_1}, M_{T_2} izospinkomponensekkel jellemezzük:

$$|k_1) = |1\tfrac{1}{2}\ -1\tfrac{1}{2}), \qquad |v_1) = |1\tfrac{1}{2}\ -1\tfrac{1}{2}),$$

$$|v_1') = |1\tfrac{1}{2}\ 0-\tfrac{1}{2}),$$

$$|k_2) = |1\tfrac{1}{2}\ 1\tfrac{1}{2}), \qquad |v_2) = |1\tfrac{1}{2}\ 1\tfrac{1}{2}).$$

A /4.38/ alatt szereplő együtthatók tehát éppen a $(TM_T|T_1T_2M_{T_1}M_{T_2})$ Clebsch-Gordan-együtthatók. A Clebsch-Gordan együtthatók matrixa ugyanis unitér és valós:

$$(T_1T_2M_{T_1}M_{T_2}|TM_T) = (TM_T|T_1T_2M_{T_1}M_{T_2}).$$

Értékük a /4.31/ táblázatból kiolvasható:

$$(\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}|k_1) = (\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}|v_1) = (\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}|1\tfrac{1}{2}\ -1\tfrac{1}{2}) = -\sqrt{\tfrac{2}{3}},$$

$$(\tfrac{3}{2}\ -\tfrac{1}{2}|k_1) = (\tfrac{3}{2}-\tfrac{1}{2}|v_1) = (\tfrac{3}{2}\ -\tfrac{1}{2}|1\tfrac{1}{2}-1\tfrac{1}{2}) = -\sqrt{\tfrac{1}{3}},$$

$$(\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}|v_1') = (\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}|1\tfrac{1}{2}\ 0-\tfrac{1}{2}) = \sqrt{\tfrac{1}{3}},$$

$$(\tfrac{3}{2}\ -\tfrac{1}{2}|v_1') = (\tfrac{3}{2}-\tfrac{1}{2}|1\tfrac{1}{2}\ 0-\tfrac{1}{2}) = \sqrt{\tfrac{2}{3}},$$

$$(\tfrac{3}{2}\ \tfrac{3}{2}|k_2) = (\tfrac{3}{2}\ \tfrac{3}{2}|v_2) = (\tfrac{3}{2}\ \tfrac{3}{2}|1\tfrac{1}{2}\ 1\tfrac{1}{2}) = 1.$$

/A fel nem irt együtthatók zérusok./ Irjuk fel most /4.39/-et és a Clebsch-Gordan együtthatók most talált értékeit felhasználva a /4.36/ folyamatok átmeneti mátrixelemét:

$$(v_1|S|k_1) = \frac{2}{3}\,\alpha(\tfrac{1}{2}) + \frac{1}{3}\,\alpha(\tfrac{3}{2}), \qquad /4.40a/$$

$$(v_1|S|k_1) = -\frac{\sqrt{2}}{3}\alpha\left(\tfrac{1}{2}\right) + \frac{\sqrt{2}}{3}\alpha\left(\tfrac{3}{2}\right), \qquad /4.40b/$$

$$(v_2|S|k_2) = \alpha\left(\tfrac{3}{2}\right). \qquad /4.40c/$$

Jelöljük e három átmeneti matrixelemet rendre a-val, $b/\sqrt{2}$-vel és c-vel. /4.40/ felhasználásával belátható, hogy az a,b,c /komplex/ számok összege zérus:

$$a + b + c = 0.$$

Ebből következik, hogy abszolutértékeiknek ki kell elégiteniök az

$$\begin{aligned} |a| + |b| - |c| &\geq 0, \\ |b| + |c| - |a| &\geq 0, \qquad /4.41/ \\ |c| + |a| - |b| &\geq 0 \end{aligned}$$

háromszög-egyenlőtlenségeket. Ha tekintetbe vesszük, hogy az egyes $k \to v$ folyamatok $\sigma_{k \to v}(\vartheta)$ differenciális hatáskeresztmetszete az átmeneti matrixelem abszolutérték-négyzetével arányos: $\sigma_{k\to v}(\vartheta) \sim |(v|S|k)|^2$, ugy /4.41/-ből a következő egyenlőtlenségeket kapjuk:

$$\sqrt{\sigma_{\pi^- p \to \Sigma^- K^+}} + \sqrt{\sigma_{\pi^+ p \to \Sigma^+ K^+}} - \sqrt{2\sigma_{\pi^- p \to \Sigma^0 K^0}} \geq 0,$$

$$\sqrt{\sigma_{\pi^+ p \to \Sigma^+ K^+}} + \sqrt{2\sigma_{\pi^+ p \to \Sigma^0 K^0}} - \sqrt{\sigma_{\pi^- p \to \Sigma^- K^+}} \geq 0,$$

$$\sqrt{2\sigma_{\pi^- p \to \Sigma^0 K^0}} + \sqrt{\sigma_{\pi^- p \to \Sigma^- K^+}} - \sqrt{\sigma_{\pi^+ p \to \Sigma^+ K^0}} \geq 0.$$

Ezen egyenlőtlenségek módot nyujtanak arra, hogy a mérési eredményekkel való összehasonlitás utján ellenőrizzük a töltésfüggetlenség alapul vett feltevésének helyességét.

5. Irreducibilis tenzoroperátorok

a. Irreducibilis tenzorok. Amint arról a 3.szakasz h. pontjában meggyőződtünk, a $\xi_{\frac{1}{2}}$, $\xi_{-\frac{1}{2}}$ spinorokból felépitett

$$\varphi_{jm} = \sqrt{\frac{(2j)!}{(j+m)!\,(j-m)!}}\ \xi_{\frac{1}{2}}^{j+m}\ \xi_{-\frac{1}{2}}^{j-m} \qquad (m = j,\dots,-j) \qquad /5.1/$$

mennyiségek forgatáskor a forgáscsoport $D^{(j)}$ irreducibilis ábrázolása szerint transzformálódnak. Vizsgáljuk meg most részletesen a j = 1-hez tartozó

$$\varphi_{11} = \xi_{\frac{1}{2}}^2, \qquad \varphi_{10} = \sqrt{2}\,\xi_{\frac{1}{2}}\xi_{-\frac{1}{2}}, \qquad \varphi_{1-1} = \xi_{-\frac{1}{2}}^2$$

mennyiségek megváltozását, ha az itt szereplő $\xi_{\frac{1}{2}}$, $\xi_{-\frac{1}{2}}$ spinorokra a $\delta\underline{\alpha}$ infinitezimális forgásvektoru elforgatáshoz rendelt

$$\xi' = \left(1 - \frac{i}{2}\,\delta\underline{\alpha}\,\underline{\sigma}\right)\xi \qquad /5.2/$$

transzformációt alkalmazzuk. /5.1/-et a j = 1 esetre specializálva és /5.2/-t felhasználva irhatjuk:

$$\varphi'_{1m} = \sqrt{\frac{2}{1-m^2}}\ \xi'^{\,1+m}_{\frac{1}{2}}\ \xi'^{\,1-m}_{-\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{2}{1-m^2}}\left[\left(1-\frac{i}{2}\,\delta\underline{\alpha}\,\underline{\sigma}\right)\xi_{\frac{1}{2}}\right]^{1+m}\left[\left(1-\frac{i}{2}\,\delta\underline{\alpha}\,\underline{\sigma}\right)\xi_{-\frac{1}{2}}\right]^{1-m} \approx$$

$$\approx \sqrt{\frac{2}{1-m^2}}\left\{\xi_{\frac{1}{2}}^{1+m}\,\xi_{-\frac{1}{2}}^{1-m} - i\,\delta\underline{\alpha}\left[(1+m)(\underline{\sigma}\,\xi_{\frac{1}{2}})\,\xi_{\frac{1}{2}}^{m}\,\xi_{-\frac{1}{2}}^{1-m} + (1-m)\,\xi_{\frac{1}{2}}^{1+m}(\underline{\sigma}\,\xi_{-\frac{1}{2}})\,\xi_{-\frac{1}{2}}^{-m}\right]\right\}. \qquad /5.3/$$

Vegyük most tekintetbe a $\underline{\sigma}$ vektoroperátor komponenseinek a $\xi_{\frac{1}{2}}$, $\xi_{-\frac{1}{2}}$ spinorokra való hatását megadó

$$\sigma_1\xi_{\frac{1}{2}} = \xi_{-\frac{1}{2}}, \qquad \sigma_2\xi_{\frac{1}{2}} = i\,\xi_{-\frac{1}{2}}, \qquad \sigma_3\xi_{\frac{1}{2}} = \xi_{\frac{1}{2}},$$

$$\sigma_1\xi_{-\frac{1}{2}} = \xi_{\frac{1}{2}}, \qquad \sigma_2\xi_{-\frac{1}{2}} = -i\,\xi_{\frac{1}{2}}, \qquad \sigma_3\xi_{-\frac{1}{2}} = -\xi_{-\frac{1}{2}}$$

képleteket. Ha felhasználjuk /5.1/-et is, az /5.3/ alatt összefoglalt transzformációs képleteknek a következő alakot adhatjuk:

$$\left.\begin{aligned}\varphi'_{11} &= \varphi_{11} - i\left[\frac{1}{\sqrt{2}}(\delta\alpha_1 + i\,\delta\alpha_2)\varphi_{10} + \delta\alpha_3\varphi_{11}\right],\\ \varphi'_{10} &= \varphi_{10} - \frac{i}{2}\left[\delta\alpha_1(\varphi_{11}+\varphi_{1-1}) - i\,\delta\alpha_2(\varphi_{11}-\varphi_{1-1})\right],\\ \varphi'_{1-1} &= \varphi_{1-1} - i\left[\frac{1}{\sqrt{2}}(\delta\alpha_1 - i\,\delta\alpha_2)\varphi_{10} - \delta\alpha_3\varphi_{1-1}\right].\end{aligned}\right\} \qquad /5.4/$$

Vezessük be most a $\varphi_{11}, \varphi_{10}, \varphi_{1-1}$ mennyiségek helyett azok x_1, x_2, x_3 lineáris kombinációit, melyeket az

$$\begin{aligned}x_1 &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_{11}-\varphi_{1-1}), & \varphi_{11} &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(x_1+ix_2),\\ x_2 &= \frac{i}{\sqrt{2}}(\varphi_{11}+\varphi_{1-1}), & \varphi_{10} &= x_3,\\ x_3 &= \varphi_{10}, & \varphi_{1-1} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1-ix_2)\end{aligned} \qquad /5.5/$$

összefüggések definiálnak. /5.5/ és /5.4/ felhasználásával felirhatjuk az x_1, x_2, x_3 mennyiségek forgástranszformációját megadó képleteket:

$$\begin{aligned}x'_1 &= x_1 + \delta\alpha_3 x_2 - \delta\alpha_2 x_3,\\ x'_2 &= -\delta\alpha_3 x_1 + x_2 + \delta\alpha_1 x_3,\\ x'_3 &= \delta\alpha_2 x_1 - \delta\alpha_1 x_2 + x_3.\end{aligned} \qquad /5.6/$$

Ha az x_1, x_2, x_3 mennyiségek összefoglaló jelölésére bevezetjük az $\underline{x}(x_1, x_2, x_3)$ vektort, ugy az /5.6/ alatt felirt három egyenletet a következő vektoregyenletbe tömörithetjük:

$$\underline{x}' = \underline{x} - \delta\underline{\alpha}\times\underline{x}. \qquad /5.7/$$

/5.6/ ill. /5.7/ pontosan megegyezik az $\underline{x}$ helyzetvektor derékszögü komponenseit megadó x_1, x_2, x_3 függvények jólismert transzformációs képleteivel.

Arra az eredményre jutottunk tehát, hogy a $D^{(1)}$ ábrázolásnak a $\varphi_{11}, \varphi_{10}, \varphi_{1-1}$ függvények által kifeszitett függvényterében bevezethetünk olyan uj x_1, x_2, x_3 alapfüggvényeket, amelyek forgatáskor ugyanigy transzformálódnak, mint a vektorkomponensek. Az x_1, x_2, x_3 függvények kifeszitette függvénytér tehát azonos a $D^{(1)}$ ábrázolás terével, ami azt jelenti, hogy x_1, x_2, x_3 és $\varphi_{11}, \varphi_{10}, \varphi_{1-1}$ ekvivalens ábrázolások szerint transzformálódnak. Tekintettel arra, hogy az ekvivalens ábrázolások lényegében azonosak, eredményünket igy foglalhatjuk össze:

Az $\underline{x}$ helyzetvektor x_1, x_2, x_3 derékszögü komponensei forgatáskor a forgáscsoport $D^{(1)}$ irreducibilis ábrázolása szerint transzformálódnak.

※

Vizsgáljuk meg ezután: milyen ábrázolás szerint transzformálódnak forgatáskor a /derékszögü koordinátarendszerre vonatkoztatott/ tenzorkomponensek?

Egy másodrendü tenzor t_{ik} komponense a tenzorok definiciója értelmében tudvalevőleg ugy transzformálódik, mint a két vektor - mondjuk $\underline{x}$ és $\underline{y}$ - komponenseiből képezett $x_i y_k$ alaku szorzat. A t_{ik} tenzorkomponensek tehát az x_i és y_k vektorkomponensek transzformációját megszabó ábrázolásokból képezett szorzatábrázolás szerint transzformálódnak. Ha figyelembe vesszük imént talált eredményünket, mely szerint a vektorkomponensek a $D^{(1)}$ ábrázolás szerint transzformálódnak, megállapithatjuk:

Valamely másodrendü tenzor t_{ik} komponensei forgatáskor a forgáscsoport $D^{(1)} \times D^{(1)}$ szorzatábrázolása szerint transzformálódnak.

Látjuk tehát, hogy mig az x_i vektorkomponensek forgatáskor irreducibilis ábrázolás szerint transzformálódnak, a t_{ik} tenzorkomponensek, ill. a velük azonos transzformációs tulajdonságu $x_i y_k$ szorzatok transzformációját reducibilis ábrázolás szabja meg. A következőkben ezt a reducibilis ábrázolást kivánjuk kiredukált alakra hozni. Az $x_i y_k$ szorzatok által létesitett $D^{(1)} \times D^{(1)}$ ábrázolás irreducibilis ábrázolásokra való felbontása /4.7/ szerint a következő eredményre vezet:

$$D^{(1)} \times D^{(1)} = D^{(2)} + D^{(1)} + D^{(0)}. \qquad /5.8/$$

Az $x_i y_k$ szorzatok azon lineáris kombinációit, amelyek a kiredukálás eredményeképpen kapott különböző irreducibilis ábrázolások szerint transzformálódnak, gépiesen meghatározhatjuk a következő módon: Először az komponensekből /5.5/ mintájára megalkotjuk a

$$\varphi_{11} = -\frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + i x_2), \qquad \chi_{11} = -\frac{1}{\sqrt{2}}(y_1 + i y_2),$$

$$\varphi_{10} = x_3, \qquad \chi_{10} = y_3,$$

$$\varphi_{1-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 - i x_2), \qquad \chi_{1-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(y_1 - i y_2)$$

mennyiségeket(az $\underline{x}$ ill. $\underline{y}$ vektor un. gömbi komponenseit); ezekből azután a Clebsch-Gordan együtthatók /4.28/ kifejezését felhasználva, a Clebsch-Gordan sor /4.8/ képlete alapján felépitjük a $D^{(2)}$, $D^{(1)}$, $D^{(0)}$ szerint transzformálódó ψ_{2m}, ψ_{1m}, ψ_{0m} mennyiségeket. A most leirt eljárás elvégzését, mint hasznos gyakorlatot az olvasó figyelmébe ajánljuk. Mi azonban itt néhány egyszerü vektor-algebrai ismeretre támaszkodva közvetlenül fogjuk megszerkeszteni az $x_i y_k$ szorzatoknak a $D^{(1)}$ ill. $D^{(0)}$ irreducibilis ábrázolások szerint transzformálódó, keresett lineáris kombinációit.

Az $x_i y_k$ komponensekkel rendelkező tenzor <u>átlósösszege</u> /spurja/ az $\underline{x}\underline{y} = x_1 y_1 + x_2 y_2 + x_3 y_3$ skaláris szorzattal egyenlő. Ez ismeretes módon forgatások esetén változatlan marad, ami azt jelenti, hogy <u>a $D^{(0)}$ irreducibilis ábrázolás szerint transzformálódik.</u> - Az $x_i y_k$ tenzor $\frac{1}{2}(x_i y_k - x_k y_i)$ <u>antiszimmetrikus részének</u> három független komponense $(i,k = 3,1;\ 1,2;\ 2,3;)$ nem más, mint az $\frac{1}{2}\underline{x}\times\underline{y}$ vektorszorzat három komponense. Az $x_i y_k$ szorzatok e három lineáris kombinációja tehát egy vektor három komponensének transzformációs törvényét követi, vagyis a $D^{(1)}$ irreducibilis ábrázolás szerint transzformálódik. - Vonjuk le most $x_i y_k$ -ból a $D^{(1)}$ szerint transzformálódó $\frac{1}{2}(x_i y_k - x_k y_i)$ antiszimmetrikus részt. Eredményül az $\frac{1}{2}(x_i y_k + x_k y_i)$ szimmetrikus tenzor adódik. Ebből vonjuk le még a $D^{(0)}$ szerint transzformálódó $\underline{x}\,\underline{y}$ skaláris szorzatot is, megszorozva az egységnyi átlósösszegü, invariáns $\frac{1}{3}\,\delta_{ik}$ tenzorral. Eredményül az $\frac{1}{2}(x_i y_k + x_k y_i) - \frac{1}{3}\delta_{ik}\,\underline{x}\,\underline{y}$ <u>zérus átlósösszegü szimmetrikus tenzort</u> kapjuk, melyet öt független komponens jellemez. Minthogy e tenzor a $D^{(1)} \times D^{(1)}$ szorzatábrázolás szerint transzformálódó $x_i y_k$ tenzorból a ($D^{(1)}$ szerint transzformálódó) antiszimmetrikus rész és a ($D^{(0)}$ szerint transzformálódó) átlósösszeg eltávolitása által állott elő, /5.8/ alapján kijelenthetjük, hogy ennek öt független komponense a <u>$D^{(2)}$ irreducibilis ábrázolás szerint transzformálódik.</u>

Eredményeinket a következőkben foglalhatjuk össze:

A másodrendü tenzor transzformációs sajátságait reprezentáló $x_i y_k$ szorzatok a $D^{(1)} \times D^{(1)}$ szorzatábrázolás szerint transzformálódnak. E szorzatábrázolás kiredukálása céljából felkutattuk az $x_i y_k$ szorzatok azon lineáris kombinációit, amelyek az /5.8/ felbontásban szereplő irreducibilis ábrázolások szerint transzformálódnak. Ezek a következők:

Az	$\underline{x}\underline{y} \equiv x_1 y_1 + x_2 y_2 + x_3 y_3$	<u>átlósösszeg</u>	$D^{(0)}$	szerint,
az	$\frac{1}{2}(x_i y_k - x_k y_i)$	<u>antiszimmetrikus rész</u>	$D^{(1)}$	"
az	$\frac{1}{2}(x_i y_k + x_k y_i) - \frac{1}{3}\delta_{ik}\underline{x}\underline{y}$	$\left\{\begin{array}{l}\underline{\text{zérus átlósösszegü}}\\ \underline{\text{szimmetrikus tenzor}}\end{array}\right\}$	$D^{(2)}$	"

transzformálódik.

⁂

A kettőnél magasabbrendü tenzorokról az előbbiek alapján megállapithatjuk, hogy ezek a $D^{(1)} \times D^{(1)} \times \ldots \times D^{(1)}$ /tényezők száma = a tenzor rendje/ reducibilis szorzatábrázolás szerint transzformálódnak. Az ennek kiredukálása során adódó irreducibilis ábrázolásokat a /4.7/ felbontás segitségével az olvasó könnyen meghatározhatja. A tenzorkomponensek azon lineáris kombinációit, amelyek az igy kapott irreducibilis ábrázolások szerint transzformálódnak, a másodrendü tenzoroknál látottak mintájára szimmetrizálással, antiszimmetrizálással és az átlósösszeg zérussá tétele /"spurtalanitás"/ utján kaphatjuk meg.

⁂

Az elmondottakból látjuk, hogy valamely tenzor derékszögü koordinátatengelyekre vonatkoztatott komponensei általában a forgáscsoport reducibilis ábrázolásai szerint transzformálódnak. Ezen ábrázolások kiredukálása utján bevezethetjük azonban a tenzorkomponensek olyan T_{kq} kombinációit, amelyek a forgáscsoport valamely $D^{(k)}$ irreducibilis ábrázolása szerint transzformálódnak:

$$T'_{kq} = \sum_{q'} T_{kq'} D^{(k)}_{q'q}(\alpha\beta\gamma). \qquad /5.9/$$

Az igy bevezetett T_{kq} $(q = k, k-1, \ldots, -k)$ mennyiségeket irreducibilis tenzorkomponenseknek, rövidebben: irreducibilis tenzoroknak nevezzük.

b. Irreducibilis tenzoroperátorok. Az impulzusmomentummal kapcsolatos kvantummechanikai problémáknál, különösképpen pedig a magreakciók és magsugárzások esetében fellépő szögeloszlás- és szögkorreláció-problémáknál fontos szerepet játszanak az olyan operátorok, amelyek forgatáskor irreducibilis tenzorok módjára, vagyis az /5.9/ képlet szerint transzformálódnak. Az ilyen operátorokat irreducibilis tenzoroperátoroknak nevezzük.

Vezessük le most, kiindulva az /5.9/ definiciós képletből, a vizsgált rendszer $\underline{J}$ impulzusmomentum-operátorának a T_{kq} irreducibilis tenzoroperátorral való felcserélési szabályát . - Az infinitezimális forgásoperátor és a impulzusmomentum-operátor kapcsolatát ismerve, a koordinátarendszer $\delta\underline{\alpha}$ infinitezimális forgásvektoru elforgatásához rendelt unitér operátort a

$$D = 1 + i\delta\underline{\alpha}\,\underline{J} \qquad /5.10/$$

alakban irhatjuk fel. A D operátornak az /5.9/ transzformációs képletben szereplő $D^{(k)}_{q'q}$ matrixelemei eszerint kifejezhetők az impulzusmomentum-operátor matrixelemeivel:

$$D^{(k)}_{q'q} = \delta_{q'q} + i\,\delta\underline{\alpha}\,(kq'|\underline{J}|kq),$$
$$T'_{kq} = T_{kq} + i\,\delta\underline{\alpha} \sum_{q'} T_{kq'}(kq'|\underline{J}|kq). \qquad /5.11/$$

T'_{kq}-t azonban más alakban is felirhatjuk. A kvantummechanikából tudjuk, hogy valamely D unitér operátorral leirt transzformáció alkalmazásakor a T_{kq} irreducibilis tenzoroperátor - mint a rendszert jellemző minden operátor - a

$$T'_{kq} = D T_{kq} D^{-1}$$

módon transzformálódik. D-nek /5.10/ alatt megadott alakját felhasználva irhatjuk:

$$T'_{kq} = (1 + i\delta\underline{\alpha}\,\underline{J})T_{kq}(1 - i\delta\underline{\alpha}\,\underline{J}) = T_{kq} + i\delta\underline{\alpha}[\underline{J}, T_{kq}]. \qquad /5.12/$$

Vessük egybe /5.12/-t /5.11/-gyel. Az összehasonlitás eredményeként felirhatjuk:

$$[\underline{J}, T_{kq}] = \sum_{q'} T_{kq'}(kq'|\underline{J}|kq). \qquad /5.13/$$

Az impulzusmomentum-komponensek matrixelemeinek /3.50-51/-ből leolvasható

$$(kq'|J_\pm|kq) = \delta_{q',q\pm 1}\sqrt{k(k+1) - q(q\pm 1)}$$

$$(kq'|J_3|kq) = \delta_{q'q}\, q$$

kifejezéseit felhasználva, az /5.13/ felcserélési szabály az egyes impulzusmomentum-komponensekre a következő alakban irható fel:

$$[J_\pm, T_{kq}] = T_{kq\pm 1}\sqrt{k(k+1) - q(q\pm 1)}, \qquad /5.14/$$

$$[J_3, T_{kq}] = T_{kq}\cdot q. \qquad /5.15/$$

A $\underline{J}^2$ operátor T_{kq}-val való felcserélési szabályára /5.14-15/-ből

$$[\underline{J}^2, T_{kq}] = j(j+1)T_{kq}$$

adódik.

Az /5.14-15/ felcserélési szabályok egyenértéküek a T_{kq} irreducibilis tenzoroperátorok definiálására használt /5.9/ képlettel. Racah, aki az irreducibilis tenzoroperátorok elméletét számos eredménnyel gazdagitotta, az /5.14-15/ felcserélési szabályokat használta fel az irreducibilis tenzoroperátorok definiálására.

c. A Wigner-Eckart teoréma. A most következőkben az irreducibilis tenzoroperátorok matrixelemeire vonatkozó fontos tételt bizonyitunk be: a Wigner-Eckart teorémát.

Kiindulásként vegyük szemügyre a $\psi_{\gamma j m}$ impulzusmomentum-sajátfüggvényből a T_{kq} irreducibilis tenzoroperátor alkalmazásával kapott $T_{kq}\psi_{\gamma j m}$ függvényt; /Itt γ a ψ függvény jellemzéséhez j és m mellett szükséges kvantumszámok együttes jelölésére szolgál./ Az irreducibilis tenzoroperátorokat definiáló /5.9/ képletet és az impulzusmomentum-sajátfüggvények /3.84/ forgástranszformációs képletét tekintetbe véve megállapithatjuk, hogy $T_{kq}\psi_{\gamma j m}$ a forgáscsoport $D^{(k)}\times D^{(k)}$ szorzatábrázolása szerint transzformálódik. Egy ilyen mennyiséget a /4.9/ Clebsch-Gordan sor megforditásaként kapott összefüggés értelmében kifejezhetünk a forgáscsoport irreducibilis ábrázolásai szerint transzformálódó $\lambda_{j''m''}$ $(|j-k|\leq j''\leq j+k)$ mennyiségek lineáris kombinációjaként. A Clebsch-Gordan együtthatók valós voltát figyelembe véve irhatjuk:

$$T_{kq}\psi_{\gamma j m}=\sum_{j''=|j-k|}^{j+k}(jmkq|j''m'')\lambda_{j''m''}\,. \qquad /5.16/$$

Képezzük most /5.16/-ot felhasználva a T_{kq} operátornak a $\psi_{\gamma' j' m'}$ és $\psi_{\gamma j m}$ állapotokat összekötő matrixelemét:

$$(\psi_{\gamma' j' m'},T_{kq}\psi_{\gamma j m})\equiv(\gamma' j' m'|T_{kq}|\gamma j m)=(jmkq|j'm')(\psi_{\gamma' j' m'},\lambda_{j'm'})\,. \qquad /5.17/$$

A matrixelem képzésénél figyelembe vettük, hogy $\psi_{\gamma' j' m'}$ és $\lambda_{j''m''}$ függvények $j'\neq j''$ és/vagy $m'\neq m''$ esetén ortogonálisak, minthogy ekkor e sajátfüggvények a $\underline{J}^2$ és/vagy a J_3 hermitikus operátor különböző sajátértékeihez tartoznak.

Vegyük most szemügyre az /5.17/-ben szereplő $(\psi_{\gamma' j' m'},\lambda_{j'm'})$ skaláris szorzatot. Ez nyilvánvalóan a

$\lambda_{j'm'}$ függvénynek a $\psi_{\gamma j'm'}$ teljes függvényrendszer szerinti

$$\lambda_{j'm'} = \sum_{\gamma'} \psi_{\gamma' j'm'} (\psi_{\gamma j'm'}, \lambda_{j'm'}) \qquad /5.18/$$

sorfejtésében szereplő kifejtési együttható. Be fogjuk bizonyitani, hogy $(\psi_{\gamma j'm'}, \lambda_{j'm'})$ <u>nem függ m' -től.</u> Ebből a célból irjuk fel egyrészről /5.18/-at, m' helyére $m'+1$ -et irva:

$$\lambda_{j'm'+1} = \sum_{\gamma'} \psi_{\gamma' j'm'+1} (\psi_{\gamma' j'm'+1}, \lambda_{j'm'+1}). \qquad /5.19/$$

Másrészről alkalmazzuk /5.18/-ra a $J_+/\sqrt{j'(j'+1)-m'(m'+1)}$ operátort. /3.50-ből látható, hogy az $\lambda_{j'm'}$ -t $\lambda_{j'm'+1}$ -be, $\psi_{\gamma' j'm'}$ -t $\psi_{\gamma' j'm'+1}$ -be viszi át. A sorfejtési együtthatót az operátor természetesen változatlanul hagyja. Az eredmény tehát:

$$\lambda_{j'm'+1} = \sum_{\gamma'} \psi_{\gamma' j'm'+1} (\psi_{\gamma j'm'}, \lambda_{j'm'}). \qquad /5.20/$$

/5.19/-et és /5.20-at összehasonlitva a

$$(\psi_{\gamma j'm'}, \lambda_{j'm'}) = (\psi_{\gamma j'm'+1}, \lambda_{j'm'+1})$$

eredményt olvashatjuk le, amiből látható, hogy $(\psi_{\gamma j'm'}, \lambda_{j'm'})$ valóban nem függ m' -től, amint állitottuk.

Ezen eredmény alapján az /5.17/-ben szereplő $(\psi_{\gamma j'm'}, \lambda_{j'm'})$ mennyiség jelölésére a $(\gamma' j' \| T_k \| \gamma j)$ szimbolumot vezetjük be, amelyben a feleslegesnek bizonyult m' kvantumszám nem szerepel, viszont helyet kapnak a $\lambda_{j'm'}$ -t definiáló /5.16/ képletben szereplő k, γ, j kvantumszámok. A most bevezetett jelölést felhasználva a $(\gamma' j' m' | T_{kq} | \gamma j m)$ matrixelemet megadó /5.17/ képlet a

$$(\gamma' j' m' | T_{kq} | \gamma j m) = (j m k q | j' m')(\gamma' j' \| T_k \| \gamma j) \qquad /5.21/$$

alakban irható fel. $(\gamma' j' \| T_k \| \gamma j)$ -t a T_{kq} irreducibilis tenzoroperátor <u>redukált matrixelemének</u> nevezzük.

/5.21/ eredményünk éppen a bizonyitani kivánt <u>Wigner-Eckert-féle teoréma,</u> melynek tartalmát szavakban igy fejezhetjük ki: Valamely T_{kq} irreducibilis tenzoroperátor meghatározott impulzusmomentumu állapotokat összekötő matrixeleme egy Clebsch-Gordan együttható és egy redukált matrixelem szorzata alakjában állitható elő. A mátrixelemnek a mágneses kvantumszámoktól (m, q, m') való függését a Clebsch-Gordan együttható adja meg, a redukált matrixelem független ezektől.

*

A következőkben néhány példát mutatunk be az /5.21/ összefüggés alkalmazásainak megvilágitására.

A kvadrupolmomentum operátora egy másodrendü irreducibilis tenzoroperátor: Q_{2q}. Ennek várható értéke a $\gamma j m$ kvantumszámokkal jellemzett állapotban /5.21/ szerint:

$$(\gamma j m|Q_{2q}|\gamma j m) = (j m 2 q|j m)(\gamma j\|Q_2\|\gamma j). \qquad /5.22/$$

Az itt szereplő Clebsch-Gordan együttható csak $m+q=m$, $q=0$ esetén különbözhet zérustól. A Q_{2q} irreducibilis tenzoroperátor öt komponense $(q=2,1,\dots,-2)$ közül tehát csak Q_{20} várható értéke különbözik zérustól. /4.28/-ból meghatározva a szükséges Clebsch-Gordan-együtthatót, irhatjuk:

$$(\gamma j m|Q_{20}|\gamma j m) = (j m 2 0|j m)(\gamma j\|Q_2\|\gamma j) =$$

$$= \frac{3m^2 - j(j+1)}{[j(j+1)(2j-1)(2j+3)]^{\frac{1}{2}}}(\gamma j\|Q_2\|\gamma j). \qquad /5.23/$$

Az atommag Q kvadrupolmomentuma Q_{20}-nak az $m=j$ állapotban képezett várható értéke:

$$Q \equiv (\gamma j j|Q_{20}|\gamma j j) = \left[\frac{j(2j-1)}{(j+1)(2j+3)}\right]^{\frac{1}{2}}(\gamma j\|Q_2\|\gamma j). \qquad /5.24/$$

Ha /5.23/-ból /5.24/ segitségével kiküszöböljük a redukált matrixelemet, a következő kapcsolatot kapjuk az atommag Q kvadrupolmomentuma, és a kvadrupolmomentumnak az m mágneses kvantumszámu állapotban képezett

$$Q_m \equiv (\gamma j m | Q_{20} | \gamma j m)$$

várható értéke között:

$$Q_m = \frac{3m^2 - j(j+1)}{j(2j-1)} Q .$$

Tekintettel arra, hogy az /5.23/-ban szereplő Clebsch-Gordan együttható csak a

$$|j-j| \leq 2 \leq j+j ,$$
$$1 \leq j$$

egyenlőtlenség teljesülése esetén különbözik zérustól, azt is megállapithatjuk, hogy 0 és $\frac{1}{2}$ impulzusmomentumu állapotban a kvadrupolmomentum mindenkor zérus.

*

Következő példaként egy nevezetes izospin kiválasztási szabályt vezetünk le /5.21/ alapján. Az atommag és az elektromágneses tér kölcsönhatási Hamilton-operátora a saját mágneses momentumot elhanyagolva egy izoskalárnak és egy izovektor 3.komponensének összege alakjában irható fel:

$$H' = \frac{e}{2c} \sum_{i=1}^{A} (1 + \tau_3^{(i)}) \varphi_i \, \mathfrak{A}(r_i) . \qquad /5.25/$$

Vizsgáljuk meg most valamely atommag két azonos izospinü állapota között az elektromos dipolátmenet valószinüségét. Az elektromos dipolátmenet valószinüségéhez az /5.25/ kölcsönhatási Hamilton-operátor izoskalár tagja nem adhat járulékot. Ez ugyanis pontosan olyan alaku, mint A számu, egyenként $\frac{e}{2}$ töltésü részecske rendszerének kölcsönhatási Hamilton-operátora. Egy csupa egyenlő töltésü részecskéből álló rendszer azonban nyilvánvalóan nem bocsáthat ki dipolsugárzást, hiszen az ilyen rendszer töltésközéppontja egybeesik /az egyenletes mozgást végző/ tömegközépponttal, s igy rezgőmozgást sohasem végezhet. Határozzuk meg ezért az /5.25/ kölcsönhatási operátor "izovektor 3. komponense" részének átmeneti matrixelemét két azonos izospinü állapot között. - Egy /izo-/ vektor 3. komponense /5.5/ szerint egy 1. rendü irreducibilis tenzoroperátor 0 indexü komponense. Jelöljük ezért az /5.25/ operátor "3. izovektorkomponens" részét $\mathcal{T}_{10}$ -lal. Ennek keresett matrixeleme /5.21/ szerint:

$$(\gamma' T M_T | \mathcal{T}_{10} | \gamma T M_T) = (T M_T 1 0 | T M_T)(\gamma' T \| \mathcal{T}_{10} \| \gamma T).$$

Itt T az izospint, M_T pedig az izospin 3 vetületét jelöli: $M_T = (N-Z)/2$. A szereplő Clebsch-Gordan együtthatót /4.28/-ból meghatározva az átmeneti matrixelem a

$$(\gamma' T M_T | \mathcal{T}_{10} | \gamma T M_T) = \frac{M_T}{\sqrt{T(T+1)}} (\gamma' T \| \mathcal{T}_1 \| \gamma T)$$

alakot ölti. Szimmetrikus mag $(M_T \equiv (N-Z)/2 = 0)$ esetében az átmeneti matrixelem eltünik. Eredményünk szerint tehát szimmetrikus magban azonos izospinü állapotok között az elektromos dipólátmenetet az izospinkiválasztási szabályok tiltják. E kiválasztási szabályt a magspektroszkópiai tapasztalatok megerősitik.

*

Vezessük be a J_1, J_2, J_3 impulzusmomentum-komponensek helyett a

$$J_{+1} = -\frac{1}{\sqrt{2}}(J_1 + i J_2),$$

$$J_0 = J_3,$$

$$J_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(J_1 - i J_2)$$

operátorokat, amelyek elsőrendü irreducibilis tenzorkomponensnek tekinthetők. Ezekre alkalmazva az /5.21/ tételt, a

$$(j'm' | J_q | jm) = (jm 1 q | j'm')(j' \| J_q \| j) \qquad /5.26/$$

eredményt kapjuk. Másrészről J_q matrixelemeit /3.50-51/ alapján közvetlenül is felirhatjuk. A Clebsch-Gordan együtthatók /4.28/ kifejezésének felhasználásával a

$$(j'm' | J_q | jm) = (jm 1 q | j'm') \delta_{jj'} [j(j+1)]^{\frac{1}{2}} \qquad /5.27/$$

eredményre jutunk. /5.26/ és /5.27/ összehasonlitásával azt találjuk, hogy az impulzusmomentum-operátor redukált matrixeleme:

$$(j'\|J\|j) = \delta_{jj'}[j(j+1)]^{\frac{1}{2}}.$$

d. Vektoroperátorok redukált matrixeleme. Ha $\underline{v}$ egy vektoroperátor, ugy képezzük ennek v_x, v_y, v_z derékszögü komponenseiből az /5.5/ minta szerint a

$$v_{+1} = -\frac{1}{\sqrt{2}}(v_x + iv_y),$$

$$v_0 = v_3$$

$$v_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(v_x - iv_y)$$

kombinációkat. Minthogy ezeket forgatáskor a $D^{(1)}_{qq'}(\alpha\beta\gamma)$ matrix transzformálja, az irreducibilis tenzoroperátorok definiciója értelmében egy T_{1q} elsőrendü irreducibilis tenzoroperátor komponenseit alkotják $(q = 1, 0, -1)$. /5.14-15/ értelmében a v_q komponensek az impulzusmomentum-operátor komponenseivel a következő felcserélési szabályoknak tesznek eleget:

$$[J_+, v_{+1}] = 0, \quad [J_+, v_0] = \sqrt{2}\, v_{+1}, \quad [J_+, v_{-1}] = \sqrt{2}\, v_0,$$

$$[J_3, v_{+1}] = v_{+1}, \quad [J_3, v_0] = 0, \quad [J_3, v_{-1}] = -v_{-1},$$

$$[J_-, v_{+1}] = \sqrt{2}\, v_0, \quad [J_-, v_0] = \sqrt{2}\, v_{-1}, \quad [J_-, v_{-1}] = 0.$$

E felcserélési szabályok ismételt alkalmazásával meggyőződhetünk a

$$2(\underline{J}^2 v_q + v_q \underline{J}^2) = 4J_q(\underline{J}\underline{v}) + \underline{J}^4 v_q - 2\underline{J}^2 v_q \underline{J}^2 + v_q \underline{J}^4 \qquad /5.28/$$

összefüggés fennállásáról. Képezzük most /5.28/ matrixelemét a $\underline{J}^2$ operátor ugyanazon $j(j+1)$ sajátértékéhez tartozó két állapot között. Ekkor $\underline{J}^2$ mindenütt $j(j+1)$ -gyel helyettesithető. A jobb oldalon ennélfogva a $\underline{J}^4 v_q - 2\underline{J}^2 v_q \underline{J}^2 + v_q \underline{J}^4$ kifejezés matrixeleme zérust ad, s igy ($4j(j+1)$ -gyel végigosztva) a

$$(jm'|v_q|jm) = \frac{(jm'|J_q(\underline{J}\underline{v})|jm)}{j(j+1)} \qquad /5.29/$$

eredményre jutunk. A jobboldalon egy operátor-szorzat matrixeleme áll. Ezt matrixszorzat alakjában is felirhatjuk:

$$(jm'|v_q|jm) = \frac{1}{j(j+1)} \sum_{j''m''}' (jm'|J_q|j''m'')(j''m''|\underline{J}\underline{v}|jm). \qquad /5.30/$$

Vegyük itt tekintetbe, hogy a $\underline{J}\underline{v}$ operátor forgatáskor változatlan marad, vagy, ami ugyanazt jelenti, a $D^{(0)}$ irreducibilis ábrázolás szerint transzformálódik. $\underline{J}\underline{v}$ tehát egy zérusrendü irreducibilis tenzor. Felhasználva a /4.28/-ból adódó $(j''m''00|jm) = \delta_{j''j}\,\delta_{m''m}$ eredményt, /5.21/ alapján irhatjuk:

$$(j''m''|\underline{J}\underline{v}|jm) = \delta_{j''j}\,\delta_{m''m}\,(j''\|\underline{J}\underline{v}\|j). \qquad /5.31/$$

Látjuk tehát, hogy egy zérusrendü irreducibilis tenzor matrixa az impulzusmomentum-kvantumszámokban átlós alaku. Az átlós matrixelemek megegyeznek a redukált matrixelemmel. Ha /5.31/ eredményünket /5.30/-ba helyettesitjük, a

$$(jm'|v_q|jm) = \frac{(jm'|J_q|jm)(j\|\underline{J}\underline{v}\|j)}{j(j+1)} \qquad /5.32/$$

eredményt kapjuk. Ha ide még behelyettesitjük /5.27/-et, s az igy kapott

$$(jm'|v_q|jm) = (jm1q|jm')\,\frac{(j\|\underline{J}\underline{v}\|j)}{\sqrt{j(j+1)}} \qquad /5.33/$$

képletet összehasonlitjuk a v_q -ra az /5.21/ Wigner-Eckart teorémából adódó

$$(jm'|v_q|jm) = (jm1q|jm')(j\|v_q\|j)$$

összefüggéssel, ugy a v_q vektoroperátor-komponens azonos j-vel jellemzett állapotokat összekötő redukált matrixelemére a

$$(j\| v_q \| j) = \frac{(j\| \underline{J}\,\underline{v} \| j)}{\sqrt{j(j+1)}} \qquad /5.34/$$

kifejezést kapjuk. Az /5.32/ ill. /5.34/ eredményünk fizikailag ugy interpretálható, hogy a $\underline{v}$ vektor a szóbanforgó kvantummechanikai rendszer $\underline{J}$-teljes impulzusmomentuma körül precessziót végez; ennek következtében $\underline{v}$-nek csak $\underline{J}$-vel párhuzamos komponense rendelkezik zérustól különböző várható értékkel, a $\underline{J}$-re merőleges komponens várható értéke, "időátlaga" zérus. Az impulzusmomentum szigoru kvantumelméletének ez az eredménye alapvető szerepet játszik a heurisztikus vektormodellben.

A következőkben az /5.32/ ill. a vele ekvivalens /5.33-34/ eredményeinknek két alkalmazását mutatjuk be.

Mindenekelőtt határozzuk meg egy $\underline{L}$ pályamomentumu, $\underline{S}$ spinü rendszer $\underline{M} = g_l \underline{L} + g_s \underline{S} \equiv \frac{1}{2}(g_l+g_s)(\underline{L}+\underline{S}) + \frac{1}{2}(g_l-g_s)(\underline{L}-\underline{S})$ mágneses momentum-operátorának várható értékét a teljes impulzusmomentum, a pályamomentum és a spin négyzetének $j(j+1)$, $l(l+1)$ ill. $s(s+1)$ sajátértékével jellemzett állapotban. Az /5.33/ képletbe $v_q = M_q$-t helyettesitve, $m' = m$-et irva, valamint a Clebsch-Gordan-együtthatók /4.28/ kifejezéséből kapott $(j\,m\,1\,q|j\,m) = \delta_{q0}\, m/\sqrt{j(j+1)}$ értéket felhasználva a

$$(jm|M_q|jm) = \delta_{q0} \frac{m}{j(j+1)} (j\| \underline{J}\,\underline{M} \| j) =$$

$$/5.35/$$

$$= \delta_{q0} \frac{m}{j(j+1)} (j\| \tfrac{1}{2}(g_l+g_s)\underline{J}^2 + \tfrac{1}{2}(g_l-g_s)(\underline{L}^2-\underline{S}^2) \| j) =$$

$$= \delta_{q0}\, m \left[\tfrac{1}{2}(g_l+g_s) + \tfrac{1}{2}(g_l-g_s) \frac{l(l+1)-s(s+1)}{j(j+1)} \right]$$

eredményre jutunk. Itt felhasználtuk, hogy a $\underline{J}^2$, $\underline{L}^2$, $\underline{S}^2$ skaláris operátoroknak az azonos j-vel jellemzett állapotokat összekötő redukált matrixeleme megegyezik sajátértékeikkel.

/5.35/-öt először az anomális Zeeman-effektus tárgyalására alkalmazzuk. Az $\underline{M}$ mágneses momentumnak a $H(0,0,H)$ mágneses térrel való kölcsönhatási energiaoperátora

$$K = -HM \cdot \frac{e\hbar}{2mc} \,. \qquad /5.36/$$

Az /5.36/ perturbáció okozta energia-eltolódást gyenge mágneses térben amely mellett j, l, s, m közelitőleg jó kvantumszám marad, /5.36/-nak /5.35/ segitségével számitott várható értéke szolgáltatja:

$$\Delta E = (jm|K|jm) = -\frac{eH}{2mc}\hbar m\left[\frac{1}{2}(g_l+g_s)+\frac{1}{2}(g_l-g_s)\frac{l(l+1)-s(s+1)}{j(j+1)}\right].$$

Alkalmazzuk e képletet az alkáliatomok anomális Zeeman-effektusa esetére, amikoris $g_l=-1$, $g_s=-2$:

$$\Delta E = \frac{eH}{2mc}\hbar m\left[\frac{3}{2}-\frac{l(l+1)-s(s+1)}{2j(j+1)}\right].$$

Második alkalmazásként a páratlan tömegszámu atommagok μ mágnesesmomentuma és a j magspin között vezetünk le összefüggést az egyrészecske-modell alapján. E modell szerint a mag spinje és teljes mágnesesmomentuma az utolsó páratlan nukleontól származik. /5.35/ alapján irhatjuk:

$$\mu = (jj|M_0|jj) =$$
$$= j\left[\frac{1}{2}(g_l+g_s)+\frac{1}{2}(g_l-g_s)\frac{l(l+1)-s(s+1)}{j(j+1)}\right].$$

Ebből $j=l+\frac{1}{2}; s=\frac{1}{2}$ -et irva

$$\mu = g_l\left(j-\frac{1}{2}\right)+g_s\frac{1}{2},$$

$j=l-\frac{1}{2}, s=\frac{1}{2}$ -et irva

$$\mu = g_l\left(j+\frac{1}{2}\frac{j}{j+1}\right)-g_s\frac{1}{2}\frac{j}{j+1}$$

adódik. Eredményeink megegyeznek a más uton kapott /4.34-35/ Schmidt-Schüler-féle összefüggésekkel.

FÜGGELÉK

A. $D^{(j)}$ matrixai és a gömbfüggvények

Mindenekelőtt megállapitjuk, hogy a $D^{(j)}$ irreducibilis ábrázolás /3.88/ alatt megadott matrixai unitér matrixok. - Emlékeztetünk arra, hogy a forgáscsoport ábrázolásainak vizsgálatánál - a kvantummechanikai alkalmazásokra való tekintettel - kezdettől fogva unitér ábrázolások felkutatására törekedtünk. $D^{(j)}_{m'm}(\alpha\beta\gamma)$ /3.88/ alatti konkrét alakját felhasználva könnyü megmutatni, hogy a kapott matrixok valóban unitérek. - Minthogy az $\alpha\,\beta\,\gamma$ Euler-szögü forgatás inverzét a $-\gamma, -\beta\ -\alpha$ Euler-szögek jellemzik, az unitér jelleget kifejező egyenlet:

$$D^{(j)}_{m'm}(-\gamma-\beta-\alpha) = D^{(j)*}_{mm'}(\alpha\beta\gamma). \qquad /A.1/$$

Ennek bizonyitására irjuk fel /3.88/ felhasználásával $D^{(j)}_{m'm}(-\gamma-\beta-\alpha)$-t

$$D^{(j)}_{m'm}(-\gamma-\beta-\alpha) = e^{-im'\alpha}\sum_{\sigma}\left[\frac{(j+m')!\,(j-m')!}{(j+m)!\,(j-m)!}\right]^{\frac{1}{2}}\binom{j+m}{j-m'-\sigma}\binom{j-m}{\sigma}(-1)^{j-m'-\sigma}\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2\sigma+m+m'}\left(-\sin\frac{\beta}{2}\right)^{2j-2\sigma-m-m'}e^{-im\gamma}.$$

Minthogy $j-m'$ és σ egész szám, itt $(-1)^{2(j-\sigma-m')}=1$.
Vegyük észre ezenkivül, hogy e sorfejtés együtthatói /az előjeltől eltekintve/ a

$$\left[\frac{(j+m')!\,(j-m')!}{(j+m)!\,(j-m)!}\right]^{\frac{1}{2}}\binom{j+m}{j-m'-\sigma}\binom{j-m}{\sigma} = \left[\frac{(j+m)!\,(j-m)!}{(j+m')!\,(j-m')!}\right]^{\frac{1}{2}}\binom{j+m'}{j-m-\sigma}\binom{j-m'}{\sigma}$$

egyenlőség fennállása folytán szimmetrikusak m-ben és m'-ben. Ezt felhasználva, valamint /3.88/-at tekintetbe véve közvetlenül felirhatjuk a $D^{(j)}_{m'm}(\alpha\beta\gamma)$ matrixok unitér voltát kifejező /A.1/ egyenletet.

$D^{(j)}_{m'm}(\alpha\beta\gamma)$ inverze eszerint - amint azt /A.1/ kifejezi - $D^{(j)*}_{mm'}(\alpha\beta\gamma)$ -val egyenlő és igy irhatjuk:

$$\sum_m D^{(j)*}_{m_1 m}(\alpha\beta\gamma)\, D^{(j)}_{m_2 m}(\alpha\beta\gamma) = \delta_{m_1 m_2}. \qquad /A.2/$$

A 37.a oldalon láttuk, hogy az l -edrendü gömbfüggvények a forgáscsoport $D^{(l)}$ irreducibilis ábrázolása szerint transzformálódnak. A koordinátarendszer $\alpha\beta\gamma$ Euler-szögü elforgatása esetén tehát az $Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$ gömbfüggvényt a $D^{(l)}_{m'm}(\alpha\beta\gamma)$ matrix transzformálja:

$$Y_{lm}(\vartheta',\varphi') = \sum_{m'} Y_{lm'}(\vartheta,\varphi)\, D^{(l)}_{m'm}(\alpha\beta\gamma). \qquad /A.3/$$

Itt ϑ',φ' a ϑ,φ -vel jellemzett irány $\alpha\beta\gamma$ Euler-szögü elforgatásával kapott irány szögkoordinátáit jelenti.

Vizsgáljuk meg most az $I(\vartheta_1,\varphi_1;\vartheta_2,\varphi_2) = \sum_m Y^*_{lm}(\vartheta_1,\varphi_1) Y_{lm}(\vartheta_2,\varphi_2)$ kifejezés forgatáskor mutatott viselkedését. Ha ϑ_1',φ_1' ill. ϑ_2',φ_2' a ϑ_1,φ_1 ill. ϑ_2,φ_2 szögkoordinátákból $\alpha\beta\gamma$ Euler-szögü elforgatással adódnak, ugy /A.3/ és /A.2/ felhasználásával irhatjuk:

$$I(\vartheta_1',\varphi_1';\vartheta_2',\varphi_2') = \sum_m Y^*_{lm}(\vartheta_1',\varphi_1')\, Y_{lm}(\vartheta_2',\varphi_2') =$$

$$= \sum_m \sum_{m_1} \sum_{m_2} Y^*_{lm_1}(\vartheta_1,\varphi_1)\, Y_{lm_2}(\vartheta_2,\varphi_2)\, D^{(l)*}_{m_1 m}(\alpha\beta\gamma)\, D^{(l)}_{m_2 m}(\alpha\beta\gamma) =$$

$$= \sum_{m_1}\sum_{m_2} Y^*_{lm_1}(\vartheta_1,\varphi_1)\, Y_{lm_2}(\vartheta_2,\varphi_2)\, \delta_{m_1 m_2} = \sum_m Y^*_{lm}(\vartheta_1,\varphi_1)\, Y_{lm}(\vartheta_2,\varphi_2) = I(\vartheta_1,\varphi_1;\vartheta_2,\varphi_2).$$

Arra az eredményre jutottunk, hogy I a $\vartheta_1,\varphi_1;\vartheta_2,\varphi_2$ szögkoordinátáknak forgásinvariáns függvénye. Fennáll tehát:

$$\sum_m Y^*_{lm}(\vartheta_1',\varphi_1')\, Y_{lm}(\vartheta_2',\varphi_2') = \sum_m Y^*_{lm}(\vartheta_1,\varphi_1)\, Y_{lm}(\vartheta_2,\varphi_2). \qquad /A.4/$$

Forgassuk el most a koordinátarendszert $-\gamma, -\beta, -\alpha$ Euler-szögekkel. Ekkor /A.3/ és /A.1/ szerint az Y_{l0} gömbfüggvények az

$$Y_{l0}(\vartheta',\varphi') = \sum_m Y_{lm}(\vartheta,\varphi)\, D^{(l)}_{m0}(-\gamma-\beta-\alpha) = \sum_m D^{(l)*}_{0m}(\alpha\beta\gamma)\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \qquad /A.5/$$

módon transzformálódnak. Válasszuk most /A.4/-ben ϑ_1, φ_1-et olymódon, hogy az általuk jellemzett irány az imént elvégzett $-\gamma-\beta-\alpha$ Euler-szögü forgatás eredményeképpen a $\vartheta_1' = \varphi_1' = 0$ helyzetbe kerüljön. Ekkor a ϑ_1, φ_1 -gyel jellemzett irány a $-\gamma-\beta-\alpha$ szögü forgatás inverzével, az $\alpha\beta\gamma$ szögü forgatással kapható meg a $\vartheta_1' = \varphi_1' = 0$ helyzetből kiindulva. Ebből azonban $\vartheta_1 = \beta$, $\varphi_1 = \gamma$ következik, s igy /A.4/ alapján irható:

$$\sum_m Y_{lm}^*(0,0)\, Y_{lm}(\vartheta',\varphi') = \sum_m Y_{lm}^*(\beta,\gamma)\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi).$$

Ha most tekintetbe vesszük a gömbfüggvények $Y_{lm}^*(0,0) = \left(\frac{2l+1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \delta_{m0}$ tulajdonságát, eredményül

$$Y_{l0}(\vartheta',\varphi') = \left(\frac{4\pi}{2l+1}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_m Y_{lm}^*(\beta,\gamma)\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \qquad /A.6/$$

adódik. /A.5/ és /A.6/ összehasonlitásával a következő összefüggést irhatjuk fel a $D_{m'm}^{(l)}(\alpha\beta\gamma)$ forgásmatrixok és a gömbfüggvények között:

$$D_{0m}^{(l)}(\alpha\beta\gamma) = \left(\frac{4\pi}{2l+1}\right)^{\frac{1}{2}} Y_{lm}(\beta,\gamma). \qquad /A.7/$$

Megjegyezzük, hogy $Y_{l0}(\vartheta',\varphi')$ független φ'-től és igy /A.6/ helyett irhatjuk:

$$Y_{l0}(\vartheta',0) = \left(\frac{4\pi}{2l+1}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_m Y_{lm}^*(\beta,\gamma)\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi). \qquad /A.8/$$

Ez a gömbfüggvények addiciós tételének ismert alakja.

B. A Schrődinger-egyenlet megoldásainak meghatározása forgástranszformációs tulajdonságaik alapján. A szimmetrikus pörgettyü sajátfüggvényei

A 3.szakasz c.pontjában a következő megállapitást tettük: Ha a forgáscsoport a Schrődinger-egyenletnek szimmetriacsoportja, ugy a sajátfüggvények forgatáskor a forgáscsoport valamely ábrázolása szerint transzformálódnak. Tudjuk azt is, hogy alkalmas lineáris kombinációk bevezetésével olyan sajátfüggvényekhez juthatunk, amelyek a forgáscsoportnak irreducibilis ábrázolásai szerint transzformálódnak. A forgáscsoport $D^{(j)}$ irreducibilis ábrázolásait létesitő matrixok /3.88/ konkrét alakjának ismerete lehetővé teszi számunkra, hogy a Schrődinger-egyenlet megoldásait – egészben vagy részben – a forgástranszformációs sajátságok alapján határozzuk meg. A sajátfüggvények ilyen módon történő meghatározására néhány példát mutatunk be.

Vegyünk először szemügyre egy térbeli rotátort: egy tömegpontot, mely a koordinátarendszer origójától rögzitett távolságra /egy gömbfelületen/ végezheti mozgását. A rotátor helyzetét jellemezzük helyzetvektorának ϑ, φ szögkoordinátáival. Tegyük fel, hogy a $\psi_{\ell m}(\vartheta, \varphi)$ sajátfüggvények a koordinátarendszer $\alpha\beta\gamma$ Euler-szögekkel jellemzett elforgatásakor a forgáscsoport $D^{(\ell)}$ irreducibilis ábrázolása szerint transzformálódnak:

$$\psi_{\ell m}(\vartheta', \varphi') = \sum_{m'} \psi_{\ell m'}(\vartheta, \varphi) D^{(\ell)}_{m'm}(\alpha\beta\gamma). \tag{B.1}$$

Itt ϑ', φ' a ϑ, φ -vel jellemzett irány $\alpha\beta\gamma$ Euler-szögü elforgatásával kapott irány szögkoordinátáit jelenti. – A $\psi_{\ell m}(\vartheta, \varphi)$ függvények alakjáról még semmit sem tudunk, csak /B.1/ transzformációs törvényüket ismerjük. Irjunk most /B.1/-ben $\vartheta = \varphi = 0$-t. Ekkor $\vartheta' = \beta$, $\varphi' = \gamma$. Jelöljük továbbá $\psi_{\ell m}(0,0)$-t $\rho_{\ell m}$ -mel. Ekkor a /B.1/ képlet a

$$\psi_{\ell m}(\beta, \gamma) = \sum_{m'} \rho_{\ell m'} D^{(\ell)}_{m'm}(\alpha\beta\gamma) \tag{B.2}$$

alakot ölti. Tekintettel arra, hogy $\psi_{\ell m}(\beta\gamma)$ α -tól független, a jobboldalnak sem szabad függnie e változótól. Ez akkor következik be, ha $p_{lm} = p_l \delta_{m0}$. Ezt behelyettesitve /B.2/-be és /A.7/-et tekintetbe véve megkapjuk $\psi_{lm}(\beta,\gamma)$ kifejezését:

$$\psi_{lm}(\beta,\gamma) = p_l \left(\frac{4\pi}{2l+1}\right)^{\frac{1}{2}} Y_{lm}(\beta,\gamma). \qquad /B.3/$$

Az $\int |\psi_{lm}|^2 d\Omega = 1$ normálási feltételből p_l-re a $(2l+1)^{\frac{1}{2}}/\sqrt{4\pi}$ érték adódik.

A módszert alkalmazhatjuk bármilyen centrális erőtérben mozgó tömegpont esetében is. Ekkor is a /B.3/ eredményre jutunk, p_l azonban ekkor függ a tömegpontnak az origótól mért r távolságától. A $p_l(r)$ függvény alakját a forgástranszformációs tulajdonságok nem határozzák meg, ez függ a potenciál konkrét alakjától.

A módszer legérdekesebb alkalmazása: a pörgettyü sajátfüggvényeinek meghatározása. A pörgettyü helyzetét a három Euler-szög jellemzi. Ezektől függnek a $\psi_{lm}(\alpha\beta\gamma)$ sajátfüggvények. Ha most p_{lm} -mel a $\psi_{lm}(000)$ függvényértéket jelöljük, ugy a /B.2/-höz hasonló

$$\psi_{lm}(\alpha\beta\gamma) = \sum_{m'} p_{lm'} D^{(l)}_{m'm}(\alpha\beta\gamma) \qquad /B.4/$$

eredményre jutunk. A pörgettyü sajátfüggvényei tehát előállithatók a $D^{(l)}_{m'm}(\alpha\beta\gamma)$ matrixelemek lineáris kombinációiként. A $p_{lm'}$ együtthatók meghatározása a következőképpen történik: /B.4/-et behelyettesitjük a pörgettyü Schrődinger-egyenletébe. A differenciálások elvégzése után a $p_{lm'}$ együtthatókra egy lineáris egyenletrendszert kapunk. A megoldhatóság feltétele az egyenletrendszer determinánsának eltünése. Ilymódon egy $2l+1$-edfoku algebrai egyenletrendszert kapunk az l és m rögzitett értékéhez tartozó sajátértékekre. Az igy kapott sajátértékek m-től függetlenek, hiszen $p_{lm'}$ sem függ m-től. Az egyenletrendszer megoldásaként adódó $2l+1$ sajátérték mindegyike tehát $2l+1$-szeresen elfajult.

Figyelemre méltó speciális eset a szimmetrikus pörgettyü esete. Jellemezze β és γ a pörgettyü szimmetriatengelyének irányát. Ekkor α -t tetszésszerint változtathatjuk anélkül, hogy a pörgettyü energiája megváltozna. $\psi(\alpha\beta\gamma)$ mellett tehát a $\psi(\alpha+\alpha_0\beta\gamma)$ függvény, vagy az ilyenekből alkotott lineáris kombináció is sajátfüggvény, változatlan sajátérték mellett.

Képezzük most a következő speciális lineáris kombinációt:

$$\Psi_{lm''m}(\alpha\beta\gamma)=\int_0^{2\pi} e^{-im''\alpha_0}\psi_{lm}(\alpha+\alpha_0\beta\gamma)\,d\alpha_0. \qquad /B.5/$$

/B.4/-et ide behelyettesitve, és felhasználva, hogy $D_{m'm}(\alpha\beta\gamma)$ egy $e^{im'\alpha}$ tényező révén függ α -tól, a

$$\Psi_{lm''m}(\alpha\beta\gamma)=\rho_{lm''}\,D^{(l)}_{m''m}(\alpha\beta\gamma)$$

eredményt kapjuk. A szimmetrikus pörgettyü sajátfüggvényei tehát a $D^{(l)}_{m''m}(\alpha\beta\gamma)$ matrixelemek. A normálási feltétel most a $\rho_{lm''}$ állandóra a $\left[(2\;+1)/8\pi^2\right]^{\frac{1}{2}}$ értéket adja.

C. A $D^{(j)}_{m'm}(\alpha\beta\gamma)$ matrixok szimmetriatulajdonságai

A /3.84/-ben bevezetett $D^{(j)}_{m'm}(\alpha\beta\gamma)=e^{im'\alpha}D^{(j)}_{m'm}(0\beta 0)\,e^{im\gamma}$ matrixok a következő szimmetria-relációnak tesznek eleget:

$$D^{(j)}_{m'm}(-\gamma-\beta-\alpha)=D^{(j)*}_{mm'}(\alpha\beta\gamma), \qquad /C.1/$$

$$D^{(j)}_{m'm}(\alpha\beta\gamma)=(-1)^{m'-m}D^{(j)}_{-m'-m}(\alpha\beta\gamma). \qquad /C.2/$$

E relációk igazolására foglalkozzunk először a második tengely körüli β -szögü forgatás

$$D^{(j)}_{m'm}(0\beta 0)=\left[\frac{(j+m')!\,(j-m')!}{(j+m)!\,(j-m)!}\right]^{\frac{1}{2}}\sum_{\sigma}{}'\binom{j+m}{j-m'-\sigma}\binom{j-m}{\sigma}(-1)^{j-m'-\sigma}\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2\sigma+m'+m}\cdot\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{2j-2\sigma-m'-m} \qquad /C.3/$$

matrixával. A $D^{(j)}_{m'm}(0\beta 0)$ matrix unitér és valós, ezért:

$$D^{(j)}_{m'm}(0\,{-\beta}\,0) = D^{(j)}_{mm'}(0\beta 0). \qquad /C.4/$$

Érvényes ezenkivül a

$$D^{(j)}_{m'm}(0\beta 0) = (-1)^{m'-m}\, D_{-m'-m}(0\beta 0) \qquad /C.5/$$

összefüggés, amelyről könnyen meggyőződhetünk, ha /C.3/-ban az $m \longleftrightarrow -m$, $m' \longleftrightarrow -m'$ helyettesitést végezzük el:

$$D^{(j)}_{-m'-m}(0\beta 0) = \left[\frac{(j-m)!\,(j+m)!}{(j-m')!\,(j+m')!}\right]^{\frac{1}{2}} \sum_{\sigma} \binom{j-m}{j+m'+\sigma}\binom{j+m}{\sigma}(-1)^{j+m'+\sigma}\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2\sigma-m'-m}\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{2j-2\sigma+m'+m}.$$

Vezessük be a $\sigma' = \sigma - m - m'$ összegező indexet, ekkor

$$D^{(j)}_{-m'-m}(0\beta 0) = \left[\frac{(j+m)!\,(j-m')!}{(j+m')!\,(j-m)!}\right]^{\frac{1}{2}} \sum_{\sigma'} \binom{j+m}{j-m'-\sigma'}\binom{j-m}{\sigma'}(-1)^{j-m'-\sigma'}(-1)^{m'-m}\cdot$$

$$\cdot\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2\sigma'+m+m'}\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{2j-2\sigma'-m-m'} = (-1)^{m'-m} D^{(j)}_{m'm}(0\beta 0)$$

adódik, amivel /C.5/-öt igazoltuk, tekintetbe véve, hogy $(-1)^{m'-m} = (-1)^{m-m'}$, mert $m' - m$ = egész szám.
/C.4/ és /C.5/ összevetéséből származtatható a következő nevezetes összefüggés:

$$D^{(j)}_{m'm}(0\,{-\beta}\,0) = (-1)^{m'-m}\, D^{(j)}_{m'm}(0\beta 0).$$

Ezekután /C.1/ és /C.2/ egyszerüen igazolható:

$$D^{(j)}_{m'm}(-\gamma-\beta-\alpha) = e^{-im'\gamma} D^{(j)}_{m'm}(0\,{-\beta}\,0)e^{-im\alpha} = e^{-im'\gamma} D^{(j)}_{mm'}(0\beta 0)e^{-im\alpha} =$$

$$= e^{-im\alpha} D^{(j)}_{mm'}(0\beta 0)e^{-im'\gamma} = D^{(j)*}_{mm'}(\alpha\beta\gamma)$$

és

$$D^{(j)*}_{m'm}(\alpha\beta\gamma) = e^{-im'\alpha} D^{(j)}_{m'm}(0\beta 0)e^{-im\gamma} = e^{-im'\alpha}(-1)^{m'-m} D^{(j)}_{-m'-m}(0\beta 0)e^{-im\gamma} =$$

$$= (-1)^{m'-m} D^{(j)}_{-m'-m}(\alpha\beta\gamma).$$

D. A $3j$ szimbolumok szimmetriatulajdonságai

A $(j_1m_1j_2m_2|jm)$ Clebsch-Gordan koefficiensek bizonyos szimmetria tulajdonságokat mutatnak egyrészt az m_1, m_2, m mágneses kvantumszámok előjelváltásával, másrészt a j_1m_1, j_2m_2 és jm mennyiségek felcseréléseivel szemben. A szimmetria sokkal szembetünőbb, ha a Clebsch-Gordan együtthatók helyett a

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j_2-j_1+m}}{\sqrt{2j+1}} (j_1m_1j_2m_2|j\,-m)$$

képlettel definiált Wigner-féle $3j$ -szimbolumokat használjuk. Fennállnak a következő összefüggések:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ -m_1 & -m_2 & -m \end{pmatrix} \qquad /D.1/$$

$$= (-1)^{j_1+j_2+j} \begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j \\ m_2 & m_1 & m \end{pmatrix} \qquad /D.2/$$

$$= (-1)^{j_1+j_2+j} \begin{pmatrix} j_1 & j & j_2 \\ m_1 & m & m_2 \end{pmatrix} \qquad /D.3/$$

$$= (-1)^{j_1+j_2+j} \begin{pmatrix} j & j_2 & j_1 \\ m & m_2 & m_1 \end{pmatrix} \qquad /D.4/$$

$$= \begin{pmatrix} j & j_1 & j_2 \\ m & m_1 & m_2 \end{pmatrix} \qquad /D.5/$$

$$= \begin{pmatrix} j_2 & j & j_1 \\ m_2 & m & m_1 \end{pmatrix} \qquad /D.6/$$

A /D.1/ - /D.6/ egyenlőségek közül csak az első három független egymástól, /D.3/, /D.2/ és /D.3/ egymás utáni alkalmazásával /D.4/, /D.3/ és /D.2/ egymás utáni alkalmazásával /D.5/, /D.2/ és /D.3/ egymás utáni alkalmazásával pedig /D.6/ nyerhető. Meg kell emlitenünk, hogy a $(-1)^{j_1+j_2+j}$ fázistényező valós, mivel j_1+j_2+j = egész szám.

A /D.1/ - /D.6/ szimmetria-relációk szóban a következőképpen fogalmazhatók meg: a mágneses kvantumszámok előjelének megforditása, vagy a j_1m_1, j_2m_2, jm mennyiségek páratlan permutációja esetén a $3j$ -szimbolum a $(-1)^{j_1+j_2+j}$ tényezővel szorzódik, mig páros permutáció esetén változatlan marad.

Ezután térjünk rá /D.1/, /D.2/ és /D.3/ bizonyitására. A $3j$ szimbolum /4.27/ szerint a következő kifejezéssel egyenlő:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} = (-1)^{j_2-j_1+m}\left[\frac{(j_2+j-j_1)!\,(j+j_1-j_2)!\,(j_1+j_2-j)!}{(j_1+j_2+j+1)!}\right]^{\frac{1}{2}}\cdot$$

$$\left[(j_1+m_1)!\,(j_1-m_1)!\,(j_2+m_2)!\,(j_2-m_2)!\,(j+m)!\,(j-m)!\right]^{\frac{1}{2}}\cdot$$

$$\cdot\sum_z(-1)^z\left[z!\,(j_1+j_2-j-z)!\,(j-j_1-m_2+z)!\,(j_2+m_2-z)!\,(j_1-m_1-z)!\,(j-j_2+m_1+z)!\right]^{-1}.$$

A négyzetgyökös tényező változatlan marad akár az $m_1 \longleftrightarrow -m_1$, $m_2 \longleftrightarrow -m_2$, $m \longleftrightarrow -m$, akár a $j_1 \longleftrightarrow j_2$, $m_1 \longleftrightarrow m_2$, akár pedig a $j \longleftrightarrow j_2$, $m \longleftrightarrow m_2$ felcserélést hajtjuk végre. Elegendő tehát a

$$(-1)^{j_2-j_1+m}\sum_z(-1)^z\left[z!\,(j_1+j_2-j-z)!\,(j-j_1-m_2+z)!\,(j_2+m_2-z)!\,(j_1-m_1-z)!\,(j-j_2+m_1+z)!\right]^{-1} \qquad /D.7/$$

tényezőt megvizsgálnunk. Könnyen belátható, hogy /D.1/ és /D.2/ egyszerre tárgyalható; /D.7/ mind az $m_1 \longleftrightarrow -m_1$, $m_2 \longleftrightarrow -m_2$, $m \longleftrightarrow -m$, mind a $j_1 \longleftrightarrow j_2$, $m_1 \longleftrightarrow m_2$ helyettesitésnél a

$$(-1)^{j_1-j_2+m}\sum_z(-1)^z\left[z!\,(j_1+j_2-j-z)!\,(j-j_2-m_1+z)!\,(j_1+m_1-z)!\,(j-j_1+m_2+z)!\,(j_2-m_2-z)!\right]^{-1} \qquad /D.8/$$

kifejezésbe megy át. Itt figyelembe vettük, hogy $j_2-j_1-m=$ egész, ezért $(-1)^{j_2-j_1-m}=(-1)^{j_1-j_2+m}$. Vezessük be a $z'=j_1+j_2-j-z$ uj összegező indexet, ekkor /D.8/ igy irható:

$$(-1)^{j_1-j_2+m}(-1)^{j_1+j_2-j}\sum_{z'}(-1)^{z'}\left[z'!\,(j_1+j_2-j-z')!\,(j_1-m_1-z')!\,(j-j_2+m_1+z')!\,\cdot\right.$$

$$\left.\cdot(j_2+m_2-z')!\,(j-j_1-m_2+z')!\right]^{-1}=(-1)^{4j_1}(-1)^{-(j_1+j_2+j)}(-1)^{j_2-j_1+m}\cdot$$

$$\cdot\sum_{z'}(-1)^{z'}\left[(j_1+j_2-j-z')!\,(j_1-m_1-z')!\,(j-j_2+m_1+z')!\,(j_2+m_2-z')!\,(j-j_1-m_2+z')!\right]^{-1}.$$

Itt $(-1)^{4j_1} = 1$, mert $4j_1 =$ páros, a kapott eredmény $(-1)^{(j_1+j_2+j)}$-től eltekintve /D.7/-tel egyezik, tehát irhatjuk, hogy

$$\begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j \\ m_2 & m_1 & m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ -m_1 & -m_2 & -m \end{pmatrix} = (-1)^{-(j_1+j_2+j)} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix}.$$

Ezzel az /D.1/ és /D.2/ képleteket igazoltuk.

Ha /D.7/-ben a $j \leftrightarrow j_2$; $m \leftrightarrow m_2$ helyettesitést végezzük el, akkor a

$$(-1)^{j-j_1+m_2} \sum_z (-1)^z \left[z!(j_1+j-j_2-z)!(j_2-j_1-m+z)!(j+m-z)!(j_2-j+m_1+z)!(j_1-m_1-z)! \right]^{-1}$$

kifejezésre jutunk, amely a $z' = j_1 - m_1 - z$ helyettesitéssel a

$$(-1)^{j-j_1+m_2} (-1)^{j_1-m_1} \sum_{z'} (-1)^{z'} \left[z'!(j_1-m_1-z')!(j-j_2+m_1+z')!(j_2+m_2-z')! \cdot \right.$$

$$\left. \cdot (j-j_1-m_2+z')!(j_2+j_1-j-z')! \right]^{-1} = (-1)^{-2(j_2-m_2)} (-1)^{j_1+j_2+j} (-1)^{j_2-j_1+m} \cdot$$

$$\cdot \sum_{z'} (-1)^{z'} \left[z'!(j_1-m_1-z')!(j-j_2+m_1+z')!(j_2+m_2-z')!(j-j_1-m_2+z')!(j_2+j_1-j-z')! \right]^{-1}$$

alakra hozható. A kapott kifejezést /D.7/-tel összehasonlitva azt látjuk, hogy eltérés csak a $(-1)^{j_1+j_2+j}$ fázistényezőben mutatkozik, ahogy vártuk is, mert $j_2 - m_2 =$ egész, igy $(-1)^{-2(j_2-m_2)} = 1$. Irhatjuk tehát, hogy

$$\begin{pmatrix} j_1 & j & j_2 \\ m_1 & m & m_2 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix},$$

amivel a /D.3/ képlet is igazolást nyert.

E. A $D^{(j_1)} \times D^{(j_2)}$ szorzatábrázolás matrixának kifejtése a $D^{(j)}$ irreducibilis ábrázolások matrixai szerint

Kiindulásként jegyezzük fel a /4.9/ alatti Clebsch-Gordan sort:

$$\psi_{jm} = \sum_{m_1+m_2=m}' \varphi_{j_1 m_1} \chi_{j_2 m_2} (j_1 j_2 m_1 m_2 | j m), \qquad /E.1/$$

és az ennek megforditásával kapott

$$\varphi_{j_1 m_1} \chi_{j_2 m_2} = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}{}' \psi_{jm} (j_1 j_2 m_1 m_2 | j m) \qquad /E.2/$$

összefüggést. Alkalmazzunk most a $\varphi_{j_1 m_1} \chi_{j_2 m_2}$ szorzatfüggvényekre egy forgástranszformációt. /3.84/ alapján irhatjuk:

$$\varphi'_{j_1 m_1} \chi'_{j_2 m_2} = \sum_{m_1' m_2'}' \varphi_{j_1 m_1'} \chi_{j_2 m_2'} D^{(j_1)}_{m_1' m_1}(\alpha\beta\gamma) D^{(j_2)}_{m_2' m_2}(\alpha\beta\gamma). \qquad /E.3/$$

$\varphi'_{j_1 m_1} \chi'_{j_2 m_2}$-t más uton is kiszámithatjuk. /E.2/ és /3.84/ felhasználásával a

$$\varphi'_{j_1 m_1} \chi'_{j_2 m_2} = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}{}' \sum_{m'}' \psi_{jm'} D^{(j)}_{m' m}(\alpha\beta\gamma)(j_1 j_2 m_1 m_2 | j m)$$

eredményt kapjuk. Irjuk be most ide ψ_{jm}-t /E.1/-gyel kifejezve:

$$\varphi'_{j_1 m_1} \chi'_{j_2 m_2} = \sum_{m_1' m_2'}' \varphi_{j_1 m_1'} \varphi_{j_2 m_2'} \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}{}' (j_1 j_2 m_1' m_2' | j m') D^{(j)}_{m' m}(\alpha\beta\gamma)(j_1 j_2 m_1 m_2 | j m).$$

Ha ezt az eredményt összehasonlitjuk /E.3/-mal és figyelembe vesszük $m_1' + m_2' = m'$-t és $m_1 + m_2 = m$-et, ugy végül a

$$D^{(j_1)}_{m_1' m_1}(\alpha\beta\gamma) D^{(j_2)}_{m_2' m_2}(\alpha\beta\gamma) = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}{}' (j_1 j_2 m_1' m_2' | j\, m_1'+m_2') D^{(j)}_{m_1'+m_2',\, m_1+m_2}(\alpha\beta\gamma)(j_1 j_2 m_1 m_2 | j\, m_1+m_2)$$

összefüggésre jutunk.