Symmetriecharakter von Termen bei Systemen mit gleichen Partikeln in der Q. Mech.

F. Hund. 43 1788

Heisenberg[1] und Dirac[2] bemerkten, daß die diskreten stationären Zustände (Terme), die die Quantenmechanik für ein System mit zwei gleichen Partikeln (z. B. Elektronen) ergibt, in zwei nicht miteinander kombinierende Teilsysteme zerfallen. Die Terme des einen sind in den beiden Partikeln symmetrisch, d. h. die Schrödingersche Eigenfunktion ändert sich bei Vertauschung dieser Partikel nicht; die Terme des anderen sind antisymmetrisch, d. h. die Eigenfunktion ändert bei der genannten Vertauschung ihr Vorzeichen. Bei mehr als zwei ~~nicht~~ gleichen Partikeln erhält man eine Einteilung in mehr als zwei nicht kombinierende Termsysteme. Wigner[3] gab allgemein und vollständig die Gesetze über Anzahl und Entartungsgrad dieser nicht kombinierenden Termsysteme für beliebig viele gleiche Partikel an.

Trotz der weitgehenden Behandlung, die das Problem also schon erfahren hat, soll hier noch einmal von anderem Gesichtspunkt her darauf eingegangen werden. Es scheint nämlich nützlich, die nicht-kombinierenden Systeme ohne Voraussetzung gruppentheoretischer Sätze direkt mit der Symmetrie der Eigenfunktionen in den gleichen Partikeln zu verknüpfen und beliebige Kopplungsverhältnisse zwischen den Partikeln zu betrachten. Wir werden auf diesem Wege eine einfache Ableitung der schon von Wigner gefundenen Ergebnisse erhalten und darüber hinaus die Möglichkeit, die Form der Eigenfunktionen der verschiedenen Termsysteme hinzuschreiben. Das letztere gibt die Möglichkeit der Anwendung auf konkrete Probleme, sowohl der Systematik der Atomspektren (wo es sich um gleiche Elektronen handelt) als auch der Molekelspektren (wo es sich um gleiche Kerne handelt).

Wir stellen im folgenden die Eigenschaften der Terme eines Systems

---

1) 38 411　　2) 112 661

3) E. Wigner. 40 492, 883; Heisenberg 41 239.
43 624.

durch die Schrödingerschen Eigenfunktion dar. Sie ist eine Funktion der Koordinaten aller Partikel; die gleichen Partikeln unterscheiden wir durch Indizes. Die potentielle Energie muß natürlich eine symmetrische Funktion der Gleichen Partikeln sein. Vertauscht man in einer Eigenfunktion zwei Indizes, so entsteht daher wieder eine Eigenfunktion, ~~Wenn~~ die zum gleichen Eigenwert gehört. Wenn die Eigenfunktion in allen Partikeln symmetrisch ist, entsteht keine neue Eigenfunktion. Wenn sie antisymmetrisch ist, d. h. bei Vertauschung irgend zwei Partikel mit −1 multipliziert wird, entsteht auch keine wesentlich neue Eigenfuntion. Wir können für die folgende Betrachtung die Annahme machen, daß das System keine anderen Entartungen enthält als solche, die durch die Gleichheit von Partikeln gefordert sind[1]). Das hat zur Folge, daß, wenn zwei Eigenfunktionen zum gleichen Eigenwert gehören, sich stets die eine als lineare Kombination von solchen Funktionen darstellen läßt, die aus der anderen durch Vertauschung von Indizes entstehen. Wir wollen solche Eigenfunktionen, die durch Vertauschen von Indizes und Linearkombinieren ineinander übergehen, äquivalent nennen.

Wir werden jedes der nichtkombinierenden Termsysteme durch einen „Symmetriecharacter" darstellen[2]). Für diese stellen wir zunächst zwei Systeme von „Normalformen" auf.

Symmertiecharaktere und Normalformen.

Wir betrachten Eigenfunktionen $\Psi(1, 2, \cdots n)$ eines quantenmechanischen Problems mit den gleichen Partikeln $1, 2, \cdots n$. Wir sagen, Ψ sei symmetrisch in den Partikeln $\alpha_1, \alpha_2, \cdots \alpha_\lambda$, wenn es sich bei Vertauschen zweier dieser Zahlen (die ja Indizes der Koordinaten der Partikel sind) nicht ändert. Wir nennen Ψ antisymmetrisch in $\alpha_1, \alpha_2 \cdots \alpha_\lambda$, wenn es bei Vertauschen zweier dieser Zahlen mit −1 multipliziert wird. Das Symmetrieverhalten einer Funktion bezeichnen wir durch eine einfache Schreibweise; so soll

1) Damit beschränken wir die Überlegungen auf den Fall diskontinuierlicher Energiewerte.
2)

$$\Psi(\{1,2,3\}\{4,5\}\overline{6,7,8},9,10)$$

eine Eigenfunktion bedeuten, die in 1, 2, 3 und in 4, 5 antisymmetrisch und in 6, 7, 8 symmetrisch ist; von 9 und 10 soll sie irgendwie abhängen. Wenn bei speziellen Fällen der allgemeinen Schreibweise $\{1, 2, \cdots \lambda\}$ oder $\overline{1, 2, \cdots \lambda}$ in einer Klammer oder unter einem Strich nur eine Zahl steht ($\lambda = 1$), so soll Klammer oder Strich nichts bedeuten.

Man sieht leicht, daß man aus einer gegebenen Eigenfunktion durch Vertauschen von Partikeln und Linearkombinieren eine Funktion der Form

$$\Psi(\{1, 2, \cdots \lambda_1\}\{\lambda_1+1, \cdots \lambda_1+\lambda_2\} \cdots \cdots \{\textstyle\sum_1^{s-1}\lambda_\nu+1 \cdots \sum_1^{s}\lambda_\nu\})$$

(1, A)

herstellen kann. Man kann ferner erreichen