Неприводимые представления группы $D_{\infty h} = C_{\infty v} \times C_i$ получаются непосредственно из представлений группы $C_{\infty v}$ (и соответствуют классификации термов двухатомной молекулы с одинаковыми ядрами).

Если взять для Ω полуцелые значения, то функции $e^{\pm i\Omega\varphi}$ осуществят двузначные неприводимые представления группы $C_{\infty v}$, соответствующие термам молекулы с полуцелым спином [1]).

§ 99. Двузначные представления конечных точечных групп

Состояниям системы с полуцелым спином (а потому и полуцелым полным моментом) соответствуют двузначные представления точечной группы симметрии этой системы. Это является общим свойством спиноров и потому справедливо как для непрерывных, так и для конечных точечных групп. В связи с этим возникает необходимость в отыскании *двузначных* неприводимых представлений конечных точечных групп.

Как уже отмечалось, двузначные представления по существу вообще не являются истинными представлениями группы. К ним не относятся, в частности, соотношения, о которых шла речь в § 94, и когда в этих соотношениях (например, в соотношении (94,17) для суммы квадратов размерностей неприводимых представлений) шла речь о всех неприводимых представлениях, то в их числе подразумевались только истинные, однозначные представления.

Для отыскания двузначных представлений удобно применять следующий искусственный прием (*H. A. Bethe*, 1929). Введем чисто формальным образом понятие о новом элементе группы (обозначим его посредством Q) — повороте на угол 2π вокруг произвольной оси — как об элементе, отличном от единичного, но совпадающем с E при своем двукратном применении: $Q^2 = E$. В соответствии с этим повороты C_n вокруг осей симметрии n-го порядка будут давать тождественные преобразования лишь после $2n$-кратного (а не n-кратного) своего применения:

$$C_n^n = Q, \quad C_n^{2n} = E. \tag{99,1}$$

Инверсия I как элемент, коммутативный со всяким поворотом, должна при двукратном применении по-прежнему давать E. Но

---

[1]) В отличие от трехмерной группы вращений, здесь можно было бы соответствующим выбором дробных значений Ω получить не только одно- и двузначные представления, но и представления трехзначные и выше. Однако физически возможные собственные значения момента импульса, как оператора трехмерного бесконечно малого поворота, определяются представлениями именно трехмерной группы вращений. Поэтому трехзначные (и выше) представления двумерной группы вращений (а также любой конечной группы симметрии), хотя и могут быть математически определены, но не имеют физического смысла.

двукратное отражение в плоскости будет равно Q, а не E:

$$\sigma^2 = Q, \quad \sigma^4 = E \tag{99,2}$$

(это следует из того, что отражение может быть написано в виде $\sigma_h = IC_2$). В результате мы получим совокупность элементов, составляющих некоторую фиктивную точечную группу симметрии, порядок которой вдвое больше порядка исходной группы; об этих группах мы будем говорить как о *двойных* точечных группах. Двузначные представления действительной точечной группы будут, очевидно, однозначными, т. е. истинными представлениями соответствующей двойной группы, так что для их отыскания можно применить обычные приемы.

Число классов в двойной группе больше, чем в исходной группе (но, вообще говоря, не вдвое). Элемент Q коммутативен со всеми другими элементами группы [1]) и потому всегда составляет сам по себе класс. Если ось симметрии двусторонняя, то в двойной группе это означает сопряженность элементов C_n^k и $C_n^{2n-k} = QC_n^{n-k}$. В связи с этим при наличии осей второго порядка распределение элементов по классам зависит также и от того, являются ли эти оси двусторонними (в обычных точечных группах это несущественно, так как C_2 совпадает с обратным поворотом C_2^{-1}).

Так, в группе T оси второго порядка эквивалентны, и каждая из них двусторонняя, а оси третьего порядка эквивалентны, но не являются двусторонними. Поэтому 24 элемента двойной группы T' [2]) распределяются по 7 классам: E, Q, класс из трех поворотов C_2 и трех C_2Q, классы $4C_3$, $4C_3^2$, $4C_3Q$, $4C_3^2Q$.

В число всех неприводимых представлений двойной точечной группы входят, во-первых, представления, совпадающие с однозначными представлениями простой группы (причем элементу Q, как и E, соответствует единичная матрица), и, во-вторых, двузначные представления простой группы, причем элементу Q соответствует отрицательная единичная матрица; нас интересуют сейчас именно эти последние представления.

Двойные группы C'_n ($n = 1, 2, 3, 4, 6$) и S'_4, как и соответствующие им простые группы, являются циклическими группами [3]). Все их неприводимые представления одномерны и могут быть найдены без всякого труда, как это было объяснено в § 95.

---

[1]) Для поворотов в инверсии это очевидно; для отражения в плоскости это следует из того, что отражение можно представить в виде произведения инверсии и поворота.

[2]) Двойные группы мы будем отличать штрихом у символа обычной группы.

[3]) Группы же $S'_2 \equiv C'_i$, $S'_6 \equiv C'_{3i}$, содержащие инверсию I, являются абелевыми группами, но не циклическими.

Неприводимые представления групп D_n' (или изоморфных им C_{nv}') можно найти тем же способом, как и для соответствующих простых групп. Эти представления осуществляются функциями вида $e^{\pm ik\varphi}$, где φ — угол поворота вокруг оси n-го порядка, а для k берутся полуцелые значения (целые значения соответствуют обычным однозначным представлениям). Повороты вокруг горизонтальных осей второго порядка переводят эти функции друг в друга, а поворот C_n умножает на $e^{\pm 2\pi ik/n}$.

Несколько труднее нахождение представлений двойных кубических групп. 24 элемента группы T' распределяются по семи классам. Поэтому имеется всего семь неприводимых представлений, из которых четыре совпадают с представлениями простой группы T. Сумма квадратов размерностей остальных трех представлений должна быть равна 12, откуда находим, что все они двумерны. Поскольку элементы C_2 и C_2Q находятся в одном классе, то $\chi(C_2) = \chi(C_2Q) = -\chi(C_2)$, откуда заключаем, что во всех трех представлениях $\chi(C_2) = 0$. Далее, из трех представлений по крайней мере одно должно быть вещественным, так как комплексные представления могут встречаться лишь взаимно сопряженными парами. Рассмотрим это представление и предположим, что матрица элемента C_3 приведена к диагональному виду (пусть a_1, a_2 — ее диагональные элементы). Поскольку $C_3^3 = Q$, то $a_1^3 = a_2^3 = -1$. Для того чтобы $\chi(C_3) = a_1 + a_2$ было вещественным, надо взять $a_1 = e^{\pi i/3}$, $a_2 = e^{-\pi i/3}$. Отсюда находим, что $\chi(C_3) = 1$, $\chi(C_3^2) = a_1^2 + a_2^2 = -1$. Таким образом, одно из искомых представлений найдено. Составляя его прямые произведения с двумя комплексно сопряженными одномерными представлениями группы T, найдем два остальных представления.

Аналогичными рассуждениями, которые мы не станем приводить здесь, можно найти представления группы O'. В сводной табл. 8 даны характеры представлений перечисленных двойных групп (приведены лишь представления, соответствующие двузначным представлениям обычных групп). Те же представления имеют изоморфные с ними двойные группы.

Остальные точечные группы либо изоморфны с рассмотренными, либо получаются в результате прямого умножения последних на группу C_i, так что их представления не нуждаются в особом вычислении.

По тем же причинам, что и для обычных представлений, два комплексно сопряженных двузначных представления должны рассматриваться как одно физически неприводимое представление с удвоенной размерностью. Одномерные же двузначные представления надо удваивать даже, если их характеры вещественны. Дело в том (см. § 60), что у систем с полуцелым спином комплексно сопряженные волновые функции линейно независимы. Поэтому, если мы имеем двузначное одномерное представление с вещест-

Таблица 8

Двузначные представления точечных групп

D_2'	E	Q	$C_2^{(x)}$ $C_2^{(x)}Q$	$C_2^{(y)}$ $C_2^{(y)}Q$	$C_2^{(z)}Q$ $C_2^{(z)}Q$
E'	2	-2	0	0	0

D_3'	E	Q	C_3 C_3^2Q	C_3^2 C_3Q	$3U_2$	$3U_2Q$
E_1'	1	-1	-1	1	i	$-i$
	1	-1	-1	1	$-i$	i
E_2'	2	-2	1	-1	0	0

D_6'	E	Q	C_2 C_2Q	C_3 C_3^2Q	C_3^2 C_3Q	C_6 C_6^5Q	C_6^5 C_6Q	$3U_2$ $3U_2Q$	$3U_2'$ $3U_2'Q$
E_1'	2	-2	0	1	-1	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0	0
E_2'	2	-2	0	1	-1	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0	0
E_3'	2	-2	0	-2	2	0	0	0	0

D_4'	E	Q	C_2 C_2Q	C_4 C_4^3Q	C_4^3 C_4Q	$2U_2$ $2U_2Q$	$2U_2'$ $2U_2'Q$
E_1'	2	-2	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0	0
E_2'	2	-2	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0	0

T'	E	Q	$4C_3$	$4C_3^2$	$4C_3Q$	$4C_3^2Q$	$3C_2$ $3C_2Q$
E'	2	-2	1	-1	-1	1	0
G'	2	-2	ε	$-\varepsilon^2$	$-\varepsilon$	ε^2	0
	2	-2	ε^2	$-\varepsilon$	$-\varepsilon^2$	ε	0

O'	E	Q	$4C_3$ $4C_3^2Q$	$4C_3^2$ $4C_3Q$	$3C_4^2$ $3C_4^2Q$	$3C_4$ $3C_4^3Q$	$3C_4^3$ $3C_4Q$	$6C_2$ $6C_2Q$
E_1'	2	-2	1	-1	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0
E_2'	2	-2	1	-1	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0
G'	4	-4	-1	1	0	0	0	0

венными характерами [1]) (осуществляемое некоторой функцией ψ), то хотя комплексно сопряженная функция ψ^* преобразуется по эквивалентному представлению, можно все же утверждать, что ψ и ψ^* линейно независимы. Поскольку, с другой стороны, комплексно сопряженные волновые функции должны принадлежать к одному и тому же уровню энергии, то мы видим, что в физических применениях такое представление должно быть удвоено.

Все сказанное в § 97 о способе нахождения правил отбора для матричных элементов различных физических величин f остается в силе и для состояний системы с полуцелым спином, с изменением лишь для диагональных (по энергии) матричных элементов. Повторив изложенные в конце § 97 рассуждения с учетом на этот раз формул (60,2), (60,3), найдем, что если величина f четна или нечетна по отношению к обращению времени, то для отыскания правил отбора надо рассматривать соответственно антисимметричное $\{D^{(\alpha)2}\}$ или симметричное $[D^{(\alpha)2}]$ произведение представления $D^{(\alpha)}$ самого на себя — обратно по сравнению со сформулированным в § 97 правилом, справедливым для систем с целым спином [2]).

Задача

Определить, каким образом расщепятся уровни атома (с данными значениями полного момента J), помещенного в поле, обладающее кубической симметрией O [3]).

Решение. Волновые функции состояний атома с моментом J и различными значениями M_J осуществляют $(2J+1)$-мерное приводимое представление группы O с характерами, определяемыми формулой (98,3). Разлагая это представление на неприводимые части (однозначные при целом J или двузначные при полуцелом J), мы тем самым определим искомое расщепление (ср. § 96). Перечислим неприводимые части представлений, соответствующих нескольким первым значениям J:

$J=0$	$1/2$	1	$3/2$	2	$5/2$	3
A_1	E_1'	F_1	G'	$E+F_2$	$E_2'+G'$	$A_2+F_1+F_2$

[1]) Такие представления есть у групп C_n' с нечетными n; характеры в них равны $\chi(C_n^k)=(-1)^k$.

[2]) В связи с применением этих правил отметим, что в случае двузначных представлений единичное представление содержится не в симметричном, а в антисимметричном произведении представления самого на себя. Для двузначного представления с размерностью 2 произведение $\{D^{(\alpha)2}\}$ просто совпадает с единичным.

[3]) Речь может идти, например, об атоме в кристаллической решетке. Заметим также, что наличие или отсутствие центра симметрии в группе симметрии внешнего поля для рассматриваемого вопроса не имеет значения, так как поведение волновой функции при инверсии (четность или нечетность уровня) не имеет отношения к моменту J.