Глава 21

КВАНТОВОЕ ЧИСЛО ПОЛНОГО МОМЕНТА КОЛИЧЕСТВА ДВИЖЕНИЯ

1. В формуле преобразования предыдущей главы [см. (20.19)], которая записывается в виде

$$\mathsf{O}_R\Phi(x, y, z, s) = \sum_{t=\pm 1} \mathfrak{D}^{\left(\frac{1}{2}\right)}(R)_{\frac{1}{2}s,\, \frac{1}{2}t}\, \mathsf{P}_R\Phi(x, y, z, t) =$$

$$= \sum_{t=\pm 1} \mathfrak{D}^{\left(\frac{1}{2}\right)}(R)_{\frac{1}{2}s,\, \frac{1}{2}t}\, \Phi(x'', y'', z'', t), \qquad (21.1)$$

R означает чистое вращение. Если мы хотим записать волновую функцию в системе координат, полученной из первоначальной путем несобственного вращения, сначала можно произвести инверсию

$$x' = -x, \quad y' = -y, \quad z' = -z, \qquad (21.2)$$

а затем — вращение. Таким образом, остается лишь вопрос о том, как волновая функция $\mathsf{O}_I\Phi$ состояния Φ представляется наблюдателю, связанному с системой координат, оси которой направлены *противоположно* осям первоначальной системы.

Рассмотрим прежде всего состояние $u_s\psi(x, y, z)$. В „бесспиновых" опытах оно ведет себя для первого наблюдателя так, как если бы его волновая функция была ψ, и поэтому для наблюдателя в отраженной системе координат — так, как если бы его волновая функция была $\mathsf{P}_I\psi$, где

$$\mathsf{P}_I\psi(x, y, z) = \psi(-x, -y, -z). \qquad (21.2)$$

Следовательно, $\mathsf{O}_I u_s\psi(x, y, z) = u'_s \cdot \mathsf{P}_I\psi(x, y, z)$. Магнитный момент в состоянии $u_s\psi(x, y, z)$ имеет заданное направление. При инверсии координат это направление переходит в противоположное, так как магнитный момент является *аксиальным* вектором. Но противоположное направление обозначено в новой системе координат точно так же, как и первоначальное направление в старой системе. Для второго наблюдателя направление спина такое же, как и для первого, и множитель u'_s функции $\mathsf{P}_I\psi$ в $\mathsf{O}_I u_s\psi(x, y, z)$ равен u_s.

Мы знаем, что магнитный диполь может быть всегда заменен круговым током. Если этот круговой ток лежит, скажем, в плоскости XY и направлен от X к Y, то он также лежит в плоскости $X'Y'$ и направлен от X' к Y'.

Следовательно, для всех u_s и всех $\psi(x, y, z)$ имеем

$$\mathsf{O}_I u_s \psi(x, y, z) = u_s \mathsf{P}_I \psi(x, y, z) = \mathsf{P}_I u_s \psi(x, y, z), \qquad (21.3)$$

с точностью постоянного множителя, который может еще зависеть от u и ψ. Но можно показать, точно так же, как это было сделано после соотношений (20.8а), что эта постоянная должна иметь одну и ту же величину для всех u и всех ψ, если мы требуем линейности операторов O_I. Поскольку O_I уже содержит совершенно произвольный множитель, эта постоянная может быть полностью опущена. Далее, так как всякую функцию $\Phi(x, y, z, s)$ можно записать в виде линейной комбинации функций вида $u_s\psi(x, y, z)$, то из (21.3) и свойства линейности операторов O_I и P_I следует, что $\mathsf{O}_I \equiv \mathsf{P}_I$:

$$\mathsf{O}_I \Phi(x, y, z, s) = \mathsf{P}_I \Phi(x, y, z, s) = \Phi(-x, -y, -z, s). \qquad (21.4)$$

Оператор O_I, осуществляющий инверсию (21.2) системы координат, вовсе не действует на спиновые координаты; он задается соотношением (21.4). Мы имеем $\mathsf{O}_I^2 = 1$ или $\mathsf{O}_I \mathsf{O}_I \Phi = \Phi$; таким образом, тождественный оператор и оператор O_I образуют группу, изоморфную группе отражений.

В соотношениях (21.1) и (21.4) мы имеем формулы преобразования волновых функций при произвольном изменении осей. Кроме того, эти соотношения справедливы не только для электронов, но и для протонов. Однако магнитный момент протона гораздо меньше, чем магнитный момент электрона (масса протона примерно в 1840 раз больше), и поэтому не так легко доступен наблюдению, как магнитный момент, связанный со спином электрона. В дальнейшем изложении мы не будем учитывать спин ядра.

Соотношения (21.1) и (21.4) остаются также справедливыми без существенных изменений в релятивистской теории электрона Дирака[1]). Согласно последней, волновая функция состоит не из двух функций координат $\Phi(x, y, z, -1)$ и $\Phi(x, y, z, 1)$, а из четырех. Наряду с s, можно ввести пятую координату s', которая также может принимать два значения. Тогда для чистых вращений соотношение (21.1) остается без изменений: s' вообще не участвует в этом преобразовании; с другой стороны, при инверсиях два значения s' меняются местами.

2. Соотношения (21.1) и (21.4) относятся к системе, содержащей только один электрон. В случае нескольких электронов

[1]) J. A. Gaunt, Proc. Roy. Soc., **A124**, 163 (1929).

волновая функция $\Phi(x_1, y_1, z_1, s_1, \ldots, x_n, y_n, z_n, s_n)$ содержит спиновые координаты всех частиц, как и их декартовы координаты. Скалярное произведение двух функций Φ и G равно

$$(\Phi, G) = \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \ldots \sum_{s_n=\pm 1} \int\int \ldots \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(x_1, \ldots, s_n)^* \times \times G(x_1, \ldots, s_n)\, dx_1 \ldots dz_n. \quad (21.5)$$

В простой теории без спина оператор P_R действовал на все тройки координат, притом на все одинаковым образом. Аналогичным образом, оператор O_R, который в теории Паули осуществляет преобразование к другой системе осей, действует теперь на все координаты x_k, y_k, z_k и s_k точно так же, как он действует на x, y, z и s в (21.1) и (21.4). Таким образом, имеем

$$\mathsf{O}_R\Phi(x_1, y_1, z_1, s_1, \ldots, x_n, y_n, z_n, s_n) = \\ = \sum_{t_1, \ldots, t_n} \mathfrak{D}^{\left(\frac{1}{2}\right)}(R)_{\frac{1}{2}s_1, \frac{1}{2}t_1} \ldots \mathfrak{D}^{\left(\frac{1}{2}\right)}(R)_{\frac{1}{2}s_n, \frac{1}{2}t_n} \times \\ \times \mathsf{P}_R\Phi(x_1, y_1, z_1, t_1, \ldots, x_n, y_n, z_n, t_n) \quad (21.6)$$

и

$$\mathsf{O}_I\Phi(x_1, y_1, z_1, s_1, \ldots, x_n, y_n, z_n, s_n) = \\ = \mathsf{P}_I\Phi(x_1, y_1, z_1, s_1, \ldots, x_n, y_n, z_n, s_n) = \\ = \Phi(-x_1, -y_1, -z_1, s_1, \ldots, -x_n, -y_n, -z_n, s_n). \quad (21.7)$$

Оператор O_R является произведением операторов P_R и Q_R, первый из которых действует только на декартовы координаты:

$$\mathsf{P}_R\Phi(x_1', y_1', z_1', s_1, \ldots, x_n', y_n', z_n', s_n) = \\ = \Phi(x_1, y_1, z_1, s_1, \ldots, x_n, y_n, z_n, s_n). \quad (21.6а)$$

Здесь x_k', y_k', z_k' получаются из x_k, y_k, z_k путем вращения R. Второй оператор действует только на спиновые координаты:

$$\mathsf{Q}_R\Phi(x_1, y_1, z_1, s_1, \ldots, x_n, y_n, z_n, s_n) = \\ = \sum_{t_1=\pm 1} \ldots \sum_{t_n=\pm 1} \mathfrak{D}^{\left(\frac{1}{2}\right)}(R)_{\frac{1}{2}s_1, \frac{1}{2}t_1} \ldots \mathfrak{D}^{\left(\frac{1}{2}\right)}(R)_{\frac{1}{2}s_n, \frac{1}{2}t_n} \times \\ \times \Phi(x_1, y_1, z_1, t_1, \ldots, x_n, y_n, z_n, t_n). \quad (21.6б)$$

Поскольку система спиновых координат может принимать 2^n различных наборов значений, оператор Q_R эквивалентен 2^n-мерной матрице; ее строки и столбцы нумеруются n индексами, причем

каждый индекс может иметь значения ± 1, соответствующие двум возможным значениям спиновых координат. Матричной формой Q_R является

$$\mathsf{Q}_R = \mathfrak{D}^{\left(\frac{1}{2}\right)}(R) \times \mathfrak{D}^{\left(\frac{1}{2}\right)}(R) \times \ldots \times \mathfrak{D}^{\left(\frac{1}{2}\right)}(R), \tag{21.6в}$$

$$(\mathsf{Q}_R)_{s_1 s_2 \ldots s_n;\, t_1 t_2 \ldots t_n} = \mathfrak{D}^{\left(\frac{1}{2}\right)}(R)_{\frac{1}{2} s_1,\, \frac{1}{2} t_1} \ldots \mathfrak{D}^{\left(\frac{1}{2}\right)}(R)_{\frac{1}{2} s_n,\, \frac{1}{2} t_n}.$$

Все операторы P коммутируют с операторами Q_R:

$$\mathsf{P}_S \mathsf{Q}_R = \mathsf{Q}_R \mathsf{P}_S$$

и, в частности, (21.8)

$$\mathsf{O}_R = \mathsf{P}_R \mathsf{Q}_R = \mathsf{Q}_R \mathsf{P}_R.$$

Кроме того, оператор $\mathsf{O}_I = \mathsf{P}_I$ коммутирует со всеми P_R и, следовательно, в силу (21.8), со всеми O_R, где R — любое чистое вращение.

Операторы Q_R определяются вращением лишь с точностью до знака, так как $\mathfrak{D}^{\left(\frac{1}{2}\right)}(R)$ имеет свободный знак. Для четного числа электронов эту неоднозначность можно устранить условием, чтобы все $\mathfrak{D}^{\left(\frac{1}{2}\right)}(R)$ в (21.6) и (21.6в) брались *с одним и тем же знаком*. Для нечетного числа электронов оператор Q_R невозможно сделать однозначным.

3. Если мы переходим сначала к координатной системе, повернутой на R, а затем — к системе координат, повернутой относительно этой последней на S, то волновая функция Φ преобразуется сначала в $\mathsf{O}_R\Phi$, а затем — в $\mathsf{O}_S\mathsf{O}_R\Phi$. Но переход к той же самой системе координат осуществляется одним вращением SR. В этом случае получается волновая функция $\mathsf{O}_{SR}\Phi$, которая может отличаться от $\mathsf{O}_S\mathsf{O}_R\Phi$ лишь постоянным множителем. Далее, поскольку $\mathsf{O}_S\mathsf{O}_R$ и O_{SR} линейны и унитарны, этот множитель одинаков для всех волновых функций и может зависеть только от вращений S и R:

$$\mathsf{O}_{SR} = c_{S,R}\mathsf{O}_S\mathsf{O}_R. \tag{21.9}$$

Поскольку преобразование к иной системе координат всегда можно выполнить с помощью линейного унитарного оператора, соотношение (21.9) не использует никаких специальных предположений теории Паули и является необходимым следствием инвариантности системы уравнений относительно пространственных вращений. В конце этой главы мы проведем дальнейшее исследование этого равенства и получим ряд следствий, которые должны выполняться в любой квантовой теории.

Соотношение (21.9) можно, разумеется, проверить вычислением. Прежде всего в силу (21.8)

$$\mathsf{O}_S\mathsf{O}_R = \mathsf{P}_S\mathsf{Q}_S\mathsf{P}_R\mathsf{Q}_R = \mathsf{P}_S\mathsf{P}_R\mathsf{Q}_S\mathsf{Q}_R = \mathsf{P}_{SR}\mathsf{Q}_S\mathsf{Q}_R.$$

Для четного числа электронов матрицы (21.6в), представляющие собой матричный вид операторов Q, образуют *однозначное представление* группы вращений, так что $\mathsf{Q}_S\mathsf{Q}_R = \mathsf{Q}_{SR}$ и мы имеем

$$\mathsf{O}_S\mathsf{O}_R = \mathsf{P}_{SR}\mathsf{Q}_S\mathsf{Q}_R = \mathsf{P}_{SR}\mathsf{Q}_{SR} = \mathsf{O}_{SR}. \qquad (21.10а)$$

В этом случае в (21.9) $c_{S,R} = 1$ и операторы O_R образуют группу, изоморфную группе чистых вращений. Следовательно, в этом случае можно определить функции, которые по отношению к операторам O_R принадлежат одной строке некоторого неприводимого представления или просто некоторому неприводимому представлению группы вращений.

Для нечетного числа электронов матрицы (21.6в) образуют двузначное представление группы чистых вращений; поскольку $\mathsf{Q}_S\mathsf{Q}_R = \pm\,\mathsf{Q}_{SR}$,

$$\mathsf{O}_S\mathsf{O}_R = \mathsf{P}_{SR}\mathsf{Q}_S\mathsf{Q}_R = \pm\,\mathsf{P}_{SR}\mathsf{Q}_{SR} = \pm\,\mathsf{O}_{SR}. \qquad (21.10б)$$

Постоянная $c_{S,R} = \pm 1$ в (21.9), и операторы O_R уже не изоморфны группе вращений. В силу двузначности операторов Q_R каждому вращению соответствуют два оператора $+\mathsf{O}_R$ и $-\mathsf{O}_R$.

Так как в гомоморфизме унитарной группы [1]) на группу вращений каждому вращению соответствуют две унитарные матрицы $\mathbf{u} = \mathfrak{D}^{(1/2)}(R)$ и $\mathbf{u} = -\mathfrak{D}^{(1/2)}(R)$, можно попытаться установить однозначное соответствие между O и $\mathbf{u}$. Это можно осуществить, если каждому $\mathbf{u}$ сопоставить $\mathsf{O}_\mathbf{u} = \mathsf{Q}_\mathbf{u} \cdot \mathsf{P}_{R_\mathbf{u}}$ и принять, что $\mathbf{u} \times \mathbf{u} \times \ldots \times \mathbf{u}$ является матричной формой оператора $\mathsf{Q}_\mathbf{u}$ в соответствии с (21.6в), тогда как $R_\mathbf{u}$ является вращением, соответствующим $\mathbf{u}$ в гомоморфизме. Тогда каждый оператор $\mathsf{Q}_\mathbf{u}$ однозначно соответствует одной матрице $\mathbf{u}$. Так как вращения $R_\mathbf{u}$ также однозначно соответствуют матрицам $\mathbf{u}$, то тем же свойством обладают и операторы P_R. Кроме того, из соотношения

$$(\mathbf{u} \times \mathbf{u} \times \ldots \times \mathbf{u}) \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{v} \times \ldots \times \mathbf{v}) = \mathbf{uv} \times \mathbf{uv} \times \ldots \times \mathbf{uv},$$

и из $R_\mathbf{u}R_\mathbf{v} = R_\mathbf{uv}$ следует, что $\mathsf{P}_{R_\mathbf{u}}\mathsf{P}_{R_\mathbf{v}} = \mathsf{P}_{R_\mathbf{uv}}$ и поэтому

$$\mathsf{O}_\mathbf{u}\mathsf{O}_\mathbf{v} = \mathsf{O}_\mathbf{uv}.$$

---

[1]) Точнее, группы двумерных унитарных матриц с определителем 1.

Таким образом, для нечетного числа электронов функции f_{-j}, f_{-j+1}, ..., f_{j-1}, f_j, для которых справедливо соотношение

$$\mathbf{O}_{\mathbf{u}} f_{\mu}^{(j)} = \sum_{\mu'=-j}^{j} \mathfrak{U}^{(j)}(\mathbf{u})_{\mu'\mu} f_{\mu'}^{(j)}, \tag{21.11}$$

принадлежат различным строкам представления $\mathfrak{U}^{(j)}$ унитарной группы. Следовательно, они удовлетворяют соотношениям, выведенным в гл. 12 для функций, принадлежащих неприводимым представлениям *любой* группы.

В дальнейшем изложении вместо (21.11) всегда будем пользоваться соотношением

$$\mathbf{O}_{\mathbf{R}} f_{\mu}^{(j)} = \pm \sum_{\mu'=-j}^{j} \mathfrak{D}^{(j)}(R)_{\mu'\mu} f_{\mu'}^{(j)}; \tag{21.11а}$$

может показаться, что (21.11) вытекает из (21.11а) лишь с точностью до знака:

$$\mathbf{O}_{\mathbf{u}} f_{\mu}^{(j)} = \pm \sum_{\mu'} \mathfrak{U}^{(j)}(\mathbf{u})_{\mu'\mu} f_{\mu'}^{(j)}. \tag{21.11б}$$

Действительно, всегда выводится именно (21.11). Кроме того, из (21.11а) следует (21.11), а не (21.11б). Чтобы убедиться в том, что нижний знак в (21.11б) исключается, предположим, что он верен. Тогда мы могли бы непрерывно преобразовать $\mathbf{u}$ в единичную матрицу. При этом обе части (21.11б) изменяются непрерывно, так что всюду нужно было бы сохранять нижний знак. Но для $\mathbf{u} = \mathbf{1}$ соотношение (21.11б) с нижним знаком имеет вид

$$\mathbf{O}_{\mathbf{1}} f_{\mu}^{(j)} = -\sum_{\mu'} \delta_{\mu'\mu} f_{\mu'}^{(j)} = -f_{\mu}^{(j)},$$

что заведомо неверно, так как $\mathbf{O}_{\mathbf{1}}$ — тождественный оператор, который должен оставлять неизменной любую функцию. Поэтому в (21.11б) верным является лишь верхний знак. Следовательно, (21.11а) действительно совпадает с (21.11); мы предпочитаем пользоваться формулой (21.11а), так как в ней подчеркивается значение операции $\mathbf{O}$ как пространственного вращения.

Пусть далее в соотношении (21.11) $\mathbf{u} = -\mathbf{1}$. Тогда $\mathbf{O}_{-\mathbf{1}}$ отличается знаком от тождественного оператора, так как $\mathbf{P} = \mathbf{P}_E$ является положительным, а $-\mathbf{1} \times -\mathbf{1} \times \ldots \times -\mathbf{1}$ в (21.6в) — отрицательным тождественными операторами (мы имеем дело с нечетным числом электронов). Тогда из (21.11) вытекает, что $\mathfrak{U}^{(j)}(-\mathbf{1}) = -\mathbf{1}$, откуда, согласно гл. 15, следует, что j должно быть полуцелым. *Для нечетного числа электронов* волновая функция может принадлежать только *нечетному представлению* унитарной группы или группы операторов $\mathbf{O}_{\mathbf{u}}$ и, следовательно,

двузначному представлению группы вращений. Естественно, что для четного числа электронов появляются только регулярные представления группы вращений (или четные представления унитарной группы).

Усложнение с двузначными представлениями возникают вследствие того, что коэффициенты $c_{S,R}$ в (21.9) могут быть равны как -1, так и $+1$; *операторы* $\mathbf{O}$, *выражающие инвариантность описания при пространственных вращениях, не образуют группы, изоморфной группе вращений, но образуют группу, изоморфную унитарной группе.*

4. В теории, учитывающей спин, оператор Гамильтона H уравнения Шредингера $\mathsf{H}\Psi = E\Psi$ для энергии E не является больше просто оператором, действующим только на декартовы координаты, как это имело место в предыдущих исследованиях. Силы, возникающие вследствие наличия магнитного момента у электрона, приводят к необходимости введения дополнительных членов, значение которых мы обсудим ниже. Хотя точный вид этих членов вызывает еще некоторые сомнения, ясно, что нельзя отдавать предпочтения какому-либо направлению в пространстве, пока нет внешнего магнитного или электрического поля; если Ψ_μ является стационарным состоянием, то повернутое состояние $\mathbf{O}_R\Psi_\mu$ или $\mathbf{O}_\mathbf{u}\Psi_\mu$ также стационарно, причем оба они имеют одинаковую энергию. Отсюда следует, что $\mathbf{O}_R\Psi_\mu$ и $\mathbf{O}_\mathbf{u}\Psi_\mu$ могут быть представлены в виде линейной комбинации других собственных функций того же собственного значения:

$$\mathbf{O}_R\Psi_\mu = \sum_\nu D(R)_{\nu\mu}\Psi_\nu \quad \text{или} \quad \mathbf{O}_\mathbf{u}\Psi_\mu = \sum_\nu D(\mathbf{u})_{\nu\mu}\Psi_\nu. \tag{21.12}$$

Из $\mathbf{O}_S\mathbf{O}_R = \mathbf{O}_{SR}$ или, для нечетного числа электронов, из $\mathbf{O}_S\mathbf{O}_R = \pm\,\mathbf{O}_{SR}$ (или $\mathbf{O}_\mathbf{u}\mathbf{O}_\mathbf{v} = \mathbf{O}_\mathbf{uv}$) можно заключить, как обычно, что

$$\mathbf{D}(S)\,\mathbf{D}(R) = \mathbf{D}(SR), \tag{21.13а}$$

или, для нечетного числа электронов,

$$\mathbf{D}(S)\,\mathbf{D}(R) = \pm\,\mathbf{D}(SR) \quad \text{или} \quad \mathbf{D}(\mathbf{u})\,\mathbf{D}(\mathbf{v}) = \mathbf{D}(\mathbf{uv}). \tag{21.13б}$$

Матрицы $\mathbf{D}(R)$ образуют однозначное представление группы вращений для четного числа электронов и двузначное представление группы вращений (или однозначное представление унитарной группы) для нечетного числа электронов.

Так же как и в гл. 12, можно заключить, что эти представления могут рассматриваться как неприводимые [1]). Для четного

[1]) Рассматривая собственное значение как несколько случайно совпавших собственных значений.

числа электронов $\mathsf{D}(R)$ могут иметь вид $\mathfrak{D}^{(0)}$, $\mathfrak{D}^{(1)}$, $\mathfrak{D}^{(2)}$, ...; для нечетного числа электронов они являются одним из представлений $\mathfrak{D}^{(1/2)}$, $\mathfrak{D}^{(3/2)}$, $\mathfrak{D}^{(5/2)}$, ... (причем $\mathsf{D}(\mathfrak{u})$ равны $\mathfrak{U}^{(1/2)}$, $\mathfrak{U}^{(3/2)}$, $\mathfrak{U}^{(5/2)}$,...):

$$\mathsf{O}_R\Psi_\mu^{(j)} = \sum_{\mu'} \mathfrak{D}^{(j)}(R)_{\mu'\mu}\,\Psi_{\mu'}^{(j)}. \tag{21.12a}$$

Верхний индекс этих представлений называется квантовым числом полного момента количества движения и обозначается буквами j или J; это число является целым для четного числа электронов и полуцелым — для нечетного числа („чередование мультиплетности"). Номер строки μ, которой принадлежат собственные функции, и здесь также называется магнитным квантовым числом; μ также является целым для четного числа электронов и полуцелым — для нечетного числа.

5. Пусть S — оператор, симметричный относительно O_R, т. е. *скаляр*, на который не оказывает влияния изменение направления осей. Тогда мы знаем, что матричный элемент

$$S_{Nj\mu;\,N'j'\mu'} = \left(\Psi_\mu^{Nj},\ \mathsf{S}\Psi_{\mu'}^{N'j'}\right) = \delta_{jj'}\delta_{\mu\mu'}S_{Nj;\,N'j} \tag{21.14}$$

с двумя собственными функциями, принадлежащими различным представлениям $\mathfrak{D}^{(j)}$ и $\mathfrak{D}^{(j')}$ или различным строкам одного и того же представления, должен *обращаться* в нуль. С другой стороны, если в (21.14) $j=j'$ и $\mu=\mu'$, то выражение (21.14) имеет один и тот же вид при всех μ, т. е. не зависит от магнитного квантового числа.

Теперь естественно найти аналогичные формулы для векторных и тензорных операторов. Скалярный оператор был определен требованием его независимости от выбора системы осей; примером такой величины является энергия, тогда как X-компонента дипольного момента не является такой величиной. Скалярная величина соответствует одному и тому же оператору для всех наблюдателей. С другой стороны, поскольку первый наблюдатель приписывает оператор $\mathsf{O}_R^{-1}\mathsf{S}\mathsf{O}_R$ физической величине, которой второй наблюдатель приписывает оператор S, должно иметь место соотношение

$$\mathsf{O}_R^{-1}\mathsf{S}\mathsf{O}_R = \mathsf{S}, \quad \mathsf{S}\mathsf{O}_R = \mathsf{O}_R\mathsf{S}. \tag{21.15}$$

Таким образом, симметричный оператор коммутирует со всеми преобразованиями.

В противоположность этому, если V_x, V_y, V_z являются X'-, Y'-, Z'-компонентами *векторного* оператора, то X-, Y-, Z-ком-

понентами этого оператора будут [1])

$$\begin{aligned} \mathsf{O}_R^{-1}\mathsf{V}_x\mathsf{O}_R &= R_{xx}\mathsf{V}_x + R_{xy}\mathsf{V}_y + R_{xz}\mathsf{V}_z, \\ \mathsf{O}_R^{-1}\mathsf{V}_y\mathsf{O}_R &= R_{yx}\mathsf{V}_x + R_{yy}\mathsf{V}_y + R_{yz}\mathsf{V}_z, \\ \mathsf{O}_R^{-1}\mathsf{V}_z\mathsf{O}_R &= R_{zx}\mathsf{V}_x + R_{zy}\mathsf{V}_y + R_{zz}\mathsf{V}_z. \end{aligned} \tag{21.16}$$

Таким образом, V_x, V_y, V_z не преобразуются по представлению $\mathfrak{D}^{(0)}$, как S; при преобразовании к новой системе координат они не остаются неизменными, а преобразуются с помощью матрицы вращения R. Далее, $\mathfrak{D}^{(1)}$ как представление группы вращений эквивалентно представлению матрицами R; для дальнейших вычислений вместо X-, Y-, Z-компонент удобно пользоваться компонентами:

$$\begin{aligned} \mathsf{V}^{(-1)} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\mathsf{V}_x + \frac{i}{\sqrt{2}}\mathsf{V}_y, \\ \mathsf{V}^{(0)} &= \mathsf{V}_z, \\ \mathsf{V}^{(1)} &= \frac{-1}{\sqrt{2}}\mathsf{V}_x + \frac{i}{\sqrt{2}}\mathsf{V}_y. \end{aligned} \tag{21.17}$$

Для этих компонент в силу (15.34) вместо (21.16) имеем

$$\mathsf{O}_R^{-1}\mathsf{V}^{(\rho)}\mathsf{O}_R = \sum_{\sigma=-1}^{1} \mathfrak{D}^{(1)}(R)_{\rho\sigma}\mathsf{V}^{(\sigma)}. \tag{21.16а}$$

В более общем случае можно рассмотреть неприводимый тензорный оператор ранга ω, определенный условием, что его $2\omega+1$ компонент $\mathsf{T}^{(\rho)}$ при вращении преобразуются следующим образом:

$$\mathsf{O}_R^{-1}\mathsf{T}^{(\rho)}\mathsf{O}_R = \sum_{\sigma=-\omega}^{\omega} \mathfrak{D}^{(\omega)}(R)_{\rho\sigma}\mathsf{T}^{(\sigma)}. \tag{21.16б}$$

Если в (21.16) R заменить на R^{-1}, то в силу $\mathsf{O}_{R^{-1}} = \mathsf{O}_R^{-1}$ и $\mathfrak{D}^{(\omega)}(R^{-1})_{\rho\sigma} = \mathfrak{D}^{(\omega)}(R)^*_{\sigma\rho}$ получим

$$\mathsf{O}_R\mathsf{T}^{(\rho)}\mathsf{O}_R^{-1} = \sum_{\sigma=-\omega}^{\omega} \mathfrak{D}^{(\omega)}(R)^*_{\sigma\rho}\mathsf{T}^{(\sigma)}. \tag{21.16в}$$

---

[1]) Несмотря на сходство систем (11.18а) и (21.16), они выражают совершенно различные соотношения. Первая из них дает компоненты x' вектора во второй системе координат, выраженные через компоненты x в первой системе. Три соотношения (21.16) выражают векторы, направленные по осям X', Y', Z', через векторы, имеющие направления X, Y, Z. Коэффициенты этих двух систем совпадают, так как они образуют вещественную ортогональную матрицу. В более общем случае одна из них была бы транспонированной обратной к другой.

Из этих равенств мы найдем соотношения, аналогичные (21.14), для векторных и тензорных операторов. Чтобы применить (21.16в), подействуем унитарным оператором $\mathbf{O}_R$ на оба сомножителя скалярного произведения:

$$T^{(\rho)}_{Nj\mu;\,N'j'\mu'} = \left(\Psi^{Nj}_{\mu},\ \mathbf{T}^{(\rho)}\Psi^{N'j'}_{\mu'}\right); \tag{21.18}$$

тогда получим

$$T^{(\rho)}_{Nj\mu;\,N'j'\mu'} = \left(\mathbf{O}_R\Psi^{Nj}_{\mu},\ \mathbf{O}_R\mathbf{T}^{(\rho)}\mathbf{O}_R^{-1}\mathbf{O}_R\Psi^{N'j'}_{\mu'}\right) = \\ = \sum_{\nu}\sum_{\sigma}\sum_{\nu'} \mathfrak{D}^{(j)}(R)^*_{\nu\mu}\,\mathfrak{D}^{(\omega)}(R)^{\cdot}_{\sigma\rho}\,\mathfrak{D}^{(j')}(R)_{\nu'\mu'}\,T^{(\sigma)}_{Nj\nu;\,N'j'\nu'}. \tag{21.18а}$$

Если аналогичную формулу для скалярных операторов проинтегрировать по всем вращениям, то соотношения ортогональности непосредственно привели бы к (21.14). Чтобы вычислить интеграл от произведения трех коэффициентов вращения, который нужен для (21.18а), запишем сначала произведение первых двух из них с помощью (17.16б):

$$\mathfrak{D}^{(j)}(R)^*_{\nu\mu}\,\mathfrak{D}^{(\omega)}(R)^*_{\sigma\rho} = \sum_{L=|j-\omega|}^{j+\omega} s^{(j\omega)}_{L\nu\sigma}\,\mathfrak{D}^{(L)}(R)^*_{\nu+\sigma,\,\mu+\rho}\,s^{(j\omega)}_{L\mu\rho}.$$

Подставляя это выражение в (21.18а) и используя при интегрировании по всем вращениям соотношения ортогональности (10.12), получаем

$$T^{(\rho)}_{Nj\mu;\,N'j'\mu'} = \sum_{L=|j-\omega|}^{j+\omega} s^{(j\omega)}_{L\mu\rho}\sum_{\nu\sigma\nu'} s^{(j\omega)}_{L\nu\sigma}\,\frac{\delta_{Lj'}\,\delta_{\nu+\sigma,\,\nu'}\,\delta_{\mu+\rho,\,\mu'}}{2j'+1}\cdot T^{(\sigma)}_{Nj\nu;\,N'j'\nu'},$$

где обе части равенства разделены на $\int dR$. Это выражение обращается в нуль, если j' не лежит в пределах $|j-\omega|$ и $j+\omega$; при $|j-\omega| \leqslant j' \leqslant j+\omega$ это выражение равно

$$T^{(\rho)}_{Nj\mu;\,N'j'\mu'} = s^{(j\omega)}_{j'\mu\rho}\,\delta_{\mu+\rho,\,\mu'}\,T_{Nj;\,N'j'}, \tag{21.19}$$

где $T_{Nj;\,N'j'}$ уже не зависит от μ, μ' и ρ [1]).

Эта формула является весьма общей [2]). Она позволяет получить численное значение отношения $T^{(\rho)}_{Nj\mu;\,N'j'\mu'}/T^{(\sigma)}_{Nj\mu;\,N'j'\mu'}$ „матричных элементов", т. е. скалярных произведений (21.18), у которых первые множители Ψ^{Nj}_{μ} суть различные собственные функции одного

---

[1]) Величины $T_{Nj;\,N'j'}$ называются иногда приведенными матричными элементами или „матричными элементами с двойной чертой" и записываются в виде $(Nj\|T\|N'j')$.

[2]) В такой общей форме формулу впервые получил Эккарт [C. Eckart, Rev. Mod. Phys., 2, 305 (1930)].

и того же собственного значения, операторы — различные компоненты одного и того же неприводимого тензора, а вторые множители $\Psi_{\mu'}^{N'j'}$ — собственные функции также одного и того же собственного значения (которое может отличаться от собственного значения для функций Ψ_{μ}^{Nj}).

Вернемся к случаю *векторных* операторов, полагая в (21.19) $\omega = 1$. Пользуясь таблицей коэффициентов векторного сложения на стр. 231, мы получаем формулы, аналогичные (21.14), для векторных операторов:

$$\begin{aligned} V^{(-1)}_{Nj\mu;\,N'j-1\mu-1} &= \sqrt{j+\mu}\,\sqrt{j+\mu-1}\,V'_{Nj;\,N'j-1}, \\ V^{(0)}_{Nj\mu;\,N'j-1\mu} &= -\sqrt{j+\mu}\,\sqrt{j-\mu}\,\sqrt{2}\,V'_{Nj;\,N'j-1}, \\ V^{(1)}_{Nj\mu;\,N'j-1\mu+1} &= \sqrt{j-\mu-1}\,\sqrt{j-\mu}\,V'_{Nj;\,N'j-1}. \end{aligned} \tag{21.19а}$$

$$\begin{aligned} V^{(-1)}_{Nj\mu;\,N'j\mu-1} &= \sqrt{j-\mu+1}\,\sqrt{j+\mu}\,V'_{Nj;\,N'j}, \\ V^{(0)}_{Nj\mu;\,N'j\mu} &= \mu\sqrt{2}\,V'_{Nj;\,N'j}, \\ V^{(1)}_{Nj\mu;\,N'j\mu+1} &= -\sqrt{j+\mu+1}\,\sqrt{j-\mu}\,V'_{Nj;\,N'j}. \end{aligned} \tag{21.19б}$$

$$\begin{aligned} V^{(-1)}_{Nj\mu;\,N'j+1\mu-1} &= \sqrt{j-\mu+1}\,\sqrt{j-\mu+2}\,V'_{Nj;\,N'j+1}, \\ V^{(0)}_{Nj\mu;\,N'j+1\mu} &= \sqrt{j-\mu+1}\,\sqrt{j+\mu+1}\,\sqrt{2}\,V'_{Nj;\,N'j+1}, \\ V^{(1)}_{Nj\mu;\,N'j+1\mu+1} &= \sqrt{j+\mu+1}\,\sqrt{j+\mu+2}\,V'_{Nj;\,N'j+1}. \end{aligned} \tag{21.19в}$$

Все не перечисленные здесь матричные элементы векторных операторов обращаются в нуль; элементы с $j = j' = 0$ также равны нулю. Разумеется, из общих соображений нельзя определить $V'_{Nj;\,N'j'}$. В то время как матричные элементы скалярного оператора равны нулю, если квантовые числа полного момента количества движения или магнитные квантовые числа различаются [j и j', и (или) μ и μ'], эти квантовые числа могут отличаться на 1 в случае векторных операторов.

При выводе формул (21.19) не делалось никаких предположений о конкретном виде операторов $\mathbf{O}_R$; поэтому формулы (21.19) должны оставаться справедливыми и в теории, не учитывающей спина, если заменить $\mathbf{O}_R$ на $\mathbf{P}_R$ и квантовое число полного момента количества движения j на орбитальное квантовое число l. Действительно, мы уже не раз приходили к выводу об обращении в нуль матричных элементов векторных операторов. Например, умножение на

$$x_1 + x_2 + \ldots + x_n, \quad y_1 + y_2 + \ldots + y_n, \quad z_1 + z_2 + \ldots + z_n$$

представляет три компоненты векторного оператора, и мы нашли, что вероятность радиационного перехода из состояния ψ_F в состояние ψ_E, которая определяется матричными элементами

$$(\psi_F, (x_1 + x_2 + \ldots + x_n)\psi_E) \text{ и т. д.}$$

обращается в нуль, если разность орбитальных квантовых чисел состояний ψ_F и ψ_E не равна 0 или ± 1. Далее мы видели, что магнитное квантовое число не меняется, если свет поляризован по оси Z ($\rho = 0$), и меняется на ± 1, если свет поляризован в направлении оси X или оси Y.

Дополнительный член в уравнении Шредингера, обязанный наличию магнитного поля $\mathscr{H}_z$ в направлении оси Z,

$$\mathsf{V}_z = \mathsf{V}^{(0)} = \frac{-ie\hbar\mathscr{H}_z}{2mc}\left[x_1\frac{\partial}{\partial y_1} + x_2\frac{\partial}{\partial y_2} + \ldots \right.$$
$$\left. \ldots + x_n\frac{\partial}{\partial y_n} - y_1\frac{\partial}{\partial x_1} - y_2\frac{\partial}{\partial x_2} - \ldots - y_n\frac{\partial}{\partial x_n}\right],$$

является Z-компонентой векторного оператора. В этом случае мы уже фактически вычислили матричные элементы $V_{Nl\mu;\,Nl\mu}$. Средняя из формул (21.19б) показывает, что они должны быть пропорциональны магнитному квантовому числу μ. Мы нашли также, что множитель пропорциональности не зависит от N и l и равен $e\hbar\mathscr{H}_z/2mc$.

Формула (21.19) является в определенном смысле аналогом формулы (19.6), в которой в явном виде выражена зависимость собственных функций от ориентации n-лучевика конфигурации. Последние сочетают в одном равенстве, по крайней мере в случае бесспиновой теории, всю информацию о *волновой функции*, которую дает вращательная симметрия системы. Как в элементарной теории, так и в теории с учетом спина формула (21.19) включает всю информацию *о матричных элементах*, которую можно получить из вращательной симметрии, причем без использования какого-либо приближения.

6. Интересно отметить [1]), что существование квантового числа полного момента количества движения, а также равенства (21.19) следуют уже из весьма общего соотношения (21.9), за исключением того, что (21.9) не позволяет решить, является ли число j целым или полуцелым. Нельзя ожидать решения этого вопроса на основе (21.9), так как число электронов не входит в это соотношение.

Если использовать соотношение (21.9) для выяснения поведения (21.13) матриц $\mathbf{D}$ при умножении, то вместо (21.13) получается только тот результат, что матрицы $\mathbf{D}(R)$, определенные в (21.12),

$$\mathbf{D}(SR) = c_{S,R}\mathbf{D}(S)\,\mathbf{D}(R), \tag{21.20а}$$

образуют *с точностью до множителя* представление группы вращений. Однако тождественный элемент по-прежнему представлен единичной матрицей. Сейчас мы покажем, что, умножая каждую матрицу $\mathbf{D}(R)$, удовлетворяющую соотношению (21.20а), на соответствующим образом выбранное число c_R, можно получить систему

[1]) Оставшаяся часть настоящей главы не существенна для понимания последующих глав.

матриц $\bar{\bar{\mathbf{D}}}(R) = c_R \mathbf{D}(R)$, которые образуют представление унитарной группы, т. е. для которых

$$\bar{\bar{\mathbf{D}}}(S)\bar{\bar{\mathbf{D}}}(R) = \pm\, \bar{\bar{\mathbf{D}}}(SR). \tag{21.20}$$

Поэтому, согласно гл. 15, эта система матриц с помощью преобразования подобия может быть расщеплена на представления $\mathfrak{D}^{(0)}$, $\mathfrak{D}^{(1/2)}$, $\mathfrak{D}^{(1)}$. Это означает, что такой набор матриц, к которому сразу приводит соотношение (21.9), дает в сущности однозначные и двузначные представления, рассмотренные в гл. 15.

В частности, набор двумерных матриц, удовлетворяющих соотношению (20.17), содержит либо только постоянные матрицы (если он содержит $\mathfrak{D}^{(0)}$ дважды), либо эквивалентен представлению $\mathfrak{D}^{(1/2)}$, как мы заключили в предыдущей главе.

Сначала образуем представление $\bar{\mathbf{D}}(R) = c_R \mathbf{D}(R)$ из $\mathbf{D}(R)$ и выберем c_R равными $(-1/\lambda)$-й степени определителя матриц $\mathbf{D}(R)$. Здесь λ — размерность матриц $\mathbf{D}(R)$. Это приводит к тому, что $|\bar{\mathbf{D}}(R)| = 1$:

$$|\bar{\mathbf{D}}(R)| = |c_R \mathbf{1} \cdot \mathbf{D}(R)| = |c_R \cdot \mathbf{1}| \cdot |\mathbf{D}(R)| = c_R^{\lambda} |\mathbf{D}(R)| = 1. \tag{21.21}$$

Значения постоянных c_R и элементы матриц $\bar{\mathbf{D}}(R)$ не определены еще однозначно, а лишь с точностью до λ-значного корня степени λ из единицы, ω. Таким образом, каждому элементу группы R соответствуют λ матриц, а именно все матрицы, кратные $\mathbf{D}(R)$ и имеющие определитель 1.

Если $\bar{\mathbf{D}}(S)$ умножить на $\bar{\mathbf{D}}(R)$, то получается $\bar{\mathbf{D}}(SR)$. В силу (21.20а), это произведение кратно любой матрице $\bar{\mathbf{D}}(SR)$; его определитель является произведением определителей матриц $\bar{\mathbf{D}}(S)$ и $\bar{\mathbf{D}}(R)$, равным 1.

Из представления $\mathbf{D}(R)$, *определенного с точностью до множителя, мы получили многозначное, точнее, λ-значное представление*; произведение всякой матрицы $\bar{\mathbf{D}}(S)$ на всякую $\bar{\mathbf{D}}(R)$ дает некоторую матрицу $\bar{\mathbf{D}}(SR)$.

Можно попытаться уменьшить эту многозначность представления, выбирая и сохраняя одну из λ матриц $\bar{\mathbf{D}}(R)$ и опуская остальные. Естественно, что это можно сделать не произвольным образом, а лишь таким путем, чтобы любая из оставленных матриц $\bar{\mathbf{D}}(S)$, будучи умноженной на любую другую из оставленных матриц $\bar{\mathbf{D}}(R)$, давала бы снова одну из оставленных матриц $\bar{\mathbf{D}}(SR)$.

Следуя методу Вейля [1]), мы положим в основу этого отбора свойства непрерывности представлений.

Если S и S' — два соседних элемента группы ($S \sim S'$), то для первоначальной формы $\mathbf{D}(R)$ мы должны бы иметь

$$\mathbf{D}(S) \sim \mathbf{D}(S') \quad \text{и} \quad |\mathbf{D}(S)| \sim |\mathbf{D}(S')|.$$

Из последнего соотношения следует, что λ значений чисел c_S являются попарно соседними со значениями $c_{S'}$. В то же время λ матриц $\bar{\mathbf{D}}(S)$ являются попарно соседними с λ матрицами $\bar{\mathbf{D}}(S')$, притом так, что какая-либо матрица $\bar{\mathbf{D}}(S)$ является соседом одной и только одной матрицы $\bar{\mathbf{D}}(S')$, тогда как остальные $\lambda - 1$ матриц существенно отличны, поскольку они получаются из первых путем умножения на число, существенно отличающееся от единицы (корень степени λ из 1).

Если соединить тождественный элемент $E = S(0)$ с элементом $S = S(1)$ непрерывной линией $S(t)$ в пространстве параметров, то можно потребовать, чтобы матрицы $\mathbf{D}(S(t))$ пробегали непрерывную последовательность. Тогда, отправляясь от $\bar{\mathbf{D}}(S(0)) = \bar{\mathbf{D}}(E) = \mathbf{1}$ и следуя вдоль заданного пути $S(t)$, можно получить только одну из λ матриц $\bar{\mathbf{D}}(S)$. Мы обозначим ее через $\bar{\mathbf{D}}(S)_{S(t)}$. Если путь $S(t)$ деформируется непрерывным образом, а конечные точки его остаются фиксированными, то $\bar{\mathbf{D}}(S)_{S(t)}$ никак не меняется, ибо эта матрица может измениться только непрерывно при непрерывной деформации пути, тогда как переход к другой матрице $\bar{\mathbf{D}}(S)$ обязательно повлек бы за собой скачок.

Произведение $\bar{\mathbf{D}}(S)_{S(t)} \cdot \bar{\mathbf{D}}(R)_{R(t)}$ является одной из матриц $\bar{\mathbf{D}}(SR)$, которая также получается непрерывным образом из $\bar{\mathbf{D}}(E) = \mathbf{1}$. Соответствующий путь проходит сначала от E вдоль $S(t)$ к S; при этом $\mathbf{D}(E) = \mathbf{1}$ переходит непрерывно в $\bar{\mathbf{D}}(S)_{S(t)}$; затем путь идет к SR по точкам $S \cdot R(t)$, причем $\bar{\mathbf{D}}(S)_{S(t)} = \bar{\mathbf{D}}(S)_{S(t)} \cdot \mathbf{1}$ переходит непрерывно в $\bar{\mathbf{D}}(S)_{S(t)} \bar{\mathbf{D}}(R)_{R(t)}$, проходя через матрицы $\bar{\mathbf{D}}(S)_{S(t)} \cdot \bar{\mathbf{D}}(R(t))$:

$$\bar{\mathbf{D}}(S)_{S(t)} \cdot \bar{\mathbf{D}}(R)_{R(t)} = \bar{\mathbf{D}}(SR)_{S(t),\, S \cdot R(t)}. \tag{21.22}$$

Если все пути от E к S могут быть деформированы непрерывным образом один в другой, то пространство параметров односвязно

[1]) H. Weyl, Math. Zs., **23**, 271; **24**, 328, 377, 789 (1925); V. Schreier, Abhandl. Math. Seminar Hamburg, 4, 14 (1926); 5, 233 (1927).

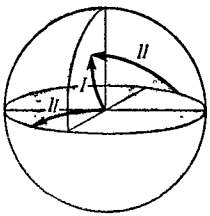
и существует *одна-единственная* матрица $\bar{\bar{\mathbf{D}}}(S) = \bar{\mathbf{D}}(S)_{S(t)}$, которую можно получить непрерывным образом из $\bar{\mathbf{D}}(E) = \mathbf{1} = \bar{\bar{\mathbf{D}}}(E)$. Следовательно, матрицы $\bar{\bar{\mathbf{D}}}(S)$ *образуют однозначное представление группы.*

Если пространство параметров многосвязно, то существуют два или более пути $S_1(t)$, $S_2(t)$, ..., которые не могут быть деформированы один в другой непрерывно; соответствующие матрицы $\bar{\mathbf{D}}(S)_{S_1(t)}$, ..., $\bar{\mathbf{D}}(S)_{S_i(t)}$, ... могут отличаться друг от друга. Представление может быть тогда столь же многозначно, сколько имеется путей от E к S, которые не могут быть деформированы один в другой.

7. Соотношение (21.22) наводит на мысль, что вместо исходной группы следует рассматривать „покрывающую группу", которая имеет столько элементов $S_{S_1(t)}$, $S_{S_2(t)}$, ... для каждого элемента S первоначальной группы, сколько существует путей $S_1(t)$, $S_2(t)$, ... от E к S, которые не могут быть деформированы один в другой [1]). Правило умножения для этой покрывающей группы имеет вид

$$S_{S_i(t)}\, R_{R_k(t)} = S R_{S_i(t),\, S\cdot R_k(t)}. \tag{21.22a}$$

Согласно (21.22), матрицы $\bar{\mathbf{D}}(S)_{S_i(t)}$ образуют регулярное однозначное представление покрывающей группы. Отсюда следует, что *представление непрерывной группы, определенное с точностью до множителя, можно преобразовать в регулярное представление покрывающей группы путем умножения на соответствующим образом подобранные числа.* Если известны все представления покрывающей группы, то известны также и все представления (с точностью до множителя) исходной группы.

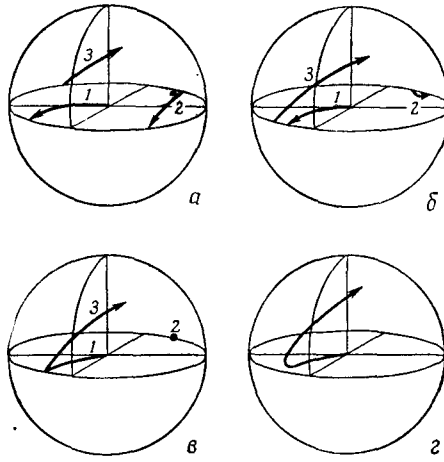


Фиг. 12. Любой элемент группы вращений может быть достигнут от тождественного элемента: либо (*I*) по непрерывному пути без скачков, либо (*II*) по непрерывному пути, включающему скачок из некоторой точки в противоположную ей. Эти два типа путей не могут быть деформированы один в другой.

Пространство параметров (см. фиг. 1 на стр. 110) трехмерной группы чистых вращений двусвязно. Произвольной точки можно достичь от E либо непосредственно (*I*) (фиг. 12), либо путем скачка к противолежащей точке (*II*), причем эти два пути нельзя

[1]) Рассматриваемая здесь группа называется также группой Пуанкаре.

деформировать один в другой. (Скачок к противолежащей точке не рассматривается в качестве разрыва линии пространства параметров, так как противоположные точки соответствуют одному и тому же вращению.) С другой стороны, путь с двумя скачками к противолежащим точкам уже можно преобразовать в путь без скачков, если преобразование выбрать так, чтобы рассматриваемые два скачка вместе компенсировали один другой (фиг. 13).



Фиг. 13. Путь, включающий два скачка в противоположные точки, можно непрерывно деформировать в путь, не имеющий таких скачков, если совместить два скачка, как это показано на схеме.

Таким образом, покрывающая группа имеет вдвое больше элементов, чем группа вращений; следовательно, она изоморфна группе матриц $\mathfrak{D}^{1/2}(R)$. Будучи двузначным представлением группы вращений, это представление является регулярным для покрывающей группы, притом точным, так как каждому вращению сопоставляются две матрицы $\pm\mathfrak{D}^{(1/2)}(R)$, отличные одна от другой и от всех других $\mathfrak{D}^{(1/2)}(S)$.

Матрицы $\mathfrak{D}^{1/2}(R)$ образуют унитарную группу; она является, следовательно, покрывающей группой трехмерной группы вращений. Ее представления можно разбить на $\mathfrak{U}^{(0)}, \mathfrak{U}^{(1/2)}, \ldots$, и соответственно матрицы $\overline{\overline{\mathbf{D}}}(R)=c_R\mathbf{D}(R)$ можно разложить на $\pm\mathfrak{D}^{(0)}, \pm\mathfrak{D}^{(1/2)}, \pm\mathfrak{D}^{(1)}, \ldots$. Если считать, что матрицы $\mathbf{D}(R)$ находятся в приведенном виде (для этого нужно лишь преобразование к новой

системе линейно независимых функций), то для этих функций получаем

$$\mathrm{O}_R \Psi_\mu^{(j)} = \frac{1}{c_R} \sum_{\mu'} \mathfrak{D}^{(j)}(R)_{\mu'\mu} \Psi_{\mu'}^{(j)}, \tag{21.12б}$$

причем j можно рассматривать как квантовое число полного момента количества движения собственных функций $\Psi_{-j}^{(j)}, \Psi_{-j+1}^{(j)}, \ldots, \Psi_{j-1}^{(j)}, \Psi_j^{(j)}$.

Хотя соотношение (21.12б) не вполне эквивалентно равенству (21.12а), оно позволяет вывести большинство правил для полного квантового числа j.