

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



C1355
K-754

9/2-78

P17 - 10987

И.Н.Коцев, М.И.Аройо

125/2-78

КОЭФФИЦИЕНТЫ КЛЕБША-ГОРДАНА

ДЛЯ АНТИУНИТАРНЫХ ГРУПП

I. Лемма Рака для копредставлений

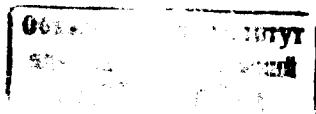
1977

P17 - 10987

И.Н.Коцев, М.И.Аройо

КОЭФФИЦИЕНТЫ КЛЕБША-ГОРДАНА
ДЛЯ АНТИУНИТАРНЫХ ГРУПП

I. Лемма Рака для копредставлений



Коцев И.Н., Аройо М.Н.

P17 - 10987

Коэффициенты Клебша-Гордана для антиунитарных групп.
1. Лемма Рака для копредставлений

Показано, что известная лемма Рака, устанавливающая связь между коэффициентами Клебша-Гордана для линейных представлений некоторой группы и ее подгрупп, имеет место и для копредставлений антиунитарных групп и их подгрупп. На базе этого указан метод вычисления коэффициентов Клебша-Гордана для всех магнитных точечных групп. В качестве примера вычислены коэффициенты для магнитных (шубниковских) точечных групп $41' = C_4 \times \theta$ и $4' = C_4(C_2)$.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1977

Kotzev J.N., Aroyo M.J.

P17 - 10987

Clebsch-Gordan Coefficients for Antiunitary Groups.
1. Racah's Lemma for Corepresentations

The validity of the Racah lemma concerning the relation between the Clebsch-Gordan coefficients of the representations of antiunitary groups and their subgroups is shown for corepresentations of antiunitary groups and their subgroups. A method for calculating Clebsch-Gordan coefficients for all magnetic groups, based on this lemma, is presented. An example of calculation of the coefficients is given for magnetic point groups (Shubnikov's) $41' = C_4 \times \theta$ and $4' = C_4(C_2)$.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1977

При теоретико-групповом анализе различных физических свойств кристаллов с магнитной симметрией [I] в последнее время широко применяются обобщенные кристаллографические группы - двухцветные (шубниковские) [2-6] и многоцветные [7-10]. В тех случаях, когда "цветная нагрузка" элементов обобщенных групп содержит антиунитарный оператор обращения времени θ [II], группу будем называть антиунитарной. Как известно, антиунитарные группы состоят из унитарных, u_i , и антиунитарных, a_j , операторов

$$A = H + H a_0 = \{ g_i = u_i, g_j = a_j = u_j a_0 \}, \quad (1)$$

где $u_i \in H$ образуют подгруппу индекса 2. Под действием $g \in A$ волновые функции и операторы физических величин преобразуются обычным образом

$$g \psi_a^\alpha = \sum_{a'} \psi_{a'}^\alpha D^\alpha(g) a' a, \quad a=1, \dots, |D^\alpha|, \quad (2)$$

однако отображение $g \rightarrow D^\alpha(g)$ не является гомоморфизмом, т.е. совокупность матриц $D^\alpha = \{ D^\alpha(g), g \in A \}$ не образует представления группы A и была названа Вигнером [II] копредставлением (см. также [4-6]). В ряде работ была сделана попытка перенести (с соответствующей модификацией) основные результаты теории обычных представлений на копредставления. В частности, в [12] были введены двузначные копредставления и рассматривались связанные с ними правила отбора и вырождения состояний. В [13] обобщена лемма Шура и даны соотношения ортогональности для копредставлений. В работе [14] впервые введены коэффициенты Клебша-Гордана для копредставлений и получены уравнения для их вычисления, обобщена теорема Вигнера-Экарта, рассмотрены операторы проектирования и соотношения ортогональности (см. также [15]). Результаты работ [16, 17] полностью содержатся в [14].

В данной работе доказывается, что известная лемма Рака [18] имеет место и для копредставлений антиунитарных групп. Показана

также возможность и целесообразность ее применения для вычисления коэффициентов Клебша-Гордана для копредставлений ^{*} шубниковских (магнитных) точечных групп отличным от [13-17] методом. В п.3 выведены формулы для получения приводящих матриц, а в п.4 в качестве примера вычислены предлагаемым методом коэффициенты Клебша-Гордана для копредставлений шубниковских групп $41' = C_4 \otimes \theta$ и $4' = C_4(C_2)$.

2. Лемма Рака [18] устанавливает связь между коэффициентами Клебша-Гордана для обычных представлений групп и их подгрупп. Покажем, что аналогичная лемма имеет место и для копредставлений.

Пусть B - любая антиунитарная подгруппа группы $A (I)$. Ограничение неприводимого копредставления D^α группы A на подгруппу B

$$(D^\alpha \downarrow B) = \{ D^\alpha(g'), g' \in B \subset A \} \quad (3)$$

является копредставлением группы B , в общем случае приводимым. С помощью унитарной приводящей матрицы S^α ограничение (3) разлагается на прямую сумму неприводимых копредставлений D^β группы $B \subset A$

$$S^{\alpha^{-1}} D^\alpha(g') S^{\alpha(*)} = \bar{D}^\alpha(g') = \sum_{\beta \tau_\beta}^\oplus D^{\beta \tau_\beta}(g'), g' \in B. \quad (4)$$

Здесь дополнительный индекс $\tau_\beta = 1, \dots, c_\beta^\alpha$ различает эквивалентные копредставления D^β , содержащиеся c_β^α раз в $(D^\alpha \downarrow B)$, а S^α выбраны так, чтобы матрицы эквивалентных копредставлений в (4) тождественно совпадали, т.е.

$$D^{\beta \tau_\beta}(g') = D^\beta(g'), g' \in B. \quad (5)$$

В (4) и в дальнейшем знак комплексного сопряжения в скобках служит для сокращения записи двух выражений - комплексное со-

^{*} Следует отметить, что при вычислении коэффициентов Клебша-Гордана для обычных представлений точечных групп O_h, D_2, D_4 лемма Рака была впервые применена в работах [19-21]. В более поздней работе [22] рассматривается этот же метод, но предлагаемое в ней соглашение о "стандартизации фаз" является невыполнимым (см. далее п.2).

приение применяется при преобразовании матриц антиунитарных операторов и не применяется в случае унитарных операторов. Применяя преобразование (4) ко всем матрицам $D^\alpha(g), g \in A$, можно получить копредставление \bar{D}^α группы A , эквивалентное D^α , где лишь для $g' \in B$ матрицы $\bar{D}^\alpha(g')$ диагональны по индексам $\beta \tau_\beta, \beta' \tau_{\beta'}$:

$$\bar{D}^\alpha(g')_{\beta \tau_\beta, \beta' \tau_{\beta'}} = \delta_{\beta \beta'} \delta_{\tau_\beta \tau_{\beta'}} D^\beta(g')_{\beta \tau_\beta, \beta \tau_\beta}, g' \in B. \quad (6)$$

Коэффициентами Клебша-Гордана для копредставлений называются матричные элементы

$$U_{a_1 a_2, \alpha \rho_\alpha}^{\alpha_1 \alpha_2} = [\alpha_1 a_1, \alpha_2 a_2 | \alpha \rho_\alpha a] \quad (7)$$

унитарной матрицы $U^{\alpha_1 \alpha_2}$, приводящей к квазидиагональному виду прямое произведение неприводимых копредставлений D^{α_1} и D^{α_2} :

$$U^{\alpha_1 \alpha_2^{-1}} D^{\alpha_1}(g) \otimes D^{\alpha_2}(g) U^{\alpha_1 \alpha_2 (*)} = \sum_{\alpha \rho_\alpha} D^{\alpha \rho_\alpha}(g), g \in A. \quad (8)$$

Здесь индекс $\rho_\alpha = 1, \dots, c_\alpha^{\alpha_1 \alpha_2}$ различает эквивалентные D^α , встречающиеся с кратностью $c_\alpha^{\alpha_1 \alpha_2}$ в $D^{\alpha_1} \otimes D^{\alpha_2}$, а матрицы $D^{\alpha \rho_\alpha}(g) = D^\alpha(g)$. Это же выражение с заменой $\alpha \rightarrow \beta$ имеет место для копредставлений D^β подгруппы B , где

$$U_{\beta_1 \beta_2, \beta \rho_\beta}^{\beta_1 \beta_2} = [\beta_1 \beta_1, \beta_2 \beta_2 | \beta \rho_\beta \beta] \quad (9)$$

являются коэффициентами Клебша-Гордана для $D^\beta \in B$. Чтобы установить связь между (7) и (9), удобно перейти в (8) посредством (4) к эквивалентным копредставлениям \bar{D}^α :

$$\sum_{\substack{\beta_1 \tau_{\beta_1}, \beta_2 \tau_{\beta_2}, \beta \tau_\beta \\ \beta_1' \tau_{\beta_1'}, \beta_2' \tau_{\beta_2'}, \beta' \tau_{\beta'}}} [\alpha \rho_\alpha \beta \tau_\beta | \alpha_1 \beta_1 \tau_{\beta_1}, \alpha_2 \beta_2 \tau_{\beta_2}] \bar{D}^{\alpha_1}(g)_{\beta_1 \tau_{\beta_1}, \beta' \tau_{\beta_1'}} \bar{D}^{\alpha_2}(g)_{\beta_2 \tau_{\beta_2}, \beta' \tau_{\beta_2'}} \times \\ \times [\alpha_1 \beta_1' \tau_{\beta_1'}, \alpha_2 \beta_2' \tau_{\beta_2'} | \alpha' \rho_\alpha' \beta' \tau_{\beta'}]^{(*)} = \delta_{\alpha \alpha'} \delta_{\rho_\alpha \rho_\alpha'} \bar{D}^\alpha(g)_{\beta \tau_\beta, \beta' \tau_{\beta'}}. \quad (10)$$

Здесь коэффициенты Клебша-Гордана для копредставлений группы A записаны в новом базисе (замена $a_i \rightarrow \beta_i \tau_{\beta_i}$).

$$\bar{U}^{\alpha_1 \alpha_2}_{\beta_1 \tau_{\beta_1} b_1, \beta_2 \tau_{\beta_2} b_2, \alpha \rho_\alpha \beta \tau_\alpha b} \equiv [\alpha_1 \beta_1 \tau_{\beta_1} b_1, \alpha_2 \beta_2 \tau_{\beta_2} b_2 | \alpha \rho_\alpha \beta \tau_\alpha b]. \quad (II)$$

Они связаны с (7) преобразованием

$$[\alpha_1 \beta_1 \tau_{\beta_1} b_1, \alpha_2 \beta_2 \tau_{\beta_2} b_2 | \alpha \rho_\alpha \beta \tau_\alpha b] = \quad (I2)$$

$$= \sum_{\alpha_1 \alpha_2 a} (\alpha_1 \alpha_1 | \alpha_1 \beta_1 \tau_{\beta_1} b_1)^* (\alpha_2 \alpha_2 | \alpha_2 \beta_2 \tau_{\beta_2} b_2)^* [\alpha_1 \alpha_1, \alpha_2 \alpha_2 | \alpha \rho_\alpha a] (\alpha a | \alpha \rho_\alpha \beta \tau_\alpha b),$$

или, в матричной форме

$$\bar{U}^{\alpha_1 \alpha_2} = (S^{\alpha_1} \otimes S^{\alpha_2})^{-1} U^{\alpha_1 \alpha_2} \left(\sum_{\alpha \in \alpha_i} S^\alpha \right), \quad (I3)$$

где

$$S_{\alpha, \beta \tau_\beta b}^\alpha \equiv (\alpha a | \alpha \beta \tau_\beta b), \quad (I4)$$

$$(S^{\alpha_i})^{-1}_{\beta \tau_\beta b, \alpha} \equiv (\alpha \beta \tau_\beta b | \alpha a) = (\alpha a | \alpha \beta \tau_\beta b)^*.$$

В прямой сумме $\sum_{\alpha \in \alpha_i} S^\alpha$ матрица S^α повторяется $c_\alpha^{\alpha \alpha_2}$ раз для каждого $D^\alpha \in D^{\alpha_1} \otimes D^{\alpha_2}$.

Из (10) с учетом (6), (8) и унитарности матриц коэффициентов Клебша-Гордана следует

$$\sum_{\beta' b'} \left\{ \sum_{\beta b} [\beta \rho_\beta b | \beta_1 b_1, \beta_2 b_2] [\alpha_1 \beta_1 \tau_{\beta_1} b_1, \alpha_2 \beta_2 \tau_{\beta_2} b_2 | \alpha \rho_\alpha \beta \tau_\alpha b'] \right\} D^{\beta'}(g')_{\beta' b''} = \quad (I5)$$

$$= \sum_{\beta' b'} D^{\beta'}(g')_{\beta' b''} \left\{ \sum_{\beta b} [\beta \rho_\beta b' | \beta_1 b_1, \beta_2 b_2] [\alpha_1 \beta_1 \tau_{\beta_1} b_1, \alpha_2 \beta_2 \tau_{\beta_2} b_2 | \alpha \rho_\alpha \beta \tau_\alpha b''] \right\}^*.$$

Это выражение имеет вид обобщенной леммы Шура для копредставлений [13], где в фигурных скобках выделены элементы некоторой матрицы, коммутирующей со всеми матрицами неприводимого копредставления D^β . Эта матрица является нулевой для $\beta' \neq \beta$, а для $D^{\beta'} = D^\beta$ должна быть эрмитовой и кратной единичной матрице $D^\beta(E)$, то есть

$$\sum_{\beta b} [\beta \rho_\beta b | \beta_1 b_1, \beta_2 b_2] [\alpha_1 \beta_1 \tau_{\beta_1} b_1, \alpha_2 \beta_2 \tau_{\beta_2} b_2 | \alpha \rho_\alpha \beta \tau_\alpha b'] = \quad (I6)$$

$$= (\alpha_1 \beta_1 \tau_{\beta_1}, \alpha_2 \beta_2 \tau_{\beta_2}; \beta \rho_\beta | \alpha \rho_\alpha \beta \tau_\alpha) \delta_{\beta \beta'} \delta_{b b'}.$$

Требование эрмитовости постоянной матрицы (16) является специфическим для копредставлений. Из него следует, что матричные элементы (16) должны быть действительными числами

$$(\alpha_1 \beta_1 \tau_{\beta_1}, \alpha_2 \beta_2 \tau_{\beta_2}; \beta \rho_\beta | \alpha \rho_\alpha \beta \tau_\alpha)^* = (\alpha_1 \beta_1 \tau_{\beta_1}, \alpha_2 \beta_2 \tau_{\beta_2}; \beta \rho_\beta | \alpha \rho_\alpha \beta \tau_\alpha) \equiv \chi_{\beta_1 \tau_{\beta_1}, \beta_2 \tau_{\beta_2}, \rho_\beta, \alpha \rho_\alpha \tau_\alpha}^{\alpha_1 \alpha_2 \beta} \quad (I7)$$

Если для выбранной матрицы $\bar{U}^{\alpha_1 \alpha_2}$ запишем все возможные выражения типа (15), то соответствующие матричные элементы (16) образуют унитарную матрицу

$$X^{\alpha_1 \alpha_2} = \left(\sum_{\beta_i \in \alpha_i} U^{\beta_i \beta_2} \right)^{-1} \bar{U}^{\alpha_1 \alpha_2}, \quad (I8)$$

имеющую блочно-диагональный вид (см., например, таблицу 8). В каждом диагональном по индексам $\beta b, \beta' b'$ блоке находится субматрица $\chi^{\alpha_1 \alpha_2 \beta}$ (17), то есть матрица $X^{\alpha_1 \alpha_2}$ является ортогональной.

Выражение для леммы Рака, устанавливающей связь между коэффициентами Клебша-Гордана для копредставлений группы A и ее подгруппы B, следует непосредственно из (16):

$$[\alpha_1 \beta_1 \tau_{\beta_1} b_1, \alpha_2 \beta_2 \tau_{\beta_2} b_2 | \alpha \rho_\alpha \beta \tau_\alpha b] = \quad (I9)$$

$$= \sum_{\beta b} [\beta_1 b_1, \beta_2 b_2 | \beta \rho_\beta b] (\alpha_1 \beta_1 \tau_{\beta_1}, \alpha_2 \beta_2 \tau_{\beta_2}; \beta \rho_\beta | \alpha \rho_\alpha \beta \tau_\alpha).$$

Для вычисления коэффициентов $U^{\beta_1 \beta_2}$ удобнее воспользоваться обращенным выражением

$$[\beta_1 b_1, \beta_2 b_2 | \beta \rho_\beta b] = \quad (20)$$

$$= \sum_{\alpha \rho_\alpha \tau_\alpha} [\alpha_1 \beta_1 \tau_{\beta_1} b_1, \alpha_2 \beta_2 \tau_{\beta_2} b_2 | \alpha \rho_\alpha \beta \tau_\alpha b] (\alpha_1 \beta_1 \tau_{\beta_1}, \alpha_2 \beta_2 \tau_{\beta_2}; \beta \rho_\beta | \alpha \rho_\alpha \beta \tau_\alpha),$$

или в матричной форме

$$\sum_{\substack{\beta_i \in \alpha_i \\ \beta_2 \in \alpha_2}} U^{\beta_1 \beta_2} = \bar{U}^{\alpha_1 \alpha_2} (X^{\alpha_1 \alpha_2})^{-1}, \quad (21)$$

где матрица $\bar{U}^{\alpha_1 \alpha_2}$ дается выражением (13), а ее матричные элементы - равенством (12).

Для вычисления неизвестных пока элементов (17) матрицы χ^{α, α_2} из (16) следует система уравнений:

$$\sum_{\beta_1, \beta_2} (\alpha_1 \beta_1 \tau_{\beta_1}, \alpha_2 \beta_2 \tau_{\beta_2}; \beta_1 \rho_1 | \alpha \rho_\alpha \beta \tau_\beta) (\alpha_1 \beta_1 \tau'_{\beta_1}, \alpha_2 \beta_2 \tau'_{\beta_2}; \beta_1 \rho_1 | \alpha' \rho'_{\alpha'} \beta \tau'_\beta) = \\ = \sum_{\beta_1, \beta_2} [\alpha_1 \beta_1 \tau_{\beta_1} \beta_1, \alpha_2 \beta_2 \tau_{\beta_2} \beta_2 | \alpha \rho_\alpha \beta \tau_\beta \beta] [\alpha_1 \beta_1 \tau'_{\beta_1} \beta_1, \alpha_2 \beta_2 \tau'_{\beta_2} \beta_2 | \alpha' \rho'_{\alpha'} \beta \tau'_\beta \beta]^* \quad (22)$$

к которым следует добавить соотношения ортогональности для строк и столбцов матриц (17), следующих из ортогональности χ^{α, α_2} :

$$\sum_{\substack{\beta_1, \beta_2, \beta_3 \\ (i=1,2)}} (\alpha_1 \beta_1 \tau_{\beta_1}, \alpha_2 \beta_2 \tau_{\beta_2}; \beta_1 \rho_1 | \alpha \rho_\alpha \beta \tau_\beta) (\alpha_1 \beta_1 \tau_{\beta_1}, \alpha_2 \beta_2 \tau_{\beta_2}; \beta_1 \rho_1 | \alpha' \rho'_{\alpha'} \beta \tau'_\beta) = \delta_{\alpha \alpha'} \delta_{\rho_\alpha \rho'_{\alpha'}} \delta_{\tau_\beta \tau'_\beta} \quad (23)$$

$$\sum_{\alpha \rho_\alpha \tau_\beta} (\alpha_1 \beta_1 \tau_{\beta_1}, \alpha_2 \beta_2 \tau_{\beta_2}; \beta_1 \rho_1 | \alpha \rho_\alpha \beta \tau_\beta) (\alpha_1 \beta_1 \tau'_{\beta_1}, \alpha_2 \beta_2 \tau'_{\beta_2}; \beta_1 \rho_1 | \alpha' \rho'_{\alpha'} \beta \tau'_\beta) = \\ = \delta_{\beta_1 \beta_1'} \delta_{\beta_2 \beta_2'} \delta_{\tau_{\beta_1} \tau_{\beta_1}'} \delta_{\tau_{\beta_2} \tau_{\beta_2}'} \delta_{\rho_\alpha \rho_{\alpha'}} \chi^{\alpha, \alpha_2 \beta}$$

При вычислении элементов матрицы $\chi^{\alpha, \alpha_2 \beta}$ следует учесть, что они являются квазидиагональными по индексу ρ_α , что существенно облегчает решение системы (22). Действительно, в (22) имеются ровно $c_{\rho_\alpha}^{\beta_1, \beta_2}$ уравнений, в которых штрихованные и нештрихованные индексы совпадают

$$\sum_{\rho_\alpha=1}^{c_{\rho_\alpha}^{\beta_1, \beta_2}} (\alpha_1 \beta_1 \tau_{\beta_1}, \alpha_2 \beta_2 \tau_{\beta_2}; \beta_1 \rho_\alpha | \alpha \rho_\alpha \beta \tau_\beta)^2 = \sum_{\beta_1, \beta_2} |[\alpha_1 \beta_1 \tau_{\beta_1} \beta_1, \alpha_2 \beta_2 \tau_{\beta_2} \beta_2 | \alpha \rho_\alpha \beta \tau_\beta \beta]|^2 \quad (24)$$

В левой части (24) отлично от нуля только одно из слагаемых, то есть суммирование по $\rho_\alpha=1, \dots, c_{\rho_\alpha}^{\beta_1, \beta_2}$ отпадает и

$$(\alpha_1 \beta_1 \tau_{\beta_1}, \alpha_2 \beta_2 \tau_{\beta_2}; \beta_1 \rho_\alpha | \alpha \rho_\alpha \beta \tau_\beta) = \pm \left\{ \sum_{\beta_1, \beta_2} |[\alpha_1 \beta_1 \tau_{\beta_1} \beta_1, \alpha_2 \beta_2 \tau_{\beta_2} \beta_2 | \alpha \rho_\alpha \beta \tau_\beta \beta]|^2 \right\}^{1/2} \quad (25)$$

Остальные уравнения (22) позволяют однозначно выбрать знак для всех элементов строк с одинаковыми $\beta_1, \beta_2, \rho_\alpha$. Итак, доказано, что лемма Рака (19) имеет место и для копредставлений антиунитарных групп. При этом копредставления накладывают довольно сильное ограничение (17) для матрицы χ^{α, α_2} (18).

В аналогичных выражениях для обычных представлений матричные элементы (16) являются комплексными числами с неопределенной фазой. В работе [22] предлагалось для "стандартизации" фаз коэффициентов Клебша-Гордана произвольным образом положить все числа (16) действительными и неотрицательными. Здесь первое следует естественным образом из (17), однако второе условие в общем случае противоречит унитарности матрицы χ^{α, α_2} и может привести к неунитарности матриц U^{β_1, β_2} вычисляемых коэффициентов Клебша-Гордана для подгрупп.

3. Для вычисления приводящей матрицы S^α (4), (14) можно воспользоваться выражениями (24)-(33) работы [14] с соответствующей заменой обозначений. Чтобы избежать введения двойных индексов для строк и столбцов матриц копредставлений, выпишем сразу уравнения для вигнеровских случаев a, b, c , к которым может относиться D^β (независимо от типа копредставлений для D^α). Для копредставлений D^β типа a имеем:

$$\frac{|D^\beta|}{|B|} \sum_{u \in B} D^\alpha(u)_{a, a'} D^\beta(u)_{b, b'}^* = \frac{1}{2} \sum_{\tau_\beta=1}^{c_\beta^a} (\alpha a | \alpha \beta \tau_\beta \beta) (\alpha a' | \alpha \beta \tau_\beta \beta')^* \quad (26)$$

где суммирование проводится только по унитарным элементам подгруппы B .

Для D^β типа b :

$$\frac{|D^\beta|}{|B|} \sum_{u \in B} D^\alpha(u)_{a, a'} D^\beta(u)_{b, b'}^* = \\ = \sum_{\tau_\beta} \{ (\alpha a | \alpha \beta \tau_\beta \beta) (\alpha a' | \alpha \beta \tau_\beta \beta')^* + (\alpha a | \alpha \beta \tau_\beta \bar{\beta}) (\alpha a' | \alpha \beta \tau_\beta \bar{\beta}')^* \}, \quad (27)$$

где индексы с чертой равны $\bar{\beta} = |\pm |D^\beta| - \beta|$, $\bar{\beta}' = |\pm |D^\beta| - \beta'|$.

Для D^β типа c :

$$\frac{|D^\beta|}{|B|} \sum_{u \in B} D^\alpha(u)_{a, a'} D^\beta(u)_{b, b'}^* = \sum_{\tau_\beta} (\alpha a | \alpha \beta \tau_\beta \beta) (\alpha a' | \alpha \beta \tau_\beta \beta')^* \quad (28)$$

В этих выражениях учтены только унитарные операторы подгруппы B . Роль антиунитарных операторов учитывается выражением

$$(\alpha a' | \alpha \beta \tau_\beta \beta')^* = \sum_{a, b} (\alpha a | \alpha \beta \tau_\beta \beta) D^\alpha(a_0)_{a, a'}^* D^\beta(a_0)_{b, b'}, \quad a_0 \in B, \quad (29)$$

где a_0 - произвольно выбранный, но фиксированный антиунитарный оператор, с помощью которого строятся все $a = u a_0 (I)$.

Матричные элементы (I4) являются коэффициентами разложения базисных функций копредставлений D^β по соответствующим функциям копредставлений D^α

$$\Psi_\beta^{\beta\tau_a} = \sum_a \Psi_a^\alpha (\alpha a | \alpha \beta \tau_a \beta), \quad (30)$$

то есть приведенные в этом пункте выражения могут оказаться полезными при построении базисов копредставлений.

В частности, в таблицах [23] даны матрицы S^j , приводящие представления $\mathcal{D}^{(j)}$ группы вращений на кристаллографические точечные группы. Однако, так как в [23] учтена также и симметрия относительно обращения времени, все результаты этой книги применимы для копредставлений антиунитарной группы $O(3) \otimes \theta$ и 32 "серых" шубниковских групп $G' = G \otimes \theta$. Из них нетрудно получить матрицы S^α и для 58 "черно-белых" групп $G' \subset G'$. Аналогичное замечание (см. [14]) можно сделать относительно коэффициентов Вигнера [24] и Клебша-Гордана для точечных групп [19-21, 25].

4. Все 122 шубниковские (магнитные) точечные группы являются подгруппами расширенной ортогональной группы $\infty \infty 1' = O(3) \otimes \theta$ [2,7]. Из них антиунитарными являются 32 "серых" $G' = G \otimes \theta$ и 58 "черно-белых" $G' \subset G \otimes \theta$. Коэффициенты Клебша-Гордана для копредставлений этих групп могут быть вычислены с помощью рассмотренной здесь леммы Рака или непосредственно из коэффициентов Вигнера $(j_1 m_1, j_2 m_2 | j m)$ для $O(3) \otimes \theta$ (см. [14]) или последовательным спуском по цепочке подгрупп

$$O(3) \otimes \theta \supset G \otimes \theta \supset G_1' \supset G_2' \supset \dots \supset 1.$$

В качестве примера рассмотрим процесс вычисления коэффициентов Клебша-Гордана для копредставлений групп $41' = C_4 \otimes \theta$ и $4' = C_4(C_2)$ по цепочке $\infty \infty 1' \supset 41' \supset 4'$.

Найдем сначала коэффициенты Клебша-Гордана для подгруппы $B = C_4 \otimes \theta = 41'$ группы $A = O(3) \otimes \theta$. Все копредставления группы $O(3) \otimes \theta$ относятся к типу α по Вигнеру [II], то есть

$$D^\alpha(u) = \mathcal{D}^{(j)}(u), \quad u \in O(3) = O(3) \otimes \theta,$$

$$D^\alpha(a) = D^\alpha(u) D^\alpha(a_0) = \mathcal{D}^{(j)}(u) \mathcal{D}^{(j)}(\theta), \quad (31)$$

$$D^\alpha(a_0)_{a'a} = \mathcal{D}^{(j)}(\theta)_{m'm} = (-1)^{j-m} \delta_{m', -m} \quad (m', m = j, \dots, -j)$$

Копредставления D^β подгруппы $B = C_4 \otimes \theta$ приведены в табл. I. Там же даны базисные функции (30), из которых легко выписать матрицы S^α (I4). В табл. 2 даны разложения $D^{\beta_1} \otimes D^{\beta_2}$, а в табл. 3 - ограничения $(\mathcal{D}^{(j)} \downarrow 41')$. Подчеркнуты копредставления D^β , появившиеся в $\mathcal{D}^{(j)}$ с минимальным j . Этим определяется "квази-момент" $j(\beta)$ каждого копредставления (см. [19-21, 23]). Аналогичные данные для подгруппы $B = 4' = C_4(C_2)$ приводятся в таблицах 4-6.

Из табл. 3 видно, что для вычисления всех коэффициентов подгруппы $41'$ достаточно рассмотреть $\overline{U}^{j_1 j_2} \downarrow_{j_1 j_2} = 2, 2; 3/2, 3/2; 2, 3/2; 3/2, 2$. Действительно, в $\mathcal{D}^{(2)} \otimes \mathcal{D}^{(2)}$ содержатся все произведения однозначных копредставлений, в $\mathcal{D}^{(3/2)} \otimes \mathcal{D}^{(3/2)}$ - двузначных и т.д. Для примера в табл. 7 дана матрица $\overline{U}^{3/2, 3/2}$ (коэффициенты $U^{3/2, 3/2}$ взяты из [24], а S^j - из [23]). Матрица $X^{3/2, 3/2}$ приведена в табл. 8. Все отличные от нуля коэффициенты Клебша-Гордана для копредставлений группы $41'$ сведены в табл. 9. При этом для сокращения объема таблицы явно выписана лишь часть $[\beta_1 \beta_1, \beta_2 \beta_2 | \beta \beta \beta]$, а коэффициенты $[\beta_2 \beta_2, \beta_1 \beta_1 | \beta \beta \beta]$ ($\beta_1 \beta_1 \leftrightarrow \beta_2 \beta_2$) или равны им, или отличаются знаком. В последнем случае после коэффициента стоит звездочка.

Коэффициенты Клебша-Гордана для копредставлений группы $B = 4' = C_4(C_2)$ могут быть найдены тем же путем из $U^{1/2, 1/2} \downarrow_{1/2, 1/2}, U^{1/2, 1}, U^{1, 1/2}$ группы $A = O(3) \otimes \theta$. Значительно проще, однако, тот же результат получается, если рассматривать $4'$ как подгруппу группы $A = 41'$. Действительно, из таблиц I и 4 видно, что копредставления D^β с $\beta = 1, 2, 3$ совпадают с ограничениями $(D^\alpha \downarrow 4')$, $\alpha = 1, 3, 5$, а матрицы S^1, S^3, S^5 являются единичными. Следовательно, $\overline{U}^{\alpha_i \alpha_i}$ ($\alpha_i = 1, 3, 5$) отличается от $U^{\alpha_i \alpha_i}$ лишь переобозначением индексов. Единичными оказываются и матрицы $X^{\alpha_i \alpha_i}$ ($\alpha_i = 1, 3, 5$). Таким образом, все матрицы $U^{\beta_1 \beta_2}$ подгруппы $B = 4'$ получаются из $U^{\alpha_i \alpha_i}$ группы $A = 41'$ заменой индексов. В связи с этим коэффициенты Клебша-Гордана для копредставлений подгруппы $B = 4' = C_4(C_2)$ сведены в той же табл. 9.

Табл. 1.

D ^β	T _{mn}	Γ _α	j(β)	D ^β (u)				D ^β (a ₀)	ψ ^β = ∑ φ _m ^β (j m j β τ β)
				E	C ₄	C ₂	C ₁		
D ¹	α	Γ ₁	0	1	1	1	1	1	φ ₀ ⁰ ; iφ ₀ ⁰ ; φ ₀ ² ; iφ ₀ ³ ; ...
D ²	α	Γ ₂	2	1	-1	1	-1	1	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_2^2 + \varphi_{-2}^2)$; $\frac{i}{\sqrt{2}}(\varphi_2^2 - \varphi_{-2}^2)$; ...
D ³	с	{Γ ₃ Γ ₄ }	1	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	{φ ₁ ¹ ; -φ ₁ ² ; φ ₁ ³ ; ... φ ₋₁ ¹ ; φ ₋₁ ² ; φ ₋₁ ³ ; ...
D ⁵	с	{Γ ₅ Γ ₆ }	1/2	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \omega & i\omega \\ 0 & \omega^* \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\omega^* & 0 \\ 0 & -\omega \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	{φ _{1/2} ^{1/2} ; φ _{1/2} ^{3/2} ; ... φ _{-1/2} ^{1/2} ; φ _{-1/2} ^{3/2} ; ...
D ⁸	с	{Γ ₈ Γ ₇ }	3/2	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \omega^* & 0 \\ 0 & \omega \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \omega & 0 \\ 0 & \omega^* \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	{φ _{3/2} ^{3/2} ; φ _{3/2} ^{5/2} ; ... φ _{-3/2} ^{3/2} ; φ _{-3/2} ^{5/2} ; ...} ω = e ^{iπ/4}

Табл. 2.

D ^β ⊗ D ^β = ∑ c _β D ^β					
β ₁ β ₂	D ¹	D ²	D ³	D ⁵	D ⁸
D ¹	D ¹	D ²	D ³	D ⁵	D ⁸
D ²	D ²	D ¹	D ³	D ⁸	D ⁵
D ³	D ³	D ³	2D ¹ +2D ²	D ⁵ +D ⁸	D ⁵ +D ⁸
D ⁵	D ⁵	D ⁸	D ⁵ +D ⁸	2D ¹ +D ³	2D ² +D ³
D ⁸	D ⁸	D ⁵	D ⁵ +D ⁸	2D ² +D ³	2D ¹ +D ³

Табл. 4.

4'	T _{mn}	D ^β	Γ _α	j(β)	D(u)				D(a ₀)	ψ ^β = ∑ φ _m ^β
					E	C ₂	C ₄	θ		
D ¹	α	Γ ₁	0	1	1	1	1	1	φ ₀ ⁰ ; iφ ₀ ⁰ ; ...	
D ²	β	{Γ ₂ Γ ₂ }	1	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & i \\ 0 & -i \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & i \\ 0 & -i \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	{φ ₁ ¹ ; -φ ₁ ² ; φ ₁ ³ ; ... φ ₋₁ ¹ ; φ ₋₁ ² ; φ ₋₁ ³ ; ...}	
D ³	с	{Γ ₃ Γ ₄ }	1/2	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -\omega \\ \omega & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -\omega \\ \omega & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	{φ _{1/2} ^{1/2} ; φ _{1/2} ^{3/2} ; ... φ _{-1/2} ^{1/2} ; φ _{-1/2} ^{3/2} ; ...}	

где ω = exp iπ/4; a' = u'a.

Табл. 3.

(D ^j ↓ 4I') = ∑ c _β D ^β					
D ⁽⁰⁾	= D ¹	→ j(1) = 0			
D ⁽¹⁾	= D ¹ + D ³	→ j(2) = 1			
D ⁽²⁾	= D ¹ + 2D ² + D ³	→ j(2) = 2			
D ⁽³⁾	= D ¹ + 2D ² + 2D ³				
D ^(1/2)	= D ⁵	→ j(5) = 1/2			
D ^(3/2)	= D ⁵ + D ⁸	→ j(5) = 3/2			

Табл. 5.

β ₁ β ₂	D ¹	D ²	D ³
D ¹	D ¹	D ²	D ³
D ²	D ²	4D ¹	2D ³
D ³	D ³	2D ³	2D ¹ +D ²

Табл. 6.

D ^α ∈ 4I'	D ¹	D ²	D ³	D ⁵	D ⁸
D ^β ∈ 4'	D ¹	D ¹	D ²	D ³	D ³

Табл. 7.

α ₁ β ₁ γ ₁ β ₂ α ₂ β ₂ γ ₂ β ₃	1			2			3		
	0	1	2	3	2	3	1	2	3
	1	1	1	1	1	1	1	1	1
511	511								
511	512								
512	511	1/2	i/√20	-1/2	-3i/√20				
512	512	-1/2	i/√20	1/2	-3i/√20				
811	811								
811	812								
812	811	1/2	3i/√20	1/2	i/√20				
812	812	-1/2	3i/√20	-1/2	i/√20				
511	811					-1/2	-i/2		
511	812					1/2	i/2		
512	811							1/√10	1/√2
512	812							-1/√10	-1/√2
811	511								
811	512								
812	511								
812	512								

Табл. 8.

X ^{α₁ α₂} = X ^{1/2 1/2}		1			2			3		
β ₁ β ₂	β ₃	0	2	1	3	2	3	1	2	3
1	1	1	1	1	1	2	2	1	1	1
1	1	3/2	51, 3/2	51						
1	2	3/2	81, 3/2	81						
2	1	3/2	51, 3/2	51						
2	2	3/2	81, 3/2	81						
1	1	3/2	51, 3/2	81						
1	2	3/2	81, 3/2	51						
2	1	3/2	51, 3/2	81						
2	2	3/2	81, 3/2	51						
3	1	3/2	51, 3/2	51						
3	2	3/2	81, 3/2	81						

Табл. 9.

41'		4' < 41'	41'		4' < 41'
$\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4$		$\beta_1 \beta_2 \beta_3 \beta_4$	$\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4$		$\beta_1 \beta_2 \beta_3 \beta_4$
11, 11, 111	1	11, 11, 111	31, 82, 512	1	
11, 21, 211	1		32, 32, 211	$1/\sqrt{2}$	22, 22, 131
11, 31, 311	1	11, 21, 211	32, 32, 221	$-i/\sqrt{2}$	22, 22, 141
11, 32, 312	1	11, 22, 212	32, 51, 512	-1*	22, 31, 312
11, 51, 511	1	11, 31, 311	32, 52, 812	1	22, 32, 322
11, 52, 512	1	11, 32, 312	32, 81, 511	1	
11, 81, 811	1		32, 82, 811	1*	
11, 82, 812	1		51, 51, 311	1	31, 31, 211
21, 21, 111	1		51, 52, 111	$1/\sqrt{2}$ *	31, 32, 111
21, 31, 312	1		51, 52, 121	$i/\sqrt{2}$	31, 32, 121
21, 32, 311	1		51, 81, 211	$1/\sqrt{2}$	
21, 51, 812	-1*		51, 81, 221	$i/\sqrt{2}$ *	
21, 52, 811	1*		51, 82, 312	1*	
21, 81, 512	-1*		52, 52, 312	1	32, 32, 212
21, 82, 511	1*		52, 81, 311	-1*	
31, 31, 211	$1/\sqrt{2}$	21, 21, 131	52, 82, 211	$1/\sqrt{2}$	
31, 31, 221	$i/\sqrt{2}$	21, 21, 141	52, 82, 221	$-i/\sqrt{2}$ *	
31, 32, 111	$1/\sqrt{2}$	21, 22, 111	81, 81, 312	1	
31, 32, 121	$i/\sqrt{2}$ *	21, 22, 121	81, 82, 111	$1/\sqrt{2}$ *	
31, 51, 811	1	21, 31, 321	81, 82, 121	$i/\sqrt{2}$	
31, 52, 511	1*	21, 32, 311	82, 82, 311	1	
31, 81, 812	-1*		-	-	

ЛИТЕРАТУРА

1. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Электродинамика сплошных сред. ГИИТЛ, М., 1957.
2. В.А.Копчик. Шубниковские группы. Изд. МГУ, М., 1966.
3. Ю.А.Измюв, Р.П.Озеров. Магнитная нейтронография. "Наука", М., 1966.
4. В.В.Еременко. Введение в оптическую спектроскопию магнетиков. "Наукова думка", Киев, 1975.
5. С.С.Брадли, А.Р.Кракнелл. The Mathematical Theory of Symmetry in Solids. Oxford Univ. Press, Oxford, 1972.
6. А.Р.Кракнелл. Adv.Phys., 23, 637 (1974).
7. А.В.Шубников, В.А.Копчик. Симметрия в науке и искусстве. "Наука", М., 1972. См. также дополнение к американскому изданию: А.В.Шубников, В.А.Копчик. Symmetry in Science, Art and Nature. Plenum-Press, N.Y., 1974.
8. Ж.Н.Котсев. Magnetic Symmetry. Proceedings of the Neutron Diffraction Conference, Petten, the Netherlands, 1975.
9. В.А.Копчик, И.Н.Коцев, Э.Н.М.Кузнецов. Труды Международной конференции по магнетизму МКМ-73. "Наука", М., 1974, т.3, стр.474.
10. В.А.Копчик, И.Н.Коцев. Сообщения ОИЯИ, Р4-8466, Дубна, 1974; там же, Р4-9664, Р4-9665, 1976.
11. Е.Вигнер. Теория групп. ИЛ, М., 1961.
12. И.Б.Левинсон. Труды АН ЛитССР, с.Б, 2(25), 67 (1961).
13. Ж.О.Диммоок. J.Math.Phys., 4, 1304 (1963).
14. И.Н.Коцев. К теории копредставлений магнитных групп. Препринт № 14, ИРЭ АН УССР, Харьков, 1972.
15. И.Н.Коцев. Кристаллография, 19, 459 (1974).
16. А.Ариван, Д.В.Литвин. J.Math.Phys., 14, 1491 (1973).
17. Р.Рудра. J.Math.Phys., 15, 2031 (1974).

18. G.Racah. Phys.Rev., 76, 1352 (1949).
19. И.В. Батарунас, И.Б.Левинсон. Труды АН ЛитССР, с.Б, 2(22), 15 (1960).
20. М.З.Белявичус, Ч.В.Радвилавичус, А.Б.Болотин. Лит.физ. сб., 3, 389 (1963).
21. М.З.Белявичус, А.Б.Болотин. Лит.физ.сб., 4, 67 (1964).
22. E.Konig, S.Kremer.Theor.Chim.Acta, 32, 27 (1973).
23. А.М.Леушин. Таблицы функций, преобразующихся по неприводимым представлениям кристаллографических точечных групп. "Наука", М., 1968.
24. Д.А.Варшалович, А.Н.Москалев, В.К.Херсонский. Квантовая теория углового момента. "Наука", М., 1975.
25. G.F.Koster, J.O.Dimmock, R.H.Wheller, H.Statz. Properties of the Thirty-two Point Groups. MIT-Press, Cambridge, Massachusetts, 1963.

Рукопись поступила в издательский отдел
3 октября 1977 года.