

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



С 1358
К-754

15/1-79
P17 - 11906

88/2-79

И.Н.Коцев, М.И.Аройо

КОЭФФИЦИЕНТЫ КЛЕБША-ГОРДАНА
ДЛЯ АНТИУНИТАРНЫХ ГРУПП.

II. Шубниковские (магнитные) точечные
группы кубической сингонии

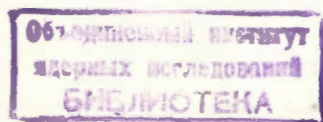
1978

P17 - 11906

И.Н.Коцев, М.И.Аройо

КОЭФФИЦИЕНТЫ КЛЕБША-ГОРДАНА
ДЛЯ АНТИУНИТАРНЫХ ГРУПП.

II. Шубниковские (магнитные) точечные
группы кубической сингонии



Коцев И.Н., Аройо М.И.

P17 - 11906

Коэффициенты Клебша-Гордана для антиунитарных групп.
II. Шубниковские (магнитные) точечные группы кубической сингонии

На базе полученного ранее авторами обобщения известной леммы Рака на случай копредставлений антиунитарных групп в работе дана общая схема вычисления коэффициентов Клебша-Гордана для копредставлений всех 90 антиунитарных шубниковских (магнитных) точечных групп (58 черно-белых и 32 серых). Найденные этим методом коэффициенты хорошо согласуются с коэффициентами Вигнера, являющимися исходными при вычислениях. Для однозначных и двузначных копредставлений одиннадцати кубических групп приведены таблицы характеров и базисных функций, таблицы умножения, таблицы коэффициентов Клебша-Гордана (в виде приводящих унитарных матриц). Эти таблицы необходимы при решении задач спектроскопии твердых тел и теории кристаллического поля (правила отбора, теорема Вигнера-Эккарта).

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1978

Kotzev I.N., Aroyo M.I.

P17 - 11906

Clebsch-Gordan Coefficients for Antiunitary Groups.
II. Shubnikov's (Magnetic) Point Groups of Cubic(Cryst.) System

On the base of generalization of the known Racah's lemma for corepresentations of antiunitary groups, obtained earlier by the authors, a general scheme for calculating Clebsch-Gordan coefficients for corepresentations of total 90 antiunitary Shubnikov's (magnetic) points groups (58 black and 32 grey) is given. The coefficients so calculated agree well with the Wigner coefficients being initial. For single- and two-valued corepresentations of eleven cubic groups tables of characters and basis functions, multiplication tables and of Clebsch-Gordan coefficients (as reducible unitary matrices) are presented. Tables are necessary for some problems of solid state spectroscopy and crystal field theory (selection rules, Wigner-Eckart theorem).

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1978

1. В работе /1/ показано, что известная лемма Рака /2/, устанавливающая связь между коэффициентами Клебша-Гордана для линейных представлений некоторой группы и ее подгрупп, имеет место также и для копредставлений /3/ антиунитарных групп и их подгрупп. Там же был подробно рассмотрен основанный на обобщенной лемме Рака метод вычисления коэффициентов Клебша-Гордана для копредставлений, обладающий рядом преимуществ по сравнению с ранее предлагавшимися методами /4-7/. Этим методом нами были найдены и табулированы /8/ коэффициенты Клебша-Гордана для однозначных и двузначных копредставлений всех 90 антиунитарных (32 серых и 58 черно-белых) шубниковских (магнитных) точечных групп*. В настоящей работе, являющейся продолжением /1/, впервые публикуются полные таблицы коэффициентов для групп кубической сингонии и рассматриваются некоторые особенности выбора их фазовых множителей. Таблицы коэффициентов для копредставлений групп тетрагональной, орторомбической, моноклинной и триклинной сингонии даны в /10/, а для гексагональной и тригональной (ромбоэдрической) сингонии - в /11/.

2. Все 122 шубниковские (магнитные) точечные группы являются подгруппами расширенной полной ортогональной группы $O(3) \times \theta = \infty \infty T_1$.

* В работе /9/ сообщается о вычислении коэффициентов Клебша-Гордана для однозначных копредставлений магнитных точечных групп (методом, описанным в /6/), однако таблицы не приводятся.

Как было указано в /4/, коэффициенты Клебша-Гордана для копредставлений этой группы совпадают с известными коэффициентами Вигнера /3, 12/. Действительно, все копредставления $D^{\alpha \pm} = D^{j \pm}$ группы $O(3) \times \Theta$ относятся к типу a по Вигнеру /3/, а их матрицы записываются в виде

$$D^{j \pm}(u) = \mathcal{D}^{j \pm}(u), \quad D^{j \pm}(a) = \mathcal{D}^{j \pm}(u) D^{j \pm}(\theta); \quad (1)$$

$$D^{j \pm}(\theta) = \left\| (-1)^{j-m} \mathcal{D}_{m', -m}^{j \pm} \right\|. \quad (2)$$

Здесь $\mathcal{D}^{j \pm}(u)$ - матрицы неприводимых представлений группы $O(3)$. Знаки " \pm " различают четные и нечетные по отношению к пространственной инверсии I представления и копредставления, т.е.

$$\mathcal{D}^{j \pm}(R) = \mathcal{D}^j(R), \quad \mathcal{D}^{j \pm}(RI) = \pm \mathcal{D}^j(R), \quad (3)$$

где $\mathcal{D}^j(R)$ - матрица неприводимых представлений группы $SO(3)$. Так как в группах типа $G \times C_i$

$$\begin{aligned} D^{\alpha_1 \pm} \otimes D^{\alpha_2 \pm} &= \sum_{\alpha}^{\oplus} c_{\alpha} D^{\alpha +}, \\ D^{\alpha_1 \mp} \otimes D^{\alpha_2 \pm} &= \sum_{\alpha}^{\oplus} c_{\alpha} D^{\alpha -}, \end{aligned} \quad (4)$$

то коэффициенты Клебша-Гордана для копредставлений (или представлений) групп G и $G \times C_i$ (в частном случае - $SO(3)$ и $SO(3) \times C_i = O(3)$, $\alpha = j$, $a = m$) связаны очевидными равенствами

$$\begin{aligned} [\alpha_1 a_1, \alpha_2 a_2 | \alpha \rho a] &= [\alpha_1^{\pm} a_1, \alpha_2^{\pm} a_2 | \alpha^{\pm} \rho a] = \\ &= [\alpha_1^{\mp} a_1, \alpha_2^{\pm} a_2 | \alpha^{-} \rho a]. \end{aligned} \quad (5)$$

В работе /4/ было показано, что коэффициенты Клебша-Гордана для копредставлений вычисляются с помощью матриц унитарных элементов группы, а наличие антиунитарных операторов учитывается дополнительным условием

$$[\alpha_1 a_1, \alpha_2 a_2 | \alpha \rho a]^* = \sum_{\alpha_1' a_1', \alpha_2' a_2'} [\alpha_1' a_1', \alpha_2' a_2' | \alpha \rho a'] D^{\alpha_1'}(a_1)^* D^{\alpha_2'}(a_2)^* D^{\alpha}(a). \quad (6)$$

Все коэффициенты Вигнера - действительные числа, поэтому для группы $SO(3) \times \Theta$ условие (6) с учетом (2) запишется в виде

$$[j_1 m_1, j_2 m_2 | j m] = (-1)^{j_1 + j_2 - j} [j_1 -m_1, j_2 -m_2 | j_1 -m], \quad (7)$$

что совпадает с одним из соотношений симметрии для коэффициентов Вигнера /12/. Итак, хорошо известные коэффициенты Вигнера являются коэффициентами Клебша-Гордана для копредставлений группы $SO(3) \times \Theta = \infty \infty I'$, т.е. можно положить

$$[j_1 m_1, j_2 m_2 | j m] \equiv (j_1 m_1, j_2 m_2 | j m). \quad (8)$$

Учитывая (5) и (8), с помощью обобщенной леммы Рака /1/ можно найти коэффициенты Клебша-Гордана для копредставлений всех 90 антиунитарных шубниковских точечных групп. На практике эффективнее (см. /1/) оказался метод последовательного спуска по цепочке подгрупп (рис. 1), где коэффициенты (8) являются исходными лишь для групп $O_h \times \Theta$ и $D_{6h} \times \Theta$, а коэффициенты для каждой из остальных групп находятся с помощью коэффициентов соответствующей надгруппы.

Для групп кубической сингонии это показано на рис. 2. Здесь в одном прямоугольнике собраны изоморфные антиунитарные группы, которые имеют эквивалентные копредставления. Для того, чтобы их матрицы и соответствующие коэффициенты Клебша-Гордана были одинаковыми, базисные функции копредставлений выбраны четными при инверсии $I \in C_i$. Стрелки "вверх" на рис. 2 направлены к группам типа $G \times C_i$, для которых коэффициенты находятся посредством (5). Подобным образом из всех 90 антиунитарных точечных групп выделены группы $G \times C_i$ (первый столбец табл. I), а остальные распределены по изоморфизму* по 2I классу (строки табл. I, исключая $G \times C_i$). Следовательно, чтобы получить полные таблицы, достаточно вычислить и табулировать коэффициенты для 2I группы - по одному представителю из каждого класса изоморфных групп.

* Необходимо подчеркнуть, что в данной работе рассматриваются как однозначные, так и двузначные копредставления, поэтому изоморфизм определяется для соответствующих "двойных" групп.

3. Структура таблиц. Каждая из таблиц состоит из четырех частей:

а) Таблица характеров и базисных функций копредставлений, построенная по образцу стандартных таблиц для обычных представлений /13, 14/. Указаны также неприводимые представления Δ^β унитарной подгруппы, тип копредставления по Вигнеру (a, b, c) , их "квазимомент" $j(\beta)$ и его "проекция" $\mu(\beta)$, матрицы $D^\beta(a_0)$ фиксированного антиунитарного оператора a_0 .

б) Таблица соответствия копредставлений (разложение копредставлений D^α группы A по копредставлениям D^β ее подгруппы B).

в) Таблица умножения копредставлений. Цифры соответствуют номерам β_1, β_2, β копредставлений, а верхний индекс - кратности повторения данного копредставления. В квадратных и фигурных скобках даны номера копредставлений, содержащиеся в симметризованных и антисимметризованных квадратах копредставлений.

г) Таблицы коэффициентов Клебша-Гордана для копредставлений. Даны унитарные матрицы $U^{\beta_1 \beta_2}$, приводящие кронекеровские произведения копредставлений $D^{\beta_1} \otimes D^{\beta_2}$.

Для сокращения объема таблиц опущены тривиальные коэффициенты

$$[11, \beta_2 b_2 | \beta_2 1 b_2] = [\beta_1 b_1, 11 | \beta_1 1 b_1] = 1 \quad (9)$$

и матрицы $U^{\beta_2 \beta_1}$, элементы которых определяются соотношением

$$[\beta_2 b_2, \beta_1 b_1 | \beta \beta b] = (-1)^{j(\beta_1) + j(\beta_2) - j(\beta \beta)} [\beta_1 b_1, \beta_2 b_2 | \beta \beta b]. \quad (10)$$

Отметим, что соотношение (10) не следует из групповых соображений (см., например, /4/), а отражает корреляцию вычисляемых здесь коэффициентов с коэффициентами Вигнера, для которых

$$(j_2 m_2, j_1 m_1 | j m) = (-1)^{j_1 + j_2 - j} (j_1 m_1, j_2 m_2 | j m). \quad (II)$$

В отличие от (II), однако, в (10) квазимомент $j(\beta \beta)$ зависит и от $\beta \beta$. Это связано с тем, что повторяющиеся копредставления $D^{\beta \beta} = D^\beta$ иногда порождаются различными копредставлениями D^α надгруппы с различными квазимоментами $j(\alpha)$.

Ниже приводятся таблицы для кубических групп (табл. 2-4).

В тех случаях, когда применяются различные $j(\beta \beta) \neq j(\beta \beta')$, это указано возле соответствующей матрицы $U^{\beta_1 \beta_2}$.

Некоторые примеры применения коэффициентов Клебша-Гордана для точечных групп даны в /4, 6, 13/.

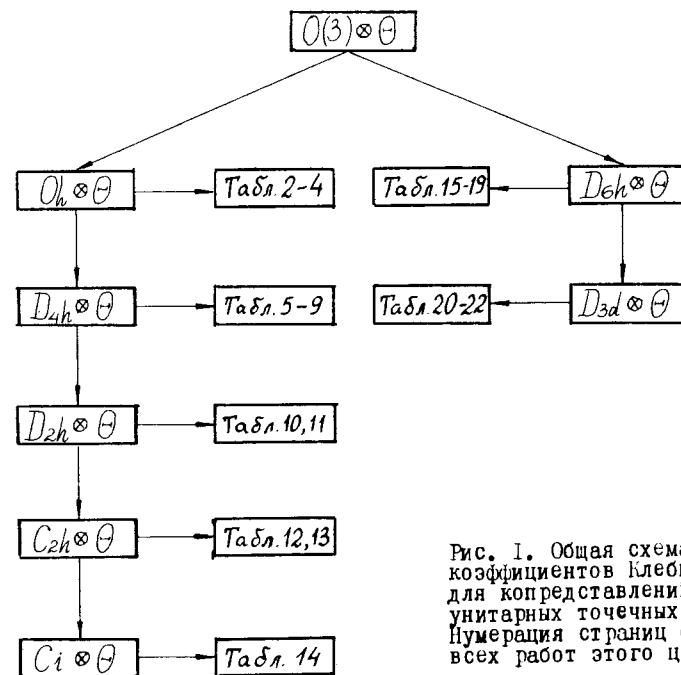


Рис. 1. Общая схема вычисления коэффициентов Клебша-Гордана для копредставлений 90 антиунитарных точечных групп. Нумерация страниц общая для всех работ этого цикла.

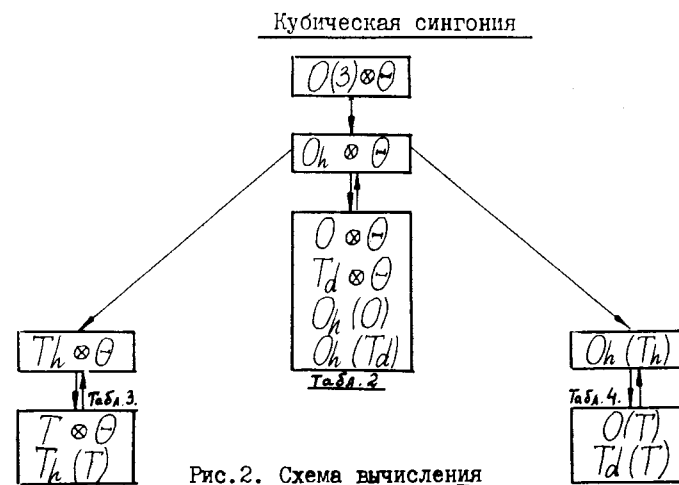


Рис. 2. Схема вычисления коэффициентов Клебша-Гордана

Табл. I Двойные шунниковские (магнитные) точечные группы

симп.	$G \otimes C_i$	$G = H \otimes \Theta$	$G(H) = H + N \otimes \alpha_0$
кубическая	$O_h \otimes \Theta$ $T_h \otimes \Theta$ $O_h(T_h)$	$O \otimes \Theta, Td \otimes \Theta$ $T \otimes \Theta$	$O_h(O), O_h(Td)$ $T_h(T)$ $O(T), Td(T)$
тетрагональная	$D_{4h} \otimes \Theta$ $C_{4h} \otimes \Theta$ $D_{4h}(C_{4h})$ $C_{4h}(D_{2h})$ $C_{4h}(C_{2h})$	$D_4 \otimes \Theta, C_{2v} \otimes \Theta, D_{2d} \otimes \Theta$ $C_4 \otimes \Theta, S_4 \otimes \Theta$	$D_{4h}(D_4), D_{4h}(C_{4v}), D_{4h}(D_{2d})$ $C_{4h}(C_4), C_{4h}(S_4)$ $D_4(C_4), C_{4v}(C_4), D_{2d}(S_4)$ $D_4(D_2), C_{4v}(C_{2v}), D_{2d}(D_2), D_{2d}(C_{2v})$ $C_4(C_2), S_4(C_2)$
орторомб	$D_{2h} \otimes \Theta$ $D_{2h}(C_{2h})$	$D_2 \otimes \Theta, C_{2v} \otimes \Theta$	$D_{2h}(D_2), D_{2h}(C_{2v})$ $D_2(C_2), C_{2v}(C_2), C_{2v}(C_2)$
монокл.	$C_{2h} \otimes \Theta$ $C_{2h}(C_2)$	$C_2 \otimes \Theta, C_s \otimes \Theta$	$C_{2h}(C_2), C_{2h}(C_s)$ $C_2(C_1), C_s(C_1)$
триклин.	$C_i \otimes \Theta$	$C_1 \otimes \Theta$	$C_i(C_1)$
гексагональная	$D_{6h} \otimes \Theta$ $C_{6h} \otimes \Theta$ $D_{6h}(C_{6h})$ $C_{6h}(D_{3d})$ $C_{6h}(C_{3i})$	$D_6 \otimes \Theta, C_{3v} \otimes \Theta, D_{3h} \otimes \Theta$ $C_6 \otimes \Theta, C_{3h} \otimes \Theta$	$D_{6h}(D_6), D_{6h}(C_{6v}), D_{6h}(D_{3h})$ $C_{6h}(C_6), C_{6h}(C_{3h})$ $D_6(C_6), C_{3v}(C_6), D_{3h}(C_{3h})$ $D_6(D_3), C_{3v}(C_{3v}), D_{3h}(D_3), D_{3h}(C_{3v})$ $C_6(C_3), C_{3h}(C_3)$
тригонал.	$D_{3d} \otimes \Theta$ $C_{3i} \otimes \Theta$ $D_{3d}(C_{3i})$	$D_3 \otimes \Theta, C_{3v} \otimes \Theta$ $C_3 \otimes \Theta$	$D_{3d}(D_3), D_{3d}(C_{3v})$ $C_{3i}(C_3)$ $D_3(C_3), C_{3v}(C_3)$

8

Таблица 2a

G		$u \in H \subseteq G$	α_0
$O \otimes \Theta = 4321'$		$E \ 8C_3(3C_2) \ 6C_4(6C_2) \ \Theta$	Θ
$Td \otimes \Theta = \bar{4}3m'$		$E \ 8C_3(3C_2) \ 6S_4(6C_2) \ \Theta$	Θ
$O_h(O) = m'3m'$		$E \ 8C_3(3C_2) \ 6C_4(6C_2) \ \Theta$	Θ
$O_h(Td) = m'3m$		$E \ 8C_3(3C_2) \ 6S_4(6C_2) \ \Theta$	Θ
D_4	Δ^2	тип (D_4)	$M(D_3)$
D_1	$\Gamma_1 = A_1$	a	0
D_2	$\Gamma_2 = A_2$	a	3
D_3	$\Gamma_3 = E$	a	2
D_4	$\Gamma_4 = T_1$	a	1
D_5	$\Gamma_5 = T_2$	a	2
D_6	$\Gamma_6 = E_1$	a	$1/2$
D_7	$\Gamma_7 = E_2$	a	$5/2$
D_8	$\Gamma_8 = F$	a	$3/2$

$\psi_{\beta\tau\rho} = \sum_m \varphi_m^j S_{m,\beta\tau\rho}^j$

$\varphi_0^0; \sqrt{1/2}(\varphi_2^3 - \varphi_{-2}^3); \varphi_0^2; \sqrt{1/2}(\varphi_2^2 + \varphi_{-2}^2); \varphi_1^1; \varphi_0^1; \varphi_{-1}^1; \varphi_2^2; \sqrt{1/2}(\varphi_2^2 - \varphi_{-2}^2); \varphi_{-1}^2; \varphi_1^2; \sqrt{1/6}\varphi_{3/2}^2; \sqrt{1/6}\varphi_{5/2}^2; \sqrt{1/6}\varphi_{3/2}^2; \sqrt{1/6}\varphi_{5/2}^2; \sqrt{1/6}\varphi_{3/2}^2; \sqrt{1/6}\varphi_{5/2}^2; \sqrt{1/6}\varphi_{3/2}^2; \sqrt{1/6}\varphi_{5/2}^2$

$D_3(\alpha_0) = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix}$

$D_4(\alpha_0) = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix} = -D_5(\alpha_0)$

$D_6(\alpha_0) = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix} = D_7(\alpha_0)$

$D_8(\alpha_0) = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}$

$O_h \otimes \Theta = O \otimes \Theta \otimes C_i - m'3m' = 4321' \otimes T$

Таблица 2b

D^j	D^0	$D^{1/2}$	D^1	$D^{3/2}$	D^2	$D^{5/2}$	D^3
$D_0(O \otimes \Theta)$	D_1	D_6	D_4	D_8	$D_3 + D_5$	$D_7 + D_8$	$D_2 + D_4 + D_5$

9

Таблица 2в

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	[1]	2	3	4	5	6	7	8
2	2	[1]	3	5	4	7	6	8
3	3	3	[1+3]+{2}	4+5	4+5	8	8	6+7+8
4	4	5	4+5	[1+3+5]+{4}	2+3+4+5	6+8	7+8	6+7+8 ²
5	5	4	4+5	2+3+4+5	[1+3+5]+{4}	7+8	6+8	6+7+8 ²
6	6	7	8	6+8	7+8	[4]+{1}	2+5	3+4+5
7	7	6	8	7+8	6+8	2+5	[4]+{1}	3+4+5
8	8	8	6+7+8	6+7+8 ²	6+7+8 ²	3+4+5	3+4+5	[2+4 ² +5]+{1+3+5}

Таблица 2г

$[2121 | 111] = -1$

U^{33}	U^{66}	U^{77}
$\begin{matrix} \begin{matrix} 1 & 2 & 3 & 3 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 2 \end{matrix} \\ \hline \begin{matrix} 31 & 31 & \sqrt{1/2} & -\sqrt{1/2} \\ 31 & 32 & -i\sqrt{1/2} & \sqrt{1/2} \\ 32 & 31 & i\sqrt{1/2} & \sqrt{1/2} \\ 32 & 32 & \sqrt{1/2} & \sqrt{1/2} \end{matrix} \end{matrix}$	$\begin{matrix} \begin{matrix} 4 & 4 & 4 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 3 \end{matrix} \\ \hline \begin{matrix} 61 & 61 & 1 \\ 61 & 62 & \sqrt{1/2} & \sqrt{1/2} \\ 62 & 61 & -\sqrt{1/2} & \sqrt{1/2} \\ 62 & 62 & & 1 \end{matrix} \end{matrix}$	$\begin{matrix} \begin{matrix} 4 & 4 & 4 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 3 \end{matrix} \\ \hline \begin{matrix} 71 & 71 & -1 \\ 71 & 72 & \sqrt{1/2} & -\sqrt{1/2} \\ 72 & 71 & -\sqrt{1/2} & -\sqrt{1/2} \\ 72 & 72 & & -1 \end{matrix} \end{matrix}$

U^{44}	U^{55}
$\begin{matrix} \begin{matrix} 1 & 3 & 3 & 4 & 4 & 4 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 1 & 2 & 3 \end{matrix} \\ \hline \begin{matrix} 41 & 41 & & \sqrt{1/2} & & \\ 41 & 42 & & \sqrt{1/2} & & \sqrt{1/2} \\ 41 & 43 & \sqrt{1/3} & \sqrt{1/6} & & \sqrt{1/2} \\ 42 & 41 & & -\sqrt{1/2} & & \sqrt{1/2} \\ 42 & 42 & -\sqrt{1/3} & \sqrt{1/3} & & \\ 42 & 43 & & & \sqrt{1/2} & \sqrt{1/2} \\ 43 & 41 & \sqrt{1/3} & \sqrt{1/6} & & -\sqrt{1/2} \\ 43 & 42 & & & -\sqrt{1/2} & \sqrt{1/2} \\ 43 & 43 & & \sqrt{1/2} & & -\sqrt{1/2} \end{matrix} \end{matrix}$	$\begin{matrix} \begin{matrix} 5 & 5 & 5 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \end{matrix} \\ \hline \begin{matrix} 51 & 51 & & -\sqrt{1/2} & & -i\sqrt{1/2} \\ 51 & 52 & & & & i\sqrt{1/2} \\ 51 & 53 & \sqrt{1/3} & \sqrt{1/6} & & -\sqrt{1/2} \\ 52 & 51 & & & & -i\sqrt{1/2} \\ 52 & 52 & \sqrt{1/3} & \sqrt{1/3} & & -\sqrt{1/2} \\ 52 & 53 & & & -i\sqrt{1/2} & -i\sqrt{1/2} \\ 53 & 51 & \sqrt{1/3} & \sqrt{1/6} & & \sqrt{1/2} \\ 53 & 52 & & & i\sqrt{1/2} & -i\sqrt{1/2} \\ 53 & 53 & & -\sqrt{1/2} & & i\sqrt{1/2} \end{matrix} \end{matrix}$

Таблица 2г (продолжение)

U^{88}	1	2	3	4	4	4	4	4	5	5	5	5	5	5
P_1, P_2, P_3	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
81 81									$\sqrt{3/8}$					$-\sqrt{3/8}$
81 82		$i\sqrt{1/4}$	$\sqrt{1/4}$							$i\sqrt{1/4}$				$i\sqrt{1/4}$
81 83				$\sqrt{3/10}$				$\sqrt{3/10}$	$\sqrt{1/2}$					$-\sqrt{5/20}$
81 84	$\sqrt{1/4}$			$\sqrt{2/20}$				$-\sqrt{1/20}$						
82 81		$i\sqrt{1/4}$	$-\sqrt{1/4}$							$-i\sqrt{1/4}$				$i\sqrt{1/4}$
82 82				$-\sqrt{2/5}$				$\sqrt{2/40}$						$-\sqrt{15/20}$
82 83	$\sqrt{1/4}$			$-\sqrt{1/20}$				$-\sqrt{1/20}$						
82 84				$\sqrt{3/10}$				$\sqrt{3/40}$	$\sqrt{1/2}$					$\sqrt{5/40}$
83 81				$\sqrt{3/10}$				$\sqrt{3/40}$	$-\sqrt{1/2}$					$-\sqrt{5/40}$
83 82	$\sqrt{1/4}$			$-\sqrt{1/20}$				$-\sqrt{1/20}$						
83 83				$-\sqrt{2/5}$				$\sqrt{2/40}$						$\sqrt{15/20}$
83 84		$-i\sqrt{1/4}$	$\sqrt{1/4}$							$-i\sqrt{1/4}$				$i\sqrt{1/4}$
84 81	$-\sqrt{1/4}$			$\sqrt{2/20}$				$-\sqrt{1/20}$						
84 82				$\sqrt{3/10}$				$\sqrt{3/40}$						$-\sqrt{5/40}$
84 83		$-i\sqrt{1/4}$	$-\sqrt{1/4}$							$i\sqrt{1/4}$				$i\sqrt{1/4}$
84 84									$\sqrt{5/8}$					$\sqrt{3/8}$

$j(4,1)=1$ $j(4,2)=3$ $j(5,1)=2$ $j(5,2)=3$

U^{23}	U^{26}	U^{27}
$\begin{matrix} \begin{matrix} 3 & 3 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{matrix} \\ \hline \begin{matrix} 21 & 31 & i \\ 21 & 32 & -i \end{matrix} \end{matrix}$	$\begin{matrix} \begin{matrix} 7 & 7 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{matrix} \\ \hline \begin{matrix} 21 & 61 & i \\ 21 & 62 & i \end{matrix} \end{matrix}$	$\begin{matrix} \begin{matrix} 6 & 6 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{matrix} \\ \hline \begin{matrix} 21 & 71 & -i \\ 21 & 72 & -i \end{matrix} \end{matrix}$

U^{24}	U^{25}	U^{28}
$\begin{matrix} \begin{matrix} 5 & 5 & 5 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \end{matrix} \\ \hline \begin{matrix} 21 & 41 & -i \\ 21 & 42 & 1 \\ 21 & 43 & i \end{matrix} \end{matrix}$	$\begin{matrix} \begin{matrix} 4 & 4 & 4 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \end{matrix} \\ \hline \begin{matrix} 21 & 51 & i \\ 21 & 52 & -1 \\ 21 & 53 & -i \end{matrix} \end{matrix}$	$\begin{matrix} \begin{matrix} 8 & 8 & 8 & 8 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{matrix} \\ \hline \begin{matrix} 21 & 81 & & i \\ 21 & 82 & & i \\ 21 & 83 & i & \\ 21 & 84 & & -i \end{matrix} \end{matrix}$

Таблица 2г (продолжение)

U_{68} $\begin{matrix} p_1 & p_2 & p_3 \\ p_1 & p_2 & p_3 \end{matrix}$	3	3	4	4	4	5	5	5	U_{78} $\begin{matrix} p_1 & p_2 & p_3 \\ p_1 & p_2 & p_3 \end{matrix}$	3	3	4	4	4	5	5	5
	1	1	1	1	1	1	1	1		1	1	1	1	1	1	1	1
	1	2	1	2	3	1	2	3		1	2	1	2	3	1	2	3
	61 81	$\sqrt{1/2}$					$-i\sqrt{1/2}$										
	61 82		$-\sqrt{1/4}$				$-\sqrt{3/4}$										
	61 83	$\sqrt{1/2}$		$-\sqrt{1/2}$													
	61 84				$-\sqrt{3/4}$		$-\sqrt{1/4}$										
	62 81				$\sqrt{3/4}$		$\sqrt{1/4}$										
	62 82	$\sqrt{1/2}$		$\sqrt{1/2}$													
62 83				$\sqrt{1/4}$		$-\sqrt{3/4}$											
62 84	$\sqrt{1/2}$					$i\sqrt{1/2}$											

U_{67} $\begin{matrix} p_1 & p_2 & p_3 \\ p_1 & p_2 & p_3 \end{matrix}$	2	5	5	5	
	1	1	1	1	
	1	1	2	3	
	61 71				-1
	61 72	$-\sqrt{1/2}$		$\sqrt{1/2}$	
62 71	$i\sqrt{1/2}$		$-i\sqrt{1/2}$		
62 72		1			

Таблица 3а

G		$u \in H \subset G$		α_0	$\psi_b^{p_1 p_2} = \sum_m \varphi_m^j D_m^{j, p_1 p_2}$	$D_2(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & & \\ & & & \end{pmatrix}$
$T \circ \theta = 231'$		$E(3C_2)4C_34C_3$		θ		$D_4(\theta) = \begin{pmatrix} & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \end{pmatrix}$
$T_h(T) = m^3$		$E(3C_2)4C_34C_3$		$I\theta$		$D_5(\theta) = \begin{pmatrix} & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \end{pmatrix}$
D_p	Δ^p	(D_p)	$M(D_p)$		φ_0	$D_6(\theta) = \begin{pmatrix} & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \end{pmatrix}$
D_1	$\sqrt{1}=A$	a	0 0	$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & \omega & \omega^2 \\ 1 & 1 & \omega^2 & \omega \end{pmatrix}$	2	$\varphi_0^2; \sqrt{1/2}(\varphi_2^2 + \varphi_2^2)$
D_2	$\sqrt{2}=E$ $\sqrt{3}=E$	c	2 0 2			
D_4	$\sqrt{4}=T$	a	1 1 0 1	$\begin{pmatrix} 3 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	-1	$\varphi_1^1; \varphi_0^1; \varphi_1^1$
D_5	$\sqrt{5}=E$	a	$1/2 \ 1/2 \ -1/2$	$\begin{pmatrix} 2 & 0 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & \omega & \omega^2 \end{pmatrix}$	0	$\varphi_{1/2}^1; \varphi_{1/2}^1; \varphi_{1/2}^1$
D_6	$\sqrt{6}=F$ $\sqrt{7}=F$	c	$3/2 \ 3/2 \ 1/2 \ 1/2$	$\begin{pmatrix} 2 & 0 & \omega & \omega^2 \\ 2 & 0 & \omega^2 & \omega \end{pmatrix}$	0	$\varphi_{1/2}^2; \varphi_{1/2}^2; \varphi_{1/2}^2; \varphi_{1/2}^2$

$T_h \circ \theta = T \circ \theta \circ C_i - 43m^1 = 231' \circ T$ $\omega = \exp(2\pi i/3)$

Таблица 3б

$D_4(O \circ \theta)$	D_1	D_2	D_3	D_4	D_5	D_6	D_7	D_8
$D_6(T \circ \theta)$	D_1	D_1	D_2	D_4	D_4	D_5	D_5	D_6

Таблица 3в

	1	2	4	5	6
1	[1]	2	4	5	6
2	2	[1+2]+{1}	4 ²	6	5 ² +6
4	4	4 ²	[1+2+4]+{4}	5+6	5 ² +6 ²
5	5	6	5+6	[4]+{1}	2+4 ²
6	6	5 ² +6	5 ² +6 ²	2+4 ²	[1+4 ³]+{1+2+4}

Таблица 3г

U_{44} $\begin{matrix} p_1 & p_2 & p_3 \\ p_1 & p_2 & p_3 \end{matrix}$	1	2	2	4	4	4	4	4	U_{26} $\begin{matrix} p_1 & p_2 & p_3 \\ p_1 & p_2 & p_3 \end{matrix}$	5	5	5	5	6	6	6	6	
	1	1	1	1	1	1	2	2		1	1	2	2	1	1	1	1	
	1	1	2	1	2	3	1	2		3	1	2	1	2	1	2	3	4
	41 41		$\sqrt{1/2}$				$\sqrt{1/2}$						$\sqrt{1/2}$	$\sqrt{1/2}$				
	41 42			$\sqrt{1/2}$						$-\sqrt{1/2}$					$-\sqrt{1/2}$			
	41 43	$\sqrt{1/3}$	$\sqrt{1/6}$		$\sqrt{1/2}$											$-\sqrt{1/2}$		
	42 41			$-\sqrt{1/2}$						$-\sqrt{1/2}$							$\sqrt{1/2}$	
	42 42	$\sqrt{1/3}$	$\sqrt{1/3}$												$-\sqrt{1/2}$		$\sqrt{1/2}$	
	42 43				$\sqrt{1/2}$	$\sqrt{1/2}$											$\sqrt{1/2}$	
	43 41	$\sqrt{1/3}$	$\sqrt{1/6}$		$-\sqrt{1/2}$											$-\sqrt{1/2}$	$\sqrt{1/2}$	
43 42					$-\sqrt{1/2}$	$\sqrt{1/2}$								$-\sqrt{1/2}$	$\sqrt{1/2}$			
43 43			$\sqrt{1/2}$					$-\sqrt{1/2}$						$\sqrt{1/2}$				

$j(4,1)=1$ $j(4,2)=2$

U_{22} $\begin{matrix} p_1 & p_2 & p_3 \\ p_1 & p_2 & p_3 \end{matrix}$	1	2	2	U_{55} $\begin{matrix} p_1 & p_2 & p_3 \\ p_1 & p_2 & p_3 \end{matrix}$	4	4	4	U_{25} $\begin{matrix} p_1 & p_2 & p_3 \\ p_1 & p_2 & p_3 \end{matrix}$	6	6	6	6		
	1	2	1		1	1	1		1	1	1	1	1	1
	1	1	1		2	1	1		2	3	1	2	3	4
	21 21	$\sqrt{1/2}$	$-\sqrt{1/2}$			51 51			1		21 51		-1	
21 22		$-\sqrt{1/2}$	$\sqrt{1/2}$	51 52	$\sqrt{1/2}$	$\sqrt{1/2}$		21 52			1			
22 21		$\sqrt{1/2}$	$\sqrt{1/2}$	52 51	$-\sqrt{1/2}$	$\sqrt{1/2}$		22 51			-1			
22 22	$\sqrt{1/2}$	$\sqrt{1/2}$		52 52			1	22 52		1				

$j(4,1)=0, j(4,2)=3$

Таблица 3г (продолжение)

U ²⁴	4 4 4	4 4 4	U ⁵⁶	2 2	4 4 4	4 4 4	4 4 4
	1 1 1	2 2 2		1 1 1	2 2 2	1 1 1	2 2 2
p ₁ p ₂ p ₃	1 2 3	1 2 3	p ₁ p ₂ p ₃	1 2 3	1 2 3	1 2 3	1 2 3
21 41	√1/4		51 61	√1/2		√1/2	
21 42	-1		51 62	-√1/4		√3/4	
21 43		√1/4 √3/4	51 63	√1/2	-√1/2		
22 41		√3/4 -√1/4	51 64		-√3/4 -√1/4		
22 42			52 61		√3/4	-√1/4	
22 43	√3/4		52 62	√1/2	√1/2		-√1/4
			52 63		√1/4 -√3/4		
			52 64	√1/2		-√1/2	

U ⁶⁶	1 1 1	2 2 2	4 4 4	4 4 4	4 4 4	4 4 4	4 4 4
	1 1 1	1 1 2	1 1 2	1 2 3	1 2 3	1 2 3	1 2 3
p ₁ p ₂ p ₃	1 1 1	1 2 3	1 2 3	1 2 3	1 2 3	1 2 3	1 2 3
61 61				√5/8		√3/8	
61 62	√1/4	√1/4			√1/4	√1/4	
61 63			√3/10	√3/40	-√1/2	√5/40	
61 64	√1/4	√1/4	√9/20	-√1/20			
62 61	√1/4	-√1/4			-√1/4	√1/4	
62 62			√2/5	√9/40		√15/40	
62 63	√1/4	√1/4	-√1/20	-√1/20			
62 64			√3/10	√3/40	√1/2	√2/40	
63 61			√3/10	√3/40	√1/2	√5/40	
63 62	√1/4	-√1/4	-√1/20	-√1/20			
63 63			-√2/5	√9/40		√15/40	
63 64	-√1/4	√1/4			-√1/4	√1/4	
64 61	-√1/4	√1/4	√9/20	-√1/20			
64 62			√3/10	√3/40	√1/2	√5/40	
64 63	-√1/4	-√1/4			√1/4	√1/4	
64 64			√5/8			-√3/8	

j(p₁) = 0, 3, 2, 3, 3, 2, 1

Таблица 3г (продолжение)

U ⁴⁶	5 5	5 5	6 6	6 6	6 6	6 6	U ⁴⁵	5 5	6 6	6 6	6 6
	1 1	2 2	1 1	1 1	2 2	2 2		1 1	1 1	1 1	1 1
p ₁ p ₂ p ₃	1 2	1 2	1 2	3 4	1 2	3 4	p ₁ p ₂ p ₃	1 2	1 2	3 4	1 2
41 61		√1/6				√3/6	41 51		1		
41 62		-√1/2	√2/5		√1/10		41 52	√2/3		√1/3	
41 63	√1/6		√8/5		-√3/10		42 51	-√1/3		√2/3	
41 64	√1/2		√2/5		√1/10		42 52	√1/3		√2/3	
42 61		-√1/3	√3/5		√1/5		43 51	-√2/3		√1/3	
42 62	√1/3		√1/5		-√3/5		43 52				1
42 63	-√1/3		√1/5		√3/5						
42 64	-√1/3		√3/5		√1/5						
43 61	√1/2		-√2/5		-√1/10						
43 62	√1/6		-√9/5		√3/10						
43 63	-√1/2		-√2/5		-√1/10						
43 64		√1/6			√1/6						

j(p₁) = 1/2, 5/2, 3/2, 5/2

Таблица 4а

G		u ∈ H ⊂ G		α ₀	ψ ^{βTP} = ∑ _m ψ _m ^j S _{m,βTP} ^j	D ₄ (α) = $\begin{vmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{vmatrix}$
O(T) = 4'32 T _d (T) = 2'3m'		E(3C ₂) 4C ₃ 4C ₂ ^{xy} 2C ₆ ^{xy}		E(3C ₂) 4C ₃ 4C ₂ ^{xy} 2C ₆ ^{xy}		
D ₀	Δ ⁰	j(D ₀)	M(D ₀)			D ₅ (α) = $\begin{vmatrix} -\epsilon^* & & & \\ & -\epsilon & & \\ & & \epsilon^* & \\ & & & \epsilon \end{vmatrix}$
D ₁	Γ ₁ = A	a	0 0	1 1 1 1 1	ψ ₀	D ₆ (α) = $\begin{vmatrix} \epsilon^* & & & \\ & \epsilon & & \\ & & \epsilon^* & \\ & & & \epsilon \end{vmatrix}$
D ₂	Γ ₂ = E	a	2 2	1 1 √ √ ² 1	√2/2 φ ₀ ² - i√1/2 (φ ₂ ² + φ ₂ ⁻²)	D ₇ (α) = $\begin{vmatrix} \epsilon & & & \\ & \epsilon^* & & \\ & & \epsilon & \\ & & & \epsilon^* \end{vmatrix}$
D ₃	Γ ₃ = E	a	2 -2	1 1 √ ² √ 1	√2/2 φ ₀ ² + i√1/2 (φ ₂ ² + φ ₂ ⁻²)	
D ₄	Γ ₄ = T	a	1 1 -1 0	3 -1 0 0 1	√2/2 (φ ₁ ² + φ ₁ ⁻²) - i√2/2 (φ ₁ ² - φ ₁ ⁻²)	
D ₅	Γ ₅ = E	a	1/2 1/2 -1/2	2 0 1 1 -√2	φ _{1/2}, φ_{1/2}⁻¹}	
D ₆	Γ ₆ = E	a	3/2 3/2 -1/2	2 0 √ √ ² √2	√2/2 (iφ _{3/2}^2 + φ_{3/2}^2) √2/2 (φ_{3/2}^2 - iφ_{3/2}^2)}}}}	
D ₇	Γ ₇ = E	a	3/2 -3/2 1/2	2 0 √ ² √ 1	√2/2 (φ _{3/2}^2 - iφ_{3/2}^2) √2/2 (iφ_{3/2}^2 + φ_{3/2}^2)}}}}	

O_h(T_h) = O(T) ⊗ C_i — m3m' = 4'32 ⊗ 1

ν = exp(2πi/3)
ε = exp(πi/4)
ω = exp(πi/3)

ЛИТЕРАТУРА

1. И.Н.Коцев, М.И.Аройо. Сообщения ОИЯИ, Р17-10967, Дубна, 1977.
2. G.Racah. Phys.Rev., 76, 1352 /1949/.
3. Е.Вигнер. Теория групп. ИЛ, М., 1961
4. И.Н.Коцев. К теории копредставлений магнитных групп. ИФЗ АН УССР, Харьков, 1972 (см.также И.Н.Коцев. Кристаллография, 19, 459 (1974)).
5. A.Aviran, D.B.Litvin. J.Math.Phys., 14, 1491 /1973/.
6. I.Sakata. J.Math.Phys., 15, 1710 /1974/..
7. P.Rudra. J.Math.Phys., 15, 2031 /1974/.
8. J.N.Kotzev, M.I.Aroyo. Clebsch-Gordan Coefficients for Magnetic Groups and Generalized Racah's Lemma. XI International Congress of Crystallography, Abstract OI.I.15 .
9. P.Rudra, M.K.Sikdar. J.Phys.C /Solid St.Phys./, 2, 1 /1976/.
10. И.Н.Коцев, М.И.Аройо. Сообщения ОИЯИ, Р17-11907, Дубна, 1978.
11. И.Н.Коцев, М.И.Аройо. Сообщения ОИЯИ, Р17-11906, Дубна, 1978 .
12. Д.А.Варшалович, А.Н.Москалев, В.К.Херсонский. Квантовая теория углового момента, "Наука", М., 1975.
13. G.F.Koster, J.O.Dimmock, R.G.Wheeler, H.Statz. Properties of the Thirty-two Point Groups. MIT-Press, Cambridge, Mass., 1963
14. В.Хейне. Теория групп в квантовой механике. ИЛ, М., 1963.

Рукопись поступила в издательский отдел
21 сентября 1976 года.