

Leszek Zienczonek

Współczynniki Clebscha-Gordana dla reprezentacji
nieprzywiedlnych grupy przestrzennej związków typu A-15

Praca wykonana
w Zakładzie Fizyki Teoretycznej
Instytutu Fizyki
Uniwersytetu Gdańskiego w Gdańsku
pod kierunkiem
Prof. dr hab. Macieja Suffczyńskiego
z Instytutu Fizyki PAN w Warszawie

Gdańsk 1978

Dziękuję

Panu Prof. dr hab. Janowi Fiutakowi za umożliwienie
napisania pracy,

Panu Prof. dr hab. Maciejowi Suffczyńskiemu za zasugerowa-
nie tematu pracy, cenne uwagi oraz umożliwienie korzy-
stania z wyników programów obliczających sumy iloczynów
reprezentacji grupy,

Panu mgr Herbertowi Kunertowi z Instytutu Fizyki Poli-
techniki Poznańskiej za dyskusję.

Spis treści

	str.
I. Wstęp	2
II. Grupy przestrzenne.	
1. Grupa przestrzenna.	5
2. Grupa wektora falowego.	5
3. Struktura A-15.	6
III. Reprezentacje grup przestrzennych jako reprezentacje indukowane.	
1. Reprezentacje indukowane.	8
2. Iloczyn Kroneckera reprezentacji indukowanych grup przestrzennych.	9
IV. Współczynniki Clebscha-Gordana dla reprezentacji grup przestrzennych.	
1. Reprezentacje indukowane grup przestrzennych a funkcje bazowe reprezentacji grup wektora falowego.	10
2. Współczynniki Clebscha-Gordana dla reprezentacji grup przestrzennych.	11
3. Struktura blokowa współczynników C-G.	13
4. Blok (1,1,1).	14
5. Blok $(\sigma, \sigma', \sigma'')$.	15
6. Współczynniki Clebscha-Gordana dla $R \otimes R \rightarrow GM$ oraz $X \otimes X \rightarrow GM \oplus M$.	18
V. Współczynniki Clebscha-Gordana dla $R \otimes R \rightarrow GM$ oraz $X \otimes X \rightarrow GM \oplus M$. Tablice.	25
VI. Zastosowania współczynników Clebscha-Gordana.	38
VII. Literatura.	43

I. Wstęp.

1. Struktura A-15 jest niezwykle ciekawą formą krystalizowania się substancji. Budowa związków o tej strukturze krystalicznej przedstawiona jest na rys. 1. Są one postaci A_3B . Atomy B (zakreskowane) tworzą sieć regularną (sześcienną) przestrzennie centrowaną, zaś A (niezakreskowane) są parami scentrowane na powierzchniach przednich komórki elementarnej tejże sieci.

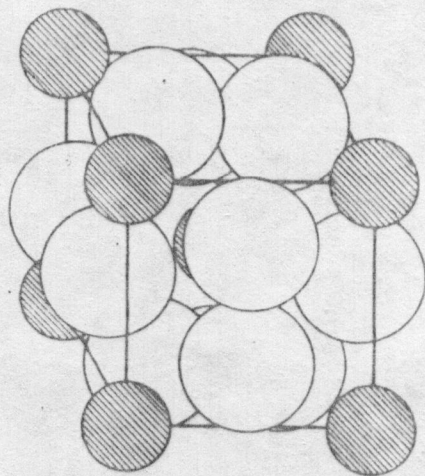


FIG. 1. — Atoms in the unit cell of the A_3B compounds having the β -wolfram structure. The A-atoms are represented by touching spheres centered on the faces of the simple cubic unit cell. The B-atom spheres occupy body-centered cubic positions, and are not drawn to their full radii.

Jest rzeczą interesującą, że związki o tej strukturze wykazują w przeważającej ilości nadprzewodnictwo [1]. Ponadto temperatury przejścia w ten stan są w wielu przypadkach wyższe niż 10°K (np. $\text{Nb}_3\text{Sn} - 18,05^\circ\text{K}$). Dla nadprzewodników o wysokiej temperaturze przejścia A jest metalem przejściowym (zwykle V lub Vb), a B jest zwykle (ale nie zawsze) nieprzejściowym metalem (np. Si, Ge, Sn, Al, Ga).

Oprócz najwyższych temperatur przejścia w stan nadprzewodzący substancje typu A-15 posiadają liczne anomalie w swoich elektrycznych, magnetycznych, sprężystych i strukturalnych własnościach (strukturalne przejścia fazowe od postaci kubicznej do tetragonalnej przy niskich temperaturach). Wiele teoretycznych rozważań i prób podsumowań doświadczalnych wyników można znaleźć w pracach [2, 3]. Strukturalną niestabilność i nadprzewodnictwo w związkach typu A-15 omówiono w [4].

Ostatnio teoretyczny model nadprzewodnictwa i przejść strukturalnych podali Bilbro i McMillan [5]. Bhatt i McMillan [6] sformułowali teorię Landaua dla strukturalnych przejść fazowych w związkach typu A-15. Natomiast Jarić i Birman [7] rozważyli problem przejść fazowych używając teorii symetrii. Z starszych prac dotyczących zmian symetrii spowodowanych przejściami fazowymi drugiego rodzaju oraz niestabilnością sieci krystalicznej na uwagę zasługują artykuły Birmana [8a, 8b]. Problem

ten dyskutowany jest też w pracy [8c].

Szereg innych szczegółowych rozważań można znaleźć w pracach [9-13].

2. Bardzo ważnym narzędziem w teoretycznych badaniach struktur kryształicznych jest teoria grup. Widoczne to jest tam, gdzie mamy do czynienia z konstruowaniem stanów energetycznych oraz wyznaczaniem energii cząstek lub quasicząstek w kryształach. Szczególnie interesują nas wartości energii w punktach o wysokiej symetrii w pierwszej strefie Brillouin'a.

Zastosowanie teorii grup pozwala na określenie stanów energetycznych elektronów jako funkcji bazowych reprezentacji grupy symetrii kryształu, względem której hamiltonian jest niezmienniczy, umożliwiając tym samym ich klasyfikację, oraz daje dokładne informacje o krotności ich zdegenerowania.

Wprowadzając pojęcie szeregu Clebscha-Gordana możemy z łatwością wyznaczyć reguły wyboru dla przejść z jednego do drugiego stanu elektronowego.

Natomiast współczynniki Clebscha-Gordana mogą w istotny sposób ułatwić obliczanie elementów macierzowych hamiltonianu. Ponadto okazuje się, że są one ściśle związane z elementami tensora rozpraszania. Akty rozpraszania muszą oczywiście zachodzić w polu krystalicznym.

Bardziej szczegółowe rozważania na temat zastosowań współczynników C - G zawarte są w rozdziale VI.

Powyższe możliwości skłaniają do zajęcia się problemem wyznaczania współczynników C-G i opracowywania możliwie najprostszycy metod obliczeniowych.

Współczynniki C-G można obliczać korzystając bezpośrednio z definicji ([14] §5.7) lub dokonując pewnych, prostych wyprowadzeń z odpowiednich wzorów ([15] §18, [16] punkt 2). Ciekawą metodę zaprezentował ostatnio Sakata [18].

Jednakże zwróćmy uwagę na to, że powyższe metody wymagają znajomości reprezentacji pełnej grupy. Lecz problem wyznaczenia wszystkich nieredukowalnych reprezentacji całej grupy nie jest zagadnieniem łatwym. Ale w pewnych przypadkach (warunek: istnienie dzielnika normalnego o skończonym indeksie) - vide tw. na str. 38 w pracy [22] - można stosować

wać tzw. reprezentacje indukowane [20-22] (otrzymywanie reprezentacji całej grupy z reprezentacji jej podgrupy tzw. reprezentacji małej grupy lub małej reprezentacji). Wyliczone explicite w ten sposób reprezentacje stosuje Sakata [18].

Natomiast w pracach Gard [19], Birmana [15] §60, Berenson i innych [16, 17] wyznaczanie współczynników C-G sprowadzono do obliczeń na poziomie tzw. reprezentacji rzutowych grup punktowych podgrup grupy przestrzennej, wykorzystując również pojęcie reprezentacji indukowanej, ale bez konieczności znajomości jej jawnej postaci.

W niniejszej pracy została przedstawiona powyższa procedura dostosowana do zwykłych, dozwolonych reprezentacji podgrup grupy przestrzennej oraz zostały policzone współczynniki Clebscha-Gordana dla O_h^3 (grupy przestrzennej związków o strukturze A-15), dla $R \otimes R \rightarrow GM$ oraz $X \otimes X \rightarrow GM \otimes M$.

W pracy zostały użyte reprezentacje w/g Millera i Lova [23].

II. Grupy przestrzenne.

1. Grupa przestrzenna.

Kryształem nazywamy układ atomów o następujących własnościach

- i) istnieje taka skończona liczba dodatnia, że odległość między dowolnymi dwoma atomami jest nie mniejsza niż ta liczba,
- ii) jest on niezmienniczy względem grupy sieciowej T

$$T = \{ \vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 ; n_1, n_2, n_3 \in Z \},$$

gdzie $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ są trzema liniowo niezależnymi wektorami w 3-wymiarowej przestrzeni euklidesowej R_3 , a Z oznacza zbiór liczb całkowitych.

Wektory $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ nazywają się wektorami bazowymi sieci T , a dowolny element $\vec{R} \in T$ - jej wektorem prymitywnym (translacją prymitywną).

Grupą punktową nazywamy skończoną podgrupę 3-wymiarowej grupy ortogonalnej $O(3)$, jeżeli transformuje ona pewną sieć w tę samą sieć.

Grupą przestrzenną kryształu nazywamy maksymalną grupę symetrii tego kryształu

$$G = \{ \{ \varphi | \vec{t} + \vec{R} \} ; \vec{R} \in T, \varphi \in P, \vec{t}(\varepsilon) = 0 \}, \quad (II.1.1)$$

$$\{ \varphi | \vec{t} \} \vec{x} = \varphi \vec{x} + \vec{t}, \quad \vec{x} \in R_3, \quad \vec{t} = \vec{t} + \vec{R},$$

gdzie T - pewna sieć, P - grupa punktowa tej sieci, ε - element tożsamościowy P , a \vec{t} - liniowa kombinacja wektorów sieciowych o współczynnikach wymiernych. Wektor \vec{t} nazywamy nieprymitywną (ułamkową) translacją. W ogólności jest on różny dla każdego $\varphi \in P$, co zaznacza się używając stosownych wskaźników.

Grupę przestrzenną nazywamy symorficzną, jeżeli \vec{t} jest wektorem zerowym w R_3 dla każdego $\varphi \in P$.

2. Grupa wektora falowego.

Grupą przestrzenną wektora falowego (oznaczaną przez $G(\vec{k})$) nazywamy zbiór tych elementów $\{ \varphi | \vec{t} \}$ grupy przestrzennej G , dla których $\varphi \in P$ spełnia

$$\varphi \vec{k} = \vec{k} + 2\pi \vec{b}, \quad (II.2.1)$$

gdzie \vec{b} - dowolny wektor sieci odwrotnej do T , czyli wektory $\varphi \vec{k}$ i \vec{k} są równoważne $\varphi \vec{k} \cong \vec{k}$.

Grupę przestrzenną możemy rozłożyć na sumę prostą warstw względem grupy przestrzennej danego wektora falowego

$$G = \sum_s \{ \varphi_\sigma | \vec{t}_\sigma \} G(\vec{k}), \quad (\text{II.2.2})$$

gdzie $\{ \varphi_\sigma | \vec{t}_\sigma \} \in G$, $\vec{t}_\sigma = a_L \vec{e}_\sigma$ - translacja ułamkowa odpowiadająca elementowi $\varphi_\sigma \in P$, a s - indeks grupy $G(\vec{k})$ w grupie G .

3. Struktura A-15.

Kryształy o strukturze A-15 posiadają niesymorficzną grupę przestrzenną O_h^3 ($Pn\bar{3}m$).

W tab. 1 przedstawione zostały elementy faktorgrupy O_h^3/T ; wykorzystano tutaj oznaczenia elementów grupy punktowej O_h , które są pokazane w tab. 2 wziętej z [23].

Pierwsza strefa Brillouin'a dla O_h^3 pokazana jest na rys. 2.

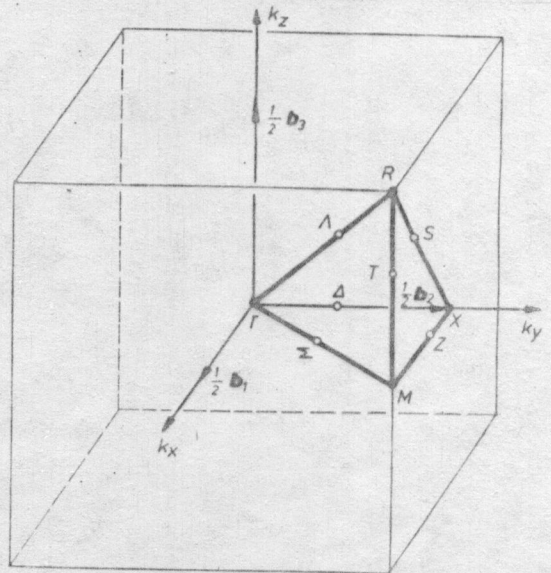


FIG. 2. — The first Brillouin zone and the representation domain indicated by heavy lines for the space group O_h^3 . The basic vectors of the reciprocal lattice are b_1, b_2, b_3 .

Tabela 1

Elementy O_h^3/T			
$\{1 0\}$	$\{13 \vec{t}\}$	$\{25 0\}$	$\{37 \vec{t}\}$
$\{2 0\}$	$\{14 \vec{t}\}$	$\{26 0\}$	$\{38 \vec{t}\}$
$\{3 0\}$	$\{15 \vec{t}\}$	$\{27 0\}$	$\{39 \vec{t}\}$
$\{4 0\}$	$\{16 \vec{t}\}$	$\{28 0\}$	$\{40 \vec{t}\}$
$\{5 0\}$	$\{17 \vec{t}\}$	$\{29 0\}$	$\{41 \vec{t}\}$
$\{6 0\}$	$\{18 \vec{t}\}$	$\{30 0\}$	$\{42 \vec{t}\}$
$\{7 0\}$	$\{19 \vec{t}\}$	$\{31 0\}$	$\{43 \vec{t}\}$
$\{8 0\}$	$\{20 \vec{t}\}$	$\{32 0\}$	$\{44 \vec{t}\}$
$\{9 0\}$	$\{21 \vec{t}\}$	$\{33 0\}$	$\{45 \vec{t}\}$
$\{10 0\}$	$\{22 \vec{t}\}$	$\{34 0\}$	$\{46 \vec{t}\}$
$\{11 0\}$	$\{23 \vec{t}\}$	$\{35 0\}$	$\{47 \vec{t}\}$
$\{12 0\}$	$\{24 \vec{t}\}$	$\{36 0\}$	$\{48 \vec{t}\}$

1 - 48 - oznaczenia elementów grupy O_h ,
 $\vec{t} = (1,1,1) \frac{a_L}{2}$ - translacja ułamkowa sieci,
 a_L - stała sieci.

Tabela 2

Systems other than Rhombohedral and Hexagonal

Operator Number	Symbol	Effect on x, y, z	Direction Cosines of Rotation Axis and Angle of Rotation	Operator Number	Symbol	Effect on x, y, z
1	<i>E</i>	x, y, z	0°	25	<i>I</i>	$-x, -y, -z$
2	<i>C2X</i>	$x, -y, -z$	$1, 0, 0; 180^\circ$	26	<i>SIGV</i>	$-x, y, z$
3	<i>C2Y</i>	$-x, y, -z$	$0, 1, 0; 180^\circ$	27		$x, -y, z$
4	<i>C2</i>	$-x, -y, z$	$0, 0, 1; 180^\circ$	28	<i>SIGH</i>	$x, y, -z$
5		y, z, x	$\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}; 240^\circ$	29		$-y, -z, -x$
6		$y, -z, -x$	$\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, -\frac{1}{\sqrt{3}}; 120^\circ$	30		$-y, z, x$
7		$-y, z, -x$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}; 120^\circ$	31		$y, -z, x$
8		$-y, -z, x$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, -\frac{1}{\sqrt{3}}; 240^\circ$	32		$y, z, -x$
9	<i>C3XYZ</i>	z, x, y	$\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}; 120^\circ$	33		$-z, -x, -y$
10		$z, -x, -y$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, -\frac{1}{\sqrt{3}}; 120^\circ$	34		$-z, x, y$
11		$-z, x, -y$	$\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, -\frac{1}{\sqrt{3}}; 240^\circ$	35		$z, -x, y$
12		$-z, -x, y$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}; 240^\circ$	36		$z, x, -y$
13		$-y, -x, -z$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0; 180^\circ$	37	<i>SIGD</i>	y, x, z
14	<i>C4</i>	$-y, x, z$	$0, 0, 1; 90^\circ$	38	<i>S4</i>	$y, -x, -z$
15		$y, -x, z$	$0, 0, 1; 270^\circ$	39		$-y, x, -z$
16	<i>C2D</i>	$y, x, -z$	$\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0; 180^\circ$	40		$-y, -x, z$
17		$-x, -z, -y$	$0, \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}; 180^\circ$	41		x, z, y
18		$-x, z, y$	$0, \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; 180^\circ$	42		$x, -z, -y$
19		$x, -z, y$	$1, 0, 0; 90^\circ$	43		$-x, z, -y$
20		$x, z, -y$	$1, 0, 0; 270^\circ$	44		$-x, -z, y$
21		$-z, -y, -x$	$\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, -\frac{1}{\sqrt{2}}; 180^\circ$	45		z, y, x
22		$-z, y, x$	$0, 1, 0; 270^\circ$	46		$z, -y, -x$
23		$z, -y, x$	$\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, \frac{1}{\sqrt{2}}; 180^\circ$	47		$-z, y, -x$
24		$z, y, -x$	$0, 1, 0; 90^\circ$	48		$-z, -y, x$

III. Reprezentacje grup przestrzennych jako reprezentacje indukowane.

1. Reprezentacje indukowane.

Okazuje się, że grupa translacji T jest dzielnikiem normalnym o skończonym indeksie grupy przestrzennej G , która jest grupą dyskretną, tzn. nieskończoną, ale o przeliczalnym rzędzie. Możemy więc wykorzystać pojęcie reprezentacji indukowanej (np. [22] str. 35) i wspomniane we wstępie twierdzenie ([22] str. 38) w celu otrzymania wszystkich nieredukowalnych reprezentacji grupy G z nieredukowalnych reprezentacji grup wektorów falowych $G(\vec{k})$.

Nieredukowalne reprezentacje grupy przestrzennej wektora falowego $G(\vec{k})$ będziemy oznaczali przez $d^{(\vec{k})}(l)$ a indukowane z nich reprezentacje grupy przestrzennej G przez $D^{(\vec{k})}(l)$ (wskaznik l numeruje różne nierównoważne reprezentacje grupy wektora falowego).

Niech

$$G = G(\vec{k}) + \{\varphi_2 | \vec{\tau}_2\} G(\vec{k}) + \dots + \{\varphi_\sigma | \vec{\tau}_\sigma\} G(\vec{k}) + \dots \quad (\text{III.1.1})$$

$$\dots + \{\varphi_{\bar{\sigma}} | \vec{\tau}_{\bar{\sigma}}\} G(\vec{k}) + \dots + \{\varphi_s | \vec{\tau}_s\} G(\vec{k})$$

Wtedy na elementy macierzowe reprezentacji indukowanej otrzymujemy wyrażenie

$$D^{(\vec{k})}(l)(g)_{\alpha\bar{\alpha}} = d^{(\vec{k})}(l) \left(\{\varphi_\sigma | \vec{\tau}_\sigma\}^{-1} g \{\varphi_{\bar{\sigma}} | \vec{\tau}_{\bar{\sigma}}\} \right)_{\alpha\bar{\alpha}} \delta_{\sigma\bar{\sigma}}, \quad (\text{III.1.2a})$$

$$\text{gdzie } g = \{\varphi | \vec{\tau}\}, \quad \delta_{\sigma\bar{\sigma}} = \begin{cases} 1, & \text{gdzy } \{\varphi_\sigma | \vec{\tau}_\sigma\}^{-1} g \{\varphi_{\bar{\sigma}} | \vec{\tau}_{\bar{\sigma}}\} \in G(\vec{k}) \\ 0, & \text{w przeciwnym razie,} \end{cases} \quad (\text{III.1.2b})$$

oraz $\sigma, \bar{\sigma} = 1, \dots, s$, gdzie s - indeks $G(\vec{k})$ w G ; $\alpha, \bar{\alpha} = 1, \dots, n_{\vec{k}l}$, gdzie $n_{\vec{k}l}$ - wymiar l -tej reprezentacji grupy $G(\vec{k})$.

Wymiar reprezentacji indukowanej grupy G równa się iloczynowi wymiaru reprezentacji grupy $G(\vec{k})$ i indeksu $G(\vec{k})$ w G .

Widzimy więc, że wszystkie nieredukowalne reprezentacje grupy przestrzennej G są numerowane wektorem falowym \vec{k} i numerem reprezentacji grupy wektora falowego $G(\vec{k})$.

Uwaga. Zauważmy, że dla danego $g \in G$, dla każdego wskaznika $\bar{\sigma}$ istnieje tylko jedna wartość wskaznika σ taka, że $\{\varphi_\sigma | \vec{\tau}_\sigma\}^{-1} g \{\varphi_{\bar{\sigma}} | \vec{\tau}_{\bar{\sigma}}\} \in G(\vec{k})$.

Widzimy więc, że macierz $D^{(\vec{k})}(l)$ składa się z s^2 bloków oraz w każdym

wierszu i każdej kolumnie istnieje tylko jeden nieznikający blok.

Zdefiniujemy teraz promienie tzw. gwiazdy wektora falowego (oznaczanej przez \vec{k}) następująco

$$\vec{k}_\sigma \equiv \varphi_\sigma \vec{k}, \quad \sigma = 1, \dots, s. \quad (\text{III.1.3})$$

Lemat. Jeżeli $h \in G(\vec{k})$,
to $h_\sigma \in G(\vec{k}_\sigma)$,
gdzie \vec{k}_σ jest zdefiniowane przez (III.1.3).

D. Wystarczy sprawdzić (II.2.1).

$$\varphi_\sigma \varphi_\sigma^{-1} \vec{k}_\sigma \equiv \varphi_\sigma \varphi_\sigma^{-1} \varphi_\sigma \vec{k} \equiv \varphi_\sigma \varphi_\sigma \vec{k} \equiv \varphi_\sigma \vec{k} \equiv \vec{k}_\sigma. \quad \text{c.n.d.}$$

Położmy w (III.1.2a) $\sigma = \bar{\sigma}$. Otrzymujemy wtedy dla nieznikającego

bloku
$$D^{(\vec{k})}(\varrho)_{\sigma\sigma} = d^{(\vec{k})}(\{\varphi_\sigma | \vec{\tau}_\sigma\}^{-1} \varrho \{\varphi_\sigma | \vec{\tau}_\sigma\}) \quad (\text{III.1.5})$$

Jeżeli w szczególności $\varrho \in G(\vec{k}_\sigma)$, czyli $\varrho = h_\sigma$, to (III.1.5) stanowi wyrażenie na reprezentację grupy wektora falowego $G(\vec{k}_\sigma)$

$$D^{(\vec{k})}(\varrho)_{\sigma\sigma} = d^{(\vec{k}_\sigma)}(h_\sigma). \quad (\text{III.1.6})$$

Podstawiając $\varrho = h_\sigma$ do (III.1.5), korzystając z (III.1.4) i porównując z (III.1.6) otrzymujemy

$$d^{(\vec{k}_\sigma)}(h_\sigma) = d^{(\vec{k})}(\{\varphi_\sigma | \vec{\tau}_\sigma\}^{-1} h_\sigma \{\varphi_\sigma | \vec{\tau}_\sigma\}), \quad (\text{III.1.7})$$

gdzie $h_\sigma \in G(\vec{k}_\sigma); \quad \vec{k}_\sigma \equiv \varphi_\sigma \vec{k}.$

2. Iloczyn Kroneckera reprezentacji indukowanych grup przestrzennych

Ogólna definicja iloczynu zewnętrznego (inne nazwy: iloczyn tensorowy, iloczyn Kroneckera) reprezentacji jest znana ([14] §5.1).

W zastosowaniu do grup przestrzennych można go zapisać

$$\left[D^{(\vec{k})}(\varrho) \otimes D^{(\vec{k}')}(\varrho) \right]_{\sigma\alpha, \sigma'\alpha'} \stackrel{\text{def}}{=} D^{(\vec{k})}(\varrho)_{\sigma\alpha, \bar{\sigma}\bar{\alpha}} \cdot D^{(\vec{k}')}(\varrho)_{\sigma'\alpha', \bar{\sigma}'\bar{\alpha}'}. \quad (\text{III.2.1})$$

W ogólności iloczyn Kroneckera reprezentacji nieprzywiedlnych może być przywiedlny do sumy prostej reprezentacji nieprzywiedlnych

$$D^{(\vec{k})} \otimes D^{(\vec{k}')} = \sum_{\vec{k}''} \sum_{l''} c_{\vec{k} \vec{k}' \vec{k}''} D^{(\vec{k}'')}. \quad (\text{III.2.2})$$

Wyrażenie to nazywamy szeregiem Clebscha-Gordana. Współczynniki $c_{\vec{k} \vec{k}' \vec{k}''}$ określają częstość występowania $D^{(\vec{k}'')}$ w iloczynie Kroneckera $D^{(\vec{k})} \otimes D^{(\vec{k}')}.$

IV. Współczynniki Clebscha-Gordana dla reprezentacji grup przestrzennych.

1. Reprezentacje indukowane grup przestrzennych a funkcje bazowe reprezentacji grup wektora falowego.

Rozważmy rozkład grupy przestrzennej G na warstwy względem grupy wektora falowego $G(\vec{k})$

$$G = G(\vec{k}) + \{\varphi_2 | \vec{\tau}_2\} G(\vec{k}) + \dots + \{\varphi_s | \vec{\tau}_s\} G(\vec{k}) + \dots + \{\varphi_{\bar{s}} | \vec{\tau}_{\bar{s}}\} G(\vec{k}) + \dots + \{\varphi_s | \vec{\tau}_s\} G(\vec{k}), \quad (IV.1.1)$$

gdzie s jest indeksem $G(\vec{k})$ w G .

Niech układ funkcji $\psi_\alpha^{(\vec{k})(l)}$ ($\alpha = 1, \dots, n_{\vec{k}l}$) będzie bazą l -tej reprezentacji $G(\vec{k})$ ($n_{\vec{k}l}$ - wymiar reprezentacji) tzn.

$$P_{\{\varphi_h | \vec{\tau}_h\}} \psi_\alpha^{(\vec{k})(l)} = \sum_{\bar{\alpha}=1}^{n_{\vec{k}l}} \psi_{\bar{\alpha}}^{(\vec{k})(l)} d^{(\vec{k})(l)}(\{\varphi_h | \vec{\tau}_h\})_{\bar{\alpha}\alpha}, \quad (IV.1.2)$$

gdzie $\{\varphi_h | \vec{\tau}_h\} \in G(\vec{k})$, a działanie operatora P_q (q - dowolna transformacja współrzędnych przestrzennych) określone jest następująco

$$P_q \psi(\vec{r}) = \psi(q^{-1}\vec{r}). \quad (IV.1.3)$$

Zachodzi oczywiście $P_q P_{q^{-1}} = P_{q q^{-1}} = I$, a w szczególności $P_q P_{q^{-1}} = I$.

Zdefiniujmy nowe układy funkcji $\psi_{\sigma\alpha}^{(\vec{k})(l)}$ ($\sigma = 1, \dots, s$) dla każdej reprezentanty warstwowej w (IV.1.1)

$$\psi_{\sigma\alpha}^{(\vec{k})(l)} \stackrel{df}{=} P_{\{\varphi_\sigma | \vec{\tau}_\sigma\}} \psi_\alpha^{(\vec{k})(l)}. \quad (IV.1.4)$$

Rozważmy dla $g = \{\varphi | \vec{\tau}\} \in G$ wyrażenie

$$\begin{aligned} P_{\{\varphi | \vec{\tau}\}} \psi_{\sigma\alpha}^{(\vec{k})(l)} &= P_{\{\varphi | \vec{\tau}\}} P_{\{\varphi_\sigma | \vec{\tau}_\sigma\}} \psi_\alpha^{(\vec{k})(l)} \\ &= \sum_{\bar{\sigma}=1}^s \delta_{\bar{\sigma}\{\varphi | \vec{\tau}\}\sigma} P_{\{\varphi_{\bar{\sigma}} | \vec{\tau}_{\bar{\sigma}}\}} P_{\{\varphi_\sigma | \vec{\tau}_\sigma\}}^{-1} P_{\{\varphi | \vec{\tau}\}} P_{\{\varphi_\sigma | \vec{\tau}_\sigma\}} \psi_\alpha^{(\vec{k})(l)} \\ &= \sum_{\bar{\sigma}=1}^s \delta_{\bar{\sigma}\{\varphi | \vec{\tau}\}\sigma} P_{\{\varphi_{\bar{\sigma}} | \vec{\tau}_{\bar{\sigma}}\}} P_{\{\varphi_\sigma | \vec{\tau}_\sigma\}}^{-1} \{\varphi | \vec{\tau}\} \{\varphi_\sigma | \vec{\tau}_\sigma\} \psi_\alpha^{(\vec{k})(l)}. \end{aligned}$$

Skorzystaliśmy tutaj z (III.1.2b) i uwagi na str. 8. Dla $\bar{\sigma}$ określonego przez $\delta_{\bar{\sigma}\{\varphi | \vec{\tau}\}\sigma}$ zachodzi $\{\varphi_{\bar{\sigma}} | \vec{\tau}_{\bar{\sigma}}\}^{-1} \{\varphi | \vec{\tau}\} \{\varphi_\sigma | \vec{\tau}_\sigma\} \in G(\vec{k})$ i korzystając

z (IV.1.2) i (IV.1.4) mamy

$$\begin{aligned} P_{\{\varphi | \vec{\tau}\}} \psi_{\sigma\alpha}^{(\vec{k})(l)} &= \sum_{\bar{\sigma}=1}^s \delta_{\bar{\sigma}\{\varphi | \vec{\tau}\}\sigma} P_{\{\varphi_{\bar{\sigma}} | \vec{\tau}_{\bar{\sigma}}\}} \sum_{\bar{\alpha}=1}^{n_{\vec{k}l}} \psi_{\bar{\alpha}}^{(\vec{k})(l)} d^{(\vec{k})(l)}(\{\varphi_{\bar{\sigma}} | \vec{\tau}_{\bar{\sigma}}\}^{-1} \{\varphi | \vec{\tau}\} \{\varphi_\sigma | \vec{\tau}_\sigma\})_{\bar{\alpha}\alpha} \\ &= \sum_{\bar{\sigma}=1}^s \sum_{\bar{\alpha}=1}^{n_{\vec{k}l}} \psi_{\bar{\sigma}\bar{\alpha}}^{(\vec{k})(l)} d^{(\vec{k})(l)}(\{\varphi_{\bar{\sigma}} | \vec{\tau}_{\bar{\sigma}}\}^{-1} \{\varphi | \vec{\tau}\} \{\varphi_\sigma | \vec{\tau}_\sigma\})_{\bar{\alpha}\alpha} \delta_{\bar{\sigma}\{\varphi | \vec{\tau}\}\sigma}. \end{aligned}$$

Czyli układ funkcji $\psi_{\delta\alpha}^{(\vec{k})(l)}$ ($\delta=1, \dots, s$; $\alpha=1, \dots, n_{\vec{k}l}$) stanowi bazę reprezentacji indukowanej $D^{(\vec{k})(l)}$ grupy G

$$D^{(\vec{k})(l)}(\varphi|\vec{t})_{\delta\bar{\alpha}, \delta\alpha} = d^{(\vec{k})(l)}(\{\varphi_{\delta}|\vec{t}_{\delta}\}^{-1}\{\varphi|\vec{t}\}\{\varphi_{\delta}|\vec{t}_{\delta}\})_{\delta\bar{\alpha}, \delta\alpha} \cdot \delta_{\delta\bar{\alpha}, \delta\alpha} \quad (IV.1.5)$$

(por. (III.1.2a)) tzn.

$$P_{\{\varphi|\vec{t}\}} \psi_{\delta\alpha}^{(\vec{k})(l)} = \sum_{\delta=1}^s \sum_{\bar{\alpha}=1}^{n_{\vec{k}l}} \psi_{\delta\bar{\alpha}}^{(\vec{k})(l)} D^{(\vec{k})(l)}(\{\varphi|\vec{t}\})_{\delta\bar{\alpha}, \delta\alpha} \quad (IV.1.6)$$

2. Współczynniki Clebscha-Gordana dla reprezentacji grup przestrzennych.

Określenie współczynników Clebscha-Gordana dla grup skończonych jest znane ([14] §5.7). Zastosujmy je do grupy przestrzennej Δ .

Δ) Zwróćmy uwagę na fakt, że przenosimy tutaj pewne wyniki teorii grup skończonych do teorii grup przestrzennych, które są przecież z definicji nieskończone. Ale zauważmy, że rząd grupy przestrzennej jest przeliczalny i w związku z tym możemy go używać jako pewnego, dowolnego parametru, który akurat w naszych zastosowaniach w trakcie obliczeń ulega redukcji.

Poza tym istnieje drugie, fizyczne, wytłumaczenie takiego postępowania. Wiemy mianowicie, że indeks grupy translacji T w grupie przestrzennej G jest skończony i dlatego też przyczynek do nieskończoności rzędu grupy G daje ta pierwsza. Wprowadzając tzw. warunki brzegowe Borna-von-Karmana można zrobić grupę przestrzenną kryształu grupą skończoną. W tym celu przyjmuje się, że

$$\{\varepsilon|\vec{a}_i\}^N = \{\varepsilon|0\}$$

gdzie \vec{a}_i ($i=1, 2, 3$) - wektory bazowe sieci oraz N jest dowolnie dużą liczbą naturalną. To oznacza, że nieskończony kryształ został podzielony na dowolnie duże, ale skończone obszary. W każdym z tych podzielonych obszarów w odpowiadających sobie punktach panują dokładnie te same fizyczne warunki. W ten sposób złożenie translacji $\{\varepsilon|N\vec{a}_i\}$ ($i=1, 2, 3$) i operacja identyczności $\{\varepsilon|0\}$ są nierozróżnialne. Powstały w ten sposób obszar nazywa się często obszarem podstawowym. Jest on dowolnie wielki, tak że różnice w porównaniu z nieskończonym kryształem bez brzegowych warunków periodyczności są zanedbywalne. Pewne matematyczne wielkości (widać to będzie w niniejszej pracy) i co za tym idzie również fizyczne mogą nie zależeć od wielkości tego obszaru podstawowego określonego przez rząd grupy translacji równy N^3 .

Rozważmy rozkład iloczynu Kroneckera reprezentacji na sumę prostą

$$D^{(\vec{k})(l)} \otimes D^{(\vec{k}')(l')} = \sum_{\vec{k}''} \sum_{l''} c_{\vec{k} \vec{k}' \vec{k}''} D^{(\vec{k}'')(l'')} \quad (IV.2.1)$$

Niech układy funkcji

$$\psi_{\delta\alpha}^{(\vec{k})(l)} \quad ; \quad \delta=1, \dots, s \quad ; \quad \alpha=1, \dots, n_{\vec{k}l} ;$$

$$\psi_{\delta'\alpha'}^{(\vec{k}')(l')} \quad ; \quad \delta'=1, \dots, s' \quad ; \quad \alpha'=1, \dots, n_{\vec{k}'l'} ;$$

$$\Psi_{\delta''\alpha''}^{(\vec{k}'')(l'')} ; \delta'' = 1, \dots, s'' ; \alpha'' = 1, \dots, n_{\vec{k}''l''} ;$$

będą bazami reprezentacji grupy przestrzennej G indukowanych z reprezentacji grup wektora falowego odpowiednio $G(\vec{k})$, $G(\vec{k}')$, $G(\vec{k}'')$; s, s', s'' - indeksy $G(\vec{k})$, $G(\vec{k}')$, $G(\vec{k}'')$ w G ; $n_{\vec{k}l}, n_{\vec{k}'l'}, n_{\vec{k}''l''}$ wymiary reprezentacji $G(\vec{k})$, $G(\vec{k}')$, $G(\vec{k}'')$.

Współczynniki Clebscha-Gordana stanowią transformację unitarną między bazą iloczynową funkcji $\Psi_{\delta\alpha}^{(\vec{k})(l)}$ $\Psi_{\delta'\alpha'}^{(\vec{k}')(l')}$ a bazą $\Psi_{\delta''\alpha''}^{(\vec{k}'')(l'')}$

$$\Psi_{\delta''\alpha''}^{(\vec{k}'')(l'')} = \sum_{\delta\alpha} \sum_{\delta'\alpha'} \left(\begin{matrix} \vec{k} & l & \vec{k}' & l' \\ \delta & \alpha & \delta' & \alpha' \end{matrix} \middle| \begin{matrix} \vec{k}'' & l'' \\ \delta'' & \alpha'' \end{matrix} \right) \Psi_{\delta\alpha}^{(\vec{k})(l)} \Psi_{\delta'\alpha'}^{(\vec{k}')(l')}$$

$$g = c \begin{matrix} \vec{k} & \vec{k}' & \vec{k}'' \\ l & l' & l'' \end{matrix} \quad (IV.2.2)$$

Współczynniki C-G zapisujemy często w postaci

$$U_{\delta\alpha, \delta'\alpha', \delta''\alpha''}^g \equiv U_{\delta\alpha, \delta'\alpha', (\vec{k}'')(l'')}^{(\vec{k}l \otimes \vec{k}'l')} \delta''\alpha'' \equiv \left(\begin{matrix} \vec{k} & l & \vec{k}' & l' \\ \delta & \alpha & \delta' & \alpha' \end{matrix} \middle| \begin{matrix} \vec{k}'' & l'' \\ \delta'' & \alpha'' \end{matrix} \right) \quad (IV.2.3)$$

Wymiar macierzy współczynników C-G równa się iloczynowi wymiarów reprezentacji grup $G(\vec{k})$, $G(\vec{k}')$ razy iloczyn indeksów tych grup w grupie przestrzennej G .

Istotną własnością współczynników C-G jest fakt, że sprowadzają one iloczyn Kroneckera $D^{(\vec{k})(l)} \otimes D^{(\vec{k}')(l')}$ do sumy prostej reprezentacji $D^{(\vec{k}'')(l'')}$ co, zgodnie z równaniem (5.115) z pracy [14], można zapisać w postaci

$$\sum_{\delta\alpha, \delta'\alpha'} \sum_{\beta\beta', \beta''\beta''} \left(\begin{matrix} \vec{k} & l & \vec{k}' & l' \\ \delta & \alpha & \delta' & \alpha' \end{matrix} \middle| \begin{matrix} \vec{k}'' & l'' \\ \beta'' & \beta'' \end{matrix} \right)^* D_{\delta\alpha, \beta\beta}^{(\vec{k})(l)} D_{\delta'\alpha', \beta'\beta'}^{(\vec{k}')(l')} \left(\begin{matrix} \vec{k} & l & \vec{k}' & l' \\ \beta & \beta' & \beta' & \beta' \end{matrix} \middle| \begin{matrix} \vec{k}'' & l'' \\ \beta'' & \beta'' \end{matrix} \right) =$$

$$= D_{\beta''\beta'', \beta''\beta''}^{(\vec{k}'')(l'')} \delta_{\vec{k} \vec{k}''} \delta_{l'' l''} \delta_{\beta' \beta'} \quad (IV.2.4)$$

Tw. Jeżeli bazy reprezentacji występujących w szeregu Clebscha-Gordana poddamy transformacjom podobieństwa odpowiednio A, A', A'' , to macierz współczynników Clebscha-Gordana U ulega następującemu przekształceniu

$$V = (A \otimes A') U A''^{-1},$$

gdzie V - macierz współczynników C-G po transformacjach baz.

Sprawdzenie tej własności można znaleźć w pracy [15] §18γ.

3. Struktura blokowa współczynników C-G.

Przekształcając odpowiednio równanie (IV.2.4) i korzystając z relacji ortogonalności dla reprezentacji (oczywiście pamiętając o tym, że rząd grupy przestrzennej traktujemy tylko jako formalny parametr)

otrzymujemy

$$\sum_{\mathcal{G}} U_{\delta\alpha\delta'\alpha',\delta''\alpha''}^{(\vec{k}^l \otimes \vec{k}^{l'})} U_{\delta\bar{\alpha}\delta'\bar{\alpha}',\delta''\bar{\alpha}''}^{(\vec{k}^l \otimes \vec{k}^{l'})*} = \frac{N_{\vec{k}^l l}}{|G|} \sum_{g \in G} D^{(\vec{k}^l)(l)}(g)_{\delta\alpha,\delta\bar{\alpha}} D^{(\vec{k}^{l'})}(g)_{\delta'\alpha',\delta'\bar{\alpha}'} D^{(\vec{k}^{l''})(l'')*}(g)_{\delta''\alpha'',\delta''\bar{\alpha}''} \quad (\text{IV.3.1})$$

gdzie $N_{\vec{k}^l l}$ - wymiar reprezentacji $D^{(\vec{k}^l)(l)}$, $|G|$ - rząd grupy przestrzennej G .

Zauważmy, że zgodnie z (II.1.1) zachodzi

$$g = \{\varphi | \vec{r}\} = \{\varphi | \vec{r} + \vec{R}\} = \{\varepsilon | \vec{R}\} \{\varphi | \vec{r}\}. \text{ Wtedy}$$

$$\begin{aligned} D^{(\vec{k}^l)(l)}(g)_{\delta\alpha,\delta\bar{\alpha}} &= \sum_{\mathcal{S}\beta} D^{(\vec{k}^l)(l)}(\{\varepsilon | \vec{R}\})_{\delta\alpha,\mathcal{S}\beta} D^{(\vec{k}^l)(l)}(\{\varphi | \vec{r}\})_{\mathcal{S}\beta,\bar{\alpha}} \\ &= \sum_{\mathcal{S}\beta} d^{(\vec{k}^l)(l)}(\{\varphi_{\mathcal{S}} | \vec{r}_{\mathcal{S}}\}^{-1} \{\varepsilon | \vec{R}\} \{\varphi_{\mathcal{S}} | \vec{r}_{\mathcal{S}}\})_{\alpha\beta} \delta_{\mathcal{S}\{\varepsilon | \vec{R}\}\mathcal{S}} D^{(\vec{k}^l)(l)}(\{\varphi | \vec{r}\})_{\mathcal{S}\beta,\bar{\alpha}}. \end{aligned}$$

Korzystając z tego, że grupa translacji jest dzielnikiem normalnym grupy przestrzennej oraz z równania (III.1.7) otrzymujemy

$$\begin{aligned} &= \sum_{\mathcal{S}\beta} d^{(\vec{k}^l)(l)}(\{\varepsilon | \vec{R}\})_{\alpha\beta} \delta_{\mathcal{S}\mathcal{S}} D^{(\vec{k}^l)(l)}(\{\varphi | \vec{r}\})_{\mathcal{S}\beta,\bar{\alpha}} \\ &\quad (\delta_{\mathcal{S}\{\varepsilon | \vec{R}\}\mathcal{S}} \text{ określone przez (III.1.2b) przechodzi w tym przypadku w zwykłą deltę Kroneckera } \delta_{\mathcal{S}\mathcal{S}}) \\ &= \sum_{\mathcal{S}\beta} \exp(-i\vec{k}_{\mathcal{S}} \cdot \vec{R}) \delta_{\alpha\beta} \delta_{\mathcal{S}\mathcal{S}} D^{(\vec{k}^l)(l)}(\{\varphi | \vec{r}\})_{\mathcal{S}\beta,\bar{\alpha}} \\ &= \exp(-i\vec{k}_{\mathcal{S}} \cdot \vec{R}) D^{(\vec{k}^l)(l)}(\{\varphi | \vec{r}\})_{\delta\alpha,\delta\bar{\alpha}} \end{aligned}$$

Analogiczne wyrażenia otrzymujemy dla $D^{(\vec{k}^l)(l)}$ i $D^{(\vec{k}^{l'})}(l')$.

Podstawiając je do (IV.3.1) mamy

$$\begin{aligned} \sum_{\mathcal{G}} U_{\delta\alpha\delta'\alpha',\delta''\alpha''}^{\mathcal{R}} U_{\delta\bar{\alpha}\delta'\bar{\alpha}',\delta''\bar{\alpha}''}^{\mathcal{R}*} &= \frac{N_{\vec{k}^l l}}{|G|} \sum_{\vec{R} \in T} \exp[-i(\vec{k}_{\mathcal{S}} + \vec{k}_{\mathcal{S}'} - \vec{k}_{\mathcal{S}''}) \cdot \vec{R}] \times \\ &\quad \times \sum_{\{\varphi | \vec{r}\} \in G/T} D^{(\vec{k}^l)(l)}(\{\varphi | \vec{r}\})_{\delta\alpha,\delta\bar{\alpha}} D^{(\vec{k}^{l'})}(l')(\{\varphi | \vec{r}\})_{\delta'\alpha',\delta'\bar{\alpha}'} D^{(\vec{k}^{l''})(l'')*}(l'')(\{\varphi | \vec{r}\})_{\delta''\alpha'',\delta''\bar{\alpha}''} \end{aligned}$$

Ale
$$\sum_{\vec{R} \in T} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{R}) = \begin{cases} |G|/|P| & , \text{gdzy } \vec{k} = 2\pi\vec{b} \\ 0 & , \text{w przeciwnym razie} \end{cases}$$

gdzie $|P|$ - rząd grupy punktowej danej grupy przestrzennej,

\vec{b} - dowolny wektor sieci odwrotnej. Więc

$$\sum_{\delta} U_{\delta\alpha, \delta'\alpha'}^{(\vec{k} \parallel \delta, \vec{k}' \parallel \delta')} U_{\delta''\alpha'', \delta'''\alpha'''}^{(\vec{k}'' \parallel \delta'', \vec{k}''' \parallel \delta''')} = \frac{N_{\vec{k}'' \parallel \delta''}}{|P|} \sum_{\{\varphi|\vec{r}\}} \in G/T D^{(\vec{k} \parallel \delta)}(\{\varphi|\vec{r}\})_{\delta\alpha, \delta'\alpha'} D^{(\vec{k}' \parallel \delta')}(\{\varphi|\vec{r}\})_{\delta'\alpha', \delta''\alpha''} D^{(\vec{k}'' \parallel \delta'')}(\{\varphi|\vec{r}\})_{\delta''\alpha'', \delta'''\alpha'''} \quad (IV.3.2a)$$

przy warunku
$$\vec{k}_{\delta} + \vec{k}_{\delta'} - \vec{k}_{\delta''} = 2\pi\vec{b} \quad (IV.3.2b)$$

Sumowanie odbywa się po elementach faktorgrupy G/T .

Dla promieni wektorów falowych $\vec{k}, \vec{k}', \vec{k}''$ nie spełniających warunku (IV.3.2b) współczynniki C-G są zerami.

Z równania (IV.3.1) czy też z (IV.3.2) widzimy, że struktura blokowa reprezentacji przenosi się również na macierze współczynników C-G. Różne bloki współczynników oznaczane będą wskaźnikami $\sigma, \sigma', \sigma''$.

Korzystając z (III.1.3) przepiszymy warunek (IV.3.2b) w postaci

$$\varphi_{\sigma} \vec{k} + \varphi_{\sigma'} \vec{k}' \cong \varphi_{\sigma''} \vec{k}'' \quad (IV.3.3)$$

gdzie $\sigma=1, \dots, s; \sigma'=1, \dots, s'; \sigma''=1, \dots, s''; s, s', s''$ - indeksy $G(\vec{k}), G(\vec{k}'), G(\vec{k}'')$ w G oraz $\{\varphi_{\sigma}|\vec{r}_{\sigma}\}, \{\varphi_{\sigma'}|\vec{r}_{\sigma'}\}, \{\varphi_{\sigma''}|\vec{r}_{\sigma''}\}$ są reprezentantami warstwowymi rozkładów grupy przestrzennej G na warstwy względem $G(\vec{k}), G(\vec{k}'), G(\vec{k}'')$. Równanie (IV.3.3) pozwala nam stwierdzić, dla jakich $\sigma, \sigma', \sigma''$ współczynniki C-G są różne od zera, czyli możemy ustalić, które bloki nie znikają.

4. Blok (1,1,1).

W większości zastosowań warunek (IV.3.2b) zachodzi dla $\delta=\delta'=\delta''=1$

tzn.
$$\vec{k}_1 + \vec{k}'_1 \cong \vec{k}''_1 \quad (IV.4.1)$$

Wtedy w równaniu (IV.3.2a) przyjmujemy $\delta=\delta'=\delta''=1$

$$\sum_{\delta} U_{1\alpha, 1\alpha', 1\alpha''}^{\delta} U_{1\bar{\alpha}, 1\bar{\alpha}', 1\bar{\alpha}''}^{\delta*} = \frac{N_{\vec{k}'' \parallel \delta''}}{|P|} \sum_{\{\varphi|\vec{r}\}} \in G/T D^{(\vec{k} \parallel \delta)}(\{\varphi|\vec{r}\})_{1\alpha, 1\alpha'} D^{(\vec{k}' \parallel \delta')}(\{\varphi|\vec{r}\})_{1\alpha', 1\alpha''} D^{(\vec{k}'' \parallel \delta'')}(\{\varphi|\vec{r}\})_{1\alpha'', 1\bar{\alpha}''}^*$$

$$= \frac{N_{\vec{k}'' \parallel \delta''}}{|P|} \sum_{\{\varphi|\vec{r}\}} \in N d^{(\vec{k} \parallel \delta)}(\{\varphi|\vec{r}\})_{\alpha\bar{\alpha}} d^{(\vec{k}' \parallel \delta')}(\{\varphi|\vec{r}\})_{\alpha'\bar{\alpha}'} d^{(\vec{k}'' \parallel \delta'')}(\{\varphi|\vec{r}\})_{\alpha''\bar{\alpha}''}^* \quad (IV.4.2)$$

gdzie
$$N = G(\vec{k})/T \wedge G(\vec{k}')/T \wedge G(\vec{k}'')/T$$

Równanie to definiuje (1,1,1) blok współczynników C-G.

Obliczamy go następująco.

Rozważmy dwa przypadki.

i) $\gamma = 1$.

Podstawiając $\alpha = \bar{\alpha}, \alpha' = \bar{\alpha}', \alpha'' = \bar{\alpha}''$ znajdujemy jeden różny od zera współczynnik, powiedzmy dla $\alpha = \alpha_0, \alpha' = \alpha'_0, \alpha'' = \alpha''_0$. Wtedy ustalamy fazę $U_{1\alpha_0, 1\alpha'_0, 1\alpha''_0}$ jako rzeczywistą; podstawiamy $\bar{\alpha} = \alpha_0, \bar{\alpha}' = \alpha'_0, \bar{\alpha}'' = \alpha''_0$ i obliczamy prawą stronę (IV.4.2) dla wszystkich dozwolonych wartości $\alpha, \alpha', \alpha''$. W ten sposób otrzymamy cały (1,1,1) blok współczynników C-G.

ii) $\gamma > 1$.

Zauważmy, że lewa strona (IV.4.2) dla ustalonych $\bar{\alpha}, \bar{\alpha}', \bar{\alpha}''$ jest liniową kombinacją współczynników C-G. A ponieważ każda liniowa kombinacja współczynników zadowala nas możemy więc oddzielnie obliczać $U_{1\alpha, 1\alpha', 1\alpha''}^{\gamma}$. W takim razie znajdujemy różny od zera współczynnik, który daje nam (1,1,1) blok dla $\gamma = 1$. Następnie szukamy kolejny niezerowy współczynnik, ale o wskaźnikach różnych od wskaźników współczynników pierwszego obliczonego już zbioru, za pomocą którego obliczamy (1,1,1) blok dla $\gamma = 2$. Postępujemy tak dalej aż do osiągnięcia maksymalnej wartości γ .

Gdy (IV.3.3) zachodzi dla $\sigma, \sigma', \sigma''$ niekoniecznie równych jedności postępujemy następująco.

Niech np. (IV.3.3) jest spełniony dla $\sigma = \sigma' = 1$ i dla $\sigma'' \neq 1$. Ponieważ podanie jednego dowolnego promienia określa całkowicie gwiazdę wektora falowego możemy jako pierwszy promień wybrać nie \vec{k}'' a $\vec{k}''_{\sigma} = \varphi_{\sigma''} \vec{k}''$ tzn. $\vec{k}''_1 = \varphi_1 \vec{k}''_{\sigma''}$. Wtedy zachodzi (IV.4.1) i dalej w równaniu (IV.4.2) używamy nie $d^{(\vec{k}'')(l'')}$ a $d^{(\vec{k}''_{\sigma})(l'')}$. Gdy nie mamy tej drugiej reprezentacji tylko pierwszą, to wykorzystujemy równanie (III.1.7).

5. Blok $(\sigma, \sigma', \sigma'')$.

Powróćmy do równania (IV.3.2a) i podstawmy $\sigma = \bar{\sigma}, \sigma' = \bar{\sigma}', \sigma'' = \bar{\sigma}''$

$$\sum_{\gamma} U_{\delta\alpha\delta'\alpha',\delta''\alpha''}^{\gamma} U_{\delta\bar{\alpha}\delta'\bar{\alpha}',\delta''\bar{\alpha}''}^{\gamma*} =$$

$$= \frac{N_{\vec{k}''\alpha''}}{|P|} \sum_{\{\varphi|\vec{\tau}\} \in G_T} D^{(\vec{k})}(\varphi|\vec{\tau})_{\delta\alpha,\delta\bar{\alpha}} D^{(\vec{k}')}(l')_{\delta'\alpha',\delta'\bar{\alpha}'} D^{(\vec{k}'')}(l'')^*_{\delta''\alpha'',\delta''\bar{\alpha}''}$$

Korzystając z (III.1.2a) i (III.1.7) mamy

$$= \frac{N_{\vec{k}''\alpha''}}{|P|} \sum_{\{\varphi|\vec{\tau}\} \in G_T} d^{(\vec{k}_\sigma)(l)}_{\{\varphi|\vec{\tau}\}_{\alpha\bar{\alpha}}} d^{(\vec{k}_{\sigma'})}(l')_{\{\varphi|\vec{\tau}\}_{\alpha'\bar{\alpha}'}} d^{(\vec{k}_{\sigma''})(l'')}^*_{\{\varphi|\vec{\tau}\}_{\alpha''\bar{\alpha}''}} \times$$

$$\times \delta_{\{\varphi|\vec{\tau}\}\sigma} \delta_{\{\varphi|\vec{\tau}\}\sigma'} \delta_{\{\varphi|\vec{\tau}\}\sigma''}$$

$$= \frac{N_{\vec{k}''\alpha''}}{|P|} \sum_{\{\varphi|\vec{\tau}\} \in N_{\delta\delta'\delta''}}$$

gdzie $N_{\delta\delta'\delta''} = G(\vec{k}_\sigma)/T \wedge G(\vec{k}_{\sigma'})/T \wedge G(\vec{k}_{\sigma''})/T$. Czyli

$$\sum_{\gamma} U_{\delta\alpha\delta'\alpha',\delta''\alpha''}^{\gamma} U_{\delta\bar{\alpha}\delta'\bar{\alpha}',\delta''\bar{\alpha}''}^{\gamma*} =$$

$$= \frac{N_{\vec{k}''\alpha''}}{|P|} \sum_{\{\varphi|\vec{\tau}\} \in N_{\delta\delta'\delta''}} D^{(\vec{k})}(\varphi|\vec{\tau})_{\delta\alpha,\delta\bar{\alpha}} D^{(\vec{k}')}(l')_{\delta'\alpha',\delta'\bar{\alpha}'} D^{(\vec{k}'')}(l'')^*_{\delta''\alpha'',\delta''\bar{\alpha}''} \quad (IV.5.1)$$

Dla $\{\varphi|\vec{\tau}\} \in N_{\delta\delta'\delta''}$ zachodzi

$$\varphi \vec{k}_\sigma \cong \vec{k}_\sigma, \quad \varphi \vec{k}_{\sigma'} \cong \vec{k}_{\sigma'}, \quad \varphi \vec{k}_{\sigma''} \cong \vec{k}_{\sigma''} \quad (IV.5.2)$$

Rozważmy element $\{\varphi_\Sigma|\vec{\tau}_\Sigma\}$, który rotuje (1,1,1) w $(\sigma, \sigma', \sigma'')$ blok współczynników C-G i taki, że

$$\varphi_\Sigma \vec{k} \cong \vec{k}_\sigma, \quad \varphi_\Sigma \vec{k}' \cong \vec{k}_{\sigma'}, \quad \varphi_\Sigma \vec{k}'' \cong \vec{k}_{\sigma''} \quad (IV.5.3)$$

Z (IV.5.2) i (IV.5.3) mamy

$$\varphi_\Sigma^{-1} \varphi \varphi_\Sigma \vec{k} \cong \vec{k}, \quad \varphi_\Sigma^{-1} \varphi \varphi_\Sigma \vec{k}' \cong \vec{k}', \quad \varphi_\Sigma^{-1} \varphi \varphi_\Sigma \vec{k}'' \cong \vec{k}'' ,$$

czyli

$$\{\varphi_x|\vec{\tau}_x+\vec{r}_x\} \stackrel{df}{=} \{\varphi_\Sigma|\vec{\tau}_\Sigma\}^{-1} \{\varphi|\vec{\tau}\} \{\varphi_\Sigma|\vec{\tau}_\Sigma\} \in G(\vec{k}) \wedge G(\vec{k}') \wedge G(\vec{k}'') \quad (IV.5.4)$$

Zauważmy, że zgodnie z (III.1.3) zachodzi

$$\varphi_\sigma \vec{k} \cong \vec{k}_\sigma, \quad \varphi_{\sigma'} \vec{k}' \cong \vec{k}_{\sigma'}, \quad \varphi_{\sigma''} \vec{k}'' \cong \vec{k}_{\sigma''} \quad (IV.5.5)$$

Z (IV.5.3) i (IV.5.5) wynika, że $\{\varphi_\Sigma|\vec{\tau}_\Sigma\}$ i $\{\varphi_\sigma|\vec{\tau}_\sigma\}$ mogą różnić się jedynie o element $\{\varphi_k|\vec{\tau}_k\} \in G(\vec{k})$

$$\{\varphi_\Sigma|\vec{\tau}_\Sigma\} = \{\varphi_\sigma|\vec{\tau}_\sigma\} \{\varphi_k|\vec{\tau}_k\}; \quad (IV.5.6)$$

$$\text{tzn.} \quad \{\varphi_\Sigma|\vec{\tau}_\Sigma\} = \{\varphi_\sigma|\vec{\tau}_\sigma\} \{\varphi_k|\vec{\tau}_k\}; \quad (IV.5.7)$$

analogicznie mamy dla $G(\vec{k}')$ i $G(\vec{k}'')$.

Obliczmy korzystając z (IV.5.4) i (IV.5.7) dla $\{\varphi|\vec{\tau}\} \in N_{\sigma\sigma'\sigma''}$

$$\begin{aligned} \{\varphi_{\sigma}|\vec{\tau}_{\sigma}\}^{-1}\{\varphi|\vec{\tau}\}\{\varphi_{\sigma'}|\vec{\tau}_{\sigma'}\} &= \\ &= \{\varphi_{\sigma}|\vec{\tau}_{\sigma}\}^{-1}\{\varphi_{\Sigma}|\vec{\tau}_{\Sigma}\}\{\varphi_x|\vec{\tau}_x + \vec{R}_x\}\{\varphi_{\Sigma}|\vec{\tau}_{\Sigma}\}^{-1}\{\varphi_{\sigma'}|\vec{\tau}_{\sigma'}\} \\ &= \{\varphi_k|\vec{\tau}_k\}\{\varphi_x|\vec{\tau}_x + \vec{R}_x\}\{\varphi_k|\vec{\tau}_k\}^{-1} \in G(\vec{k}). \end{aligned} \quad (IV.5.8)$$

Korzystając z (IV.1.5), (IV.5.4), (IV.5.6) i (IV.5.8) mamy

$$\begin{aligned} D^{(\vec{k})^{(U)}}(\{\varphi|\vec{\tau}\})_{\sigma\alpha, \sigma\bar{\alpha}} &= d^{(\vec{k})^{(U)}}(\{\varphi_k|\vec{\tau}_k\}\{\varphi_x|\vec{\tau}_x + \vec{R}_x\}\{\varphi_k|\vec{\tau}_k\}^{-1})_{\alpha\bar{\alpha}} \\ &= \left[d^{(\vec{k})^{(U)}}(\{\varphi_k|\vec{\tau}_k\}) d^{(\vec{k})^{(U)}}(\{\varphi_x|\vec{\tau}_x\}) d^{(\vec{k})^{(U)}}(\{\varepsilon|\vec{R}_x\}) d^{(\vec{k})^{(U)}}(\{\varphi_k|\vec{\tau}_k\})^{-1} \right]_{\alpha\bar{\alpha}} \\ &= \exp(-i\vec{k}_1 \cdot \vec{R}_x) d^{(\vec{k})^{(U)}}(\{\varphi_x|\vec{\tau}_x\})_{\alpha\bar{\alpha}} \end{aligned} \quad (IV.5.9a)$$

gdzie $d^{(\vec{k})^{(U)}}(\{\varphi_x|\vec{\tau}_x\})_{\alpha\bar{\alpha}}$ jest wynikiem przekształcenia przez transformację podobieństwa

$$A = d^{(\vec{k})^{(U)}}(\{\varphi_k|\vec{\tau}_k\}) \quad (IV.5.9b)$$

reprezentacji $d^{(\vec{k})^{(U)}}(\{\varphi_x|\vec{\tau}_x\})$ oraz $\vec{k}_1 = \varphi_1 \vec{k} = \vec{k}$.

Analogiczne wyrażenia otrzymujemy dla $D^{(\vec{k}')^{(U)'}}$ i $D^{(\vec{k}'')^{(U)''}}$.

Podstawiając je do (IV.5.1) (pamiętając o (IV.5.4)) uzyskujemy

$$\begin{aligned} \sum_{\gamma} U_{\sigma\alpha\sigma'\alpha', \sigma''\alpha''}^{\gamma} U_{\sigma\bar{\alpha}\sigma'\bar{\alpha}', \sigma''\bar{\alpha}''}^{\gamma*} &= \frac{N_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{k}''}}{|P|} \exp[-i(\vec{k}_1 + \vec{k}'_1 - \vec{k}''_1) \cdot \vec{R}_x] \times \\ &\times \sum_{\{\varphi_x|\vec{\tau}_x\} \in N} \frac{d^{(\vec{k})^{(U)}}(\{\varphi_x|\vec{\tau}_x\})_{\alpha\bar{\alpha}} d^{(\vec{k}')^{(U)'}}(\{\varphi_x|\vec{\tau}_x\})_{\alpha'\bar{\alpha}'} d^{(\vec{k}'')^{(U)''}}(\{\varphi_x|\vec{\tau}_x\})_{\alpha''\bar{\alpha}''}}{d^{(\vec{k})^{(U)}}(\{\varphi_x|\vec{\tau}_x\})_{\alpha\bar{\alpha}} d^{(\vec{k}')^{(U)'}}(\{\varphi_x|\vec{\tau}_x\})_{\alpha'\bar{\alpha}'} d^{(\vec{k}'')^{(U)''}}(\{\varphi_x|\vec{\tau}_x\})_{\alpha''\bar{\alpha}''}} \end{aligned} \quad (IV.5.10)$$

przy warunku $\vec{k}_1 + \vec{k}'_1 \cong \vec{k}''_1$, tzn. istnieniu niezerowego (1,1,1) bloku,

gdzie
$$N = G(\vec{k})/T \wedge G(\vec{k}')/T \wedge G(\vec{k}'')/T.$$

Patrząc na prawą stronę równania (IV.5.10) widzimy, że stanowi ono identyczny jak (IV.4.2) przepis na (1,1,1) blok współczynników C-G, ale dla przekształconych przez transformację podobieństwa reprezentacji grup $G(\vec{k}), G(\vec{k}'), G(\vec{k}'')$. Z drugiej strony (1,1,1) blok dla przekształconych reprezentacji jest $(\sigma, \sigma', \sigma'')$ blokiem dla reprezentacji nieprzekształconych. Stosując tw. ze str. 12 i uwzględniając oznaczenia typu

(IV.5.9b) mamy następujący wzór na $(\sigma, \sigma', \sigma'')$ blok współczynników C-G

$$U^{\sigma\sigma'\sigma''} = \left[d^{(\vec{k})(\ell)}(\{\varphi_k|\vec{t}_k\}) \otimes d^{(\vec{k}')(\ell')}(\{\varphi_{k'}|\vec{t}_{k'}\}) \right] U^{\sigma''} d^{(\vec{k}'')(\ell'')}^{-1}(\{\varphi_{k''}|\vec{t}_{k''}\}), \quad (\text{IV.5.11a})$$

gdzie

$$\begin{aligned} \{\varphi_k|\vec{t}_k\} &= \{\varphi_\sigma|\vec{t}_\sigma\}^{-1} \{\varphi_z|\vec{t}_z\}, \\ \{\varphi_{k'}|\vec{t}_{k'}\} &= \{\varphi_{\sigma'}|\vec{t}_{\sigma'}\}^{-1} \{\varphi_z|\vec{t}_z\}, \end{aligned} \quad (\text{IV.5.11b})$$

$$\{\varphi_{k''}|\vec{t}_{k''}\} = \{\varphi_{\sigma''}|\vec{t}_{\sigma''}\}^{-1} \{\varphi_z|\vec{t}_z\}$$

oraz $\varphi_z \vec{k} \cong \vec{k}_\sigma, \quad \varphi_z \vec{k}' \cong \vec{k}_{\sigma'}, \quad \varphi_z \vec{k}'' \cong \vec{k}_{\sigma''}. \quad (\text{IV.5.11c})$

Z przedstawionej metody widać, że wyznaczanie współczynników C-G nie tylko zostało sprowadzone do obliczeń na poziomie reprezentacji pewnych podgrup grupy przestrzennej kryształu, ale również w maksymalnym stopniu uproszczone przez ograniczenie do wyliczania niejako z definicji (r-nie (IV.3.2a)) tylko bloku (1,1,1) (r-nie (IV.4.2)) a następnie korzystając z odpowiednich transformacji (r-nia (IV.5.11)) pozostałych nieznikających bloków.

6. Współczynniki Clebscha-Gordana dla $R \otimes R \rightarrow GM$

oraz $X \otimes X \rightarrow GM \oplus M$.

Dla grupy przestrzennej O_h^3 punktami o najwyższej symetrii (vide rys. 2, str. 6) są Γ, R, X, M o współrzędnych

$$\vec{k}_\Gamma = (0, 0, 0), \quad \vec{k}_R = (\pi/a_L, \pi/a_L, \pi/a_L), \quad \vec{k}_X = (0, \pi/a_L, 0), \quad \vec{k}_M = (\pi/a_L, \pi/a_L, 0),$$

gdzie a_L - stała sieci.

Reprezentacje grup wektora falowego $G(\vec{k}_\Gamma), G(\vec{k}_R), G(\vec{k}_X), G(\vec{k}_M)$ są oznaczane (w/g Millera i Lova [23]) przez $GM(\ell), R(\ell), X(\ell), M(\ell)$, gdzie ℓ - numer reprezentacji.

W niniejszej pracy zostały policzone współczynniki C-G dla rozkładów na sumy proste iloczynów Kroneckera

$$R(\ell) \otimes R(\ell') \rightarrow \sum_{\ell''=-5}^5 \alpha_{\ell''} GM(\ell''); \quad \ell, \ell' = 1, 2, 3, 4; \quad (\text{IV.6.1a})$$

$$X(l) \otimes X(l') \rightarrow \sum_{l''=-5}^5 \beta_{l''} G_H(l'') \oplus \sum_{l''=-5}^5 \gamma_{l''} M(l''); \quad l, l' = 1, 2, 3, 4. \quad (\text{IV.6.1b})$$

Zwróćmy uwagę na symboliczność zapisu (IV.6.1). Nie chodzi tutaj o iloczyny Kroneckera i sumy proste reprezentacji grup wektora falowego, a o iloczyny i sumy reprezentacji indukowanych przez nie. Ściśle należałoby napisać

$$D^{(\vec{k}_R)(l)} \otimes D^{(\vec{k}_R)(l')} = \sum_{l''} \alpha_{l''} D^{(\vec{k}_R)(l'')}, \quad (\text{IV.6.1a}')$$

$$D^{(\vec{k}_x)(l)} \otimes D^{(\vec{k}_x)(l')} = \sum_{l''} \beta_{l''} D^{(\vec{k}_r)(l'')} \oplus \sum_{l''} \gamma_{l''} D^{(\vec{k}_H)(l'')} \quad (\text{IV.6.1b}')$$

Współczynniki $\alpha_{l''}$, $\beta_{l''}$, $\gamma_{l''}$ są krotnościami występowania odpowiedniej reprezentacji w sumie prostej dla danego iloczynu Kroneckera. Dla interesujących nas przypadków wzięte one zostały z pracy [24].

W niniejszej pracy wykorzystane zostały reprezentacje faktorgrup $G(\vec{k}_r)/T$, $G(\vec{k}_R)/T$, $G(\vec{k}_x)/T$, $G(\vec{k}_H)/T$ wyznaczone przy pomocy komputera w/g programu zawartego w [32], na podstawie reprezentacji generatorów i relacji określających podanych u nas w tab. 3, a wziętych z [23].

Dostosowując oznaczenia wprowadzone w poprzednich punktach tego rozdziału do konkretnych warunków mamy

i) dla rozkładów (IV.6.1a)

$$\vec{k} = \vec{k}_R, \quad \vec{k}' = \vec{k}_R, \quad \vec{k}'' = \vec{k}_r \quad (\text{IV.6.2})$$

$$G = G(\vec{k}_R),$$

$$G = G(k_r), \quad (\text{IV.6.3})$$

czyli gwiazdy $^* \vec{k}_R$, $^* \vec{k}_r$ składają się tylko z jednego promienia.

Warunek (IV.3.2b) należy badać przy regule dodawania wektorów falowych

$$\vec{k}_R + \vec{k}_R \cong \vec{k}_r \quad ([33] \text{ tab. II, str. 532}). \quad (\text{IV.6.4})$$

Z (IV.6.3), (IV.6.4) i (IV.3.3) wynika, że dla rozkładów (IV.6.1a) istnieją tylko (1,1,1)bloki współczynników Clebscha-Gordana.

ii) dla rozkładów (IV.6.1b)

$$\vec{k} = \vec{k}_x, \quad \vec{k}' = \vec{k}_x, \quad \vec{k}'' = \vec{k}_r, \quad (\text{IV.6.5a})$$

$$\vec{k}'' = \vec{k}_H. \quad (\text{IV.6.5b})$$

Tabela 3.)

Oznaczenie: $dn = \{ n | \vec{r}_n \}$, gdzie $n=1, \dots, 48$ - elementy O_h (tab. 2).

$G(k_p)/T$	Reprezentacje generatorów				
	$(\omega = \exp(2\pi i/3))$				
	d2	d4	d9	d26	d37
GM(1+)	1	1	1	1	1
GM(1-)	1	1	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$
GM(2+)	1	1	1	1	$\bar{1}$
GM(2-)	1	1	1	$\bar{1}$	1
GM(3+)	1 0 0 1	1 0 0 1	ω 0 0 ω^*	1 0 0 1	0 1 1 0
GM(3-)	1 0 0 1	1 0 0 1	ω 0 0 ω^*	$\bar{1}$ 0 0 $\bar{1}$	0 1 1 0
GM(4+)	$\bar{1}$ 0 0 0 1 0 0 0 $\bar{1}$	1 0 0 0 $\bar{1}$ 0 0 0 $\bar{1}$	0 0 1 1 0 0 0 1 0	$\bar{1}$ 0 0 0 1 0 0 0 $\bar{1}$	$\bar{1}$ 0 0 0 0 $\bar{1}$ 0 $\bar{1}$ 0
GM(4-)	$\bar{1}$ 0 0 0 1 0 0 0 $\bar{1}$	1 0 0 0 $\bar{1}$ 0 0 0 $\bar{1}$	0 0 1 1 0 0 0 1 0	1 0 0 0 1 0 0 0 1	1 0 0 0 0 1 0 1 0
GM(5+)	$\bar{1}$ 0 0 0 1 0 0 0 1	1 0 0 0 $\bar{1}$ 0 0 0 1	0 0 1 1 0 0 0 1 0	$\bar{1}$ 0 0 0 1 0 0 0 1	1 0 0 0 0 1 0 1 0
GM(5-)	$\bar{1}$ 0 0 0 1 0 0 0 1	1 0 0 0 $\bar{1}$ 0 0 0 1	0 0 1 1 0 0 0 1 0	1 0 0 0 1 0 0 0 1	$\bar{1}$ 0 0 0 0 1 0 1 0

Relacje określające

d1 = d2 · d2	d3 = d2 · d4	d27 = d26 · d4	d25 = d26 · d2	d28 = d25 · d4
d10 = d9 · d4	d11 = d9 · d2	d12 = d11 · d4	d35 = d9 · d26	d36 = d35 · d4
d33 = d35 · d2	d34 = d33 · d4	d5 = d9 · d9	d7 = d5 · d4	d8 = d5 · d2
d6 = d8 · d4	d32 = d5 · d26	d30 = d32 · d4	d29 = d32 · d2	d31 = d29 · d4
d40 = d37 · d4	d39 = d37 · d2	d38 = d39 · d4	d15 = d37 · d26	d14 = d15 · d4
d13 = d15 · d2	d16 = d13 · d4	d41 = d37 · d9	d43 = d41 · d4	d42 = d41 · d2
d44 = d42 · d4	d18 = d41 · d26	d20 = d18 · d4	d17 = d18 · d2	d19 = d17 · d4
d45 = d37 · d5	d46 = d45 · d4	d48 = d45 · d2	d47 = d48 · d4	d24 = d45 · d26
d23 = d24 · d4	d21 = d24 · d2	d22 = d21 · d4		

$G(k_R)/T$	Reprezentacje generatorów				
	$(\omega = \exp(2\pi i/3))$				
	d2	d4	d9	d26	d37
R(1)	1 0 0 1	1 0 0 1	1 0 0 1	1 0 0 $\bar{1}$	0 $\bar{1}$ 1 0

Tabela 3 (cd.)

R(2)	1 0 0 1	1 0 0 1	ω 0 0 ω^*	1 0 0 1	0 $\bar{1}$ 1 0
R(3)	1 0 0 1	1 0 0 1	ω^* 0 0 ω	1 0 0 1	0 $\bar{1}$ 1 0
R(4)	$\bar{1}$ 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 1	1 0 0 0 0 0 0 $\bar{1}$ 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 $\bar{1}$	0 0 1 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 1 0 0	1 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 1	0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 $\bar{1}$ 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0

Relacje określające są identyczne, jak dla $G(k_p)/T$.

$G(k_M)/T$	Reprezentacje generatorów				$G(k_X)/T$	Reprezentacje generatorów			
	d2	d4	d26	d37		d2	d4	d26	d45
M(1+)	1	$\bar{1}$	1	1	X(1)	1 0 0 1	1 0 0 1	1 0 0 1	0 $\bar{1}$ 1 0
M(1-)	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	X(2)	1 0 0 1	1 0 0 1	$\bar{1}$ 0 0 1	0 $\bar{1}$ 1 0
M(2+)	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	X(3)	$\bar{1}$ 0 0 1	1 0 0 1	1 0 0 1	0 $\bar{1}$ 1 0
M(2-)	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	1	X(4)	1 0 0 1	$\bar{1}$ 0 0 1	1 0 0 1	0 $\bar{1}$ 1 0
M(3+)	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	Relacje określające d1= d2 · d2 d3= d2 · d4 d27=d26 · d4 d25=d26 · d2 d48=d45 · d2 d46=d45 · d4 d24=d45 · d26 d47=d48 · d4 d21=d24 · d4 d23=d24 · d4 d22=d21 · d4				
M(3-)	$\bar{1}$	$\bar{1}$	1	1					
M(4+)	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	1					
M(4-)	$\bar{1}$	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$					
M(5+)	1 0 0 1	1 0 0 1	1 0 0 1	0 1 1 0					
M(5-)	1 0 0 1	1 0 0 1	$\bar{1}$ 0 0 1	0 1 1 0					

Relacje określające otrzymujemy z relacji dla $G(k_p)/T$ przez ograniczenie się do czterech generatorów.

$$G = G(\vec{k}_x) + \{5|0\} G(\vec{k}_x) + \{9|0\} G(\vec{k}_x) ,$$

$$G = G(k_r) ,$$

(IV.6.6)

$$G = G(\vec{k}_M) + \{5|0\} G(\vec{k}_M) + \{9|0\} G(\vec{k}_M) ,$$

czyli gwiazdy $^* \vec{k}_x$, $^* \vec{k}_M$ składają się z trzech promieni (vide tab. 4).

Warunek (IV.3.2b) należy tutaj badać osobno dla dwóch reguł dodawania wektorów falowych

$$\vec{k}_x + \vec{k}_x \cong \vec{k}_r ,$$

(IV.6.7a)

$$\vec{k}_x + 5\vec{k}_x \cong \vec{k}_M$$

([33] tab. II, str. 532) .

(IV.6.7b)

Tabela 4.

$\{\varphi_\sigma \vec{r}_\sigma\}$	$\{1 0\}$	$\{5 0\}$	$\{9 0\}$
\vec{k}	$\vec{k}_x = \vec{k}_{\sigma=1}$	$5 \vec{k}_x = \vec{k}_{\sigma=2}$	$9 \vec{k}_x = \vec{k}_{\sigma=3}$
\vec{k}'	$\vec{k}_x = \vec{k}'_{\sigma'=1}$	$5 \vec{k}_x = \vec{k}'_{\sigma'=2}$	$9 \vec{k}_x = \vec{k}'_{\sigma'=3}$
\vec{k}''	$\vec{k}_r = \vec{k}''_{\sigma''=1}$		
\vec{k}'''	$\vec{k}_M = \vec{k}''_{\sigma''=1}$	$5 \vec{k}_M = \vec{k}''_{\sigma''=2}$	$9 \vec{k}_M = \vec{k}''_{\sigma''=3}$

Tabela 5.

$\sigma \sigma' \sigma''$	$\{\varphi_\sigma \vec{r}_\sigma\}$	$\{\varphi_{k'} \vec{r}_{k'}\}$	$\{\varphi_{k''} \vec{r}_{k''}\}$	$\{\varphi_{k'''} \vec{r}_{k'''}\}$
		$G(\vec{k}_x)$	$G(\vec{k}_x)$	$G(\vec{k}_r)$
1 1 1	$\{1 0\}$	$\{1 0\}$	$\{1 0\}$	$\{1 0\}$
2 2 1	$\{5 0\}$	$\{1 0\}$	$\{1 0\}$	$\{5 0\}$
3 3 1	$\{9 0\}$	$\{1 0\}$	$\{1 0\}$	$\{9 0\}$
		$G(\vec{k}_x)$	$G(5\vec{k}_x)$	$G(\vec{k}_M)$
1 2 1 (111)	$\{1 0\}$	$\{1 0\}$	$\{1 0\}$	$\{1 0\}$
1 3 3 (123)	$\{21 \vec{r}\}$	$\{21 \vec{r}\}$	$\{17 \vec{r}\}$	$\{13 \vec{r}\}$
2 1 1 (231)	$\{13 \vec{r}\}$	$\{21 \vec{r}\}$	$\{17 \vec{r}\}$	$\{13 \vec{r}\}$
2 3 2 (222)	$\{5 0\}$	$\{1 0\}$	$\{1 0\}$	$\{1 0\}$
3 1 3 (333)	$\{9 0\}$	$\{1 0\}$	$\{1 0\}$	$\{1 0\}$
3 2 2 (312)	$\{17 \vec{r}\}$	$\{21 \vec{r}\}$	$\{17 \vec{r}\}$	$\{13 \vec{r}\}$

Obliczając zgodnie z (III.1.3) wszystkie promienie wektorów (IV.6.5) (tab. 4), podstawiając je kolejno do (IV.3.2b) i wykorzystując warunki (IV.6.7) otrzymujemy wartości wskaźników $\sigma, \sigma', \sigma''$, umieszczone w pierwszej kolumnie tabeli 5, dla których istnieją niezerowe bloki współczynników C-G.

Elementy $\{\varphi_z | \vec{t}_z\}, \{\varphi_k | \vec{t}_k\}, \{\varphi_{k'} | \vec{t}_{k'}\}, \{\varphi_{k''} | \vec{t}_{k''}\}$ niezbędne do obliczenia wszystkich bloków współczynników C-G przedstawione są w tab. 5.

Zauważmy, że dla rozkładu $X(l) \otimes X(l') \rightarrow \sum \gamma_{l''} M(l'')$ występuje sytuacja omówiona przy końcu punktu 4. Tutaj za \vec{k}' (czyli pierwszy promień gwiazdy wektora falowego) zamiast \vec{k}_x przyjęto $5\vec{k}_x$ tzn. $\vec{k}' = 5\vec{k}_x$.

Promienie wektorów falowych dla tego rozkładu przedstawione są w tab. 6.

Tabela 6.

$\{\varphi_\sigma \vec{t}_\sigma\}$	$\{1 0\}$	$\{5 0\}$	$\{9 0\}$
\vec{k}	$\vec{k}_x = \vec{k}_{\sigma=1}$	$5\vec{k}_x = \vec{k}_{\sigma=2}$	$9\vec{k}_x = \vec{k}_{\sigma=3}$
\vec{k}'	$5\vec{k}_x = \vec{k}'_{\sigma'=1}$	$9\vec{k}_x = \vec{k}'_{\sigma'=2}$	$\vec{k}_x = \vec{k}'_{\sigma'=3}$
\vec{k}''	$\vec{k}_M = \vec{k}''_{\sigma''=1}$	$5\vec{k}_M = \vec{k}''_{\sigma''=2}$	$9\vec{k}_M = \vec{k}''_{\sigma''=3}$

Korzystając z tab. 6, (IV.3.2b) i (IV.6.7b) otrzymano wskaźniki nieznikających bloków współczynników C-G, które jako pomocnicze umieszczone są w nawiasach w kolumnie drugiej tab. 5. Wskaźniki te zostały wykorzystane do wyznaczenia elementów $\{\varphi_z | \vec{t}_z\}, \{\varphi_k | \vec{t}_k\}, \{\varphi_{k'} | \vec{t}_{k'}\}, \{\varphi_{k''} | \vec{t}_{k''}\}$ dla $X(l) \otimes X(l') \rightarrow \sum \gamma_{l''} M(l'')$.

Obliczmy przykładowo te elementy dla bloku (231) (druga kolumna tab.5).

Korzystając z (IV.5.11c) i (IV.5.11b) mamy

$$\begin{array}{lll}
 \varphi_z \vec{k} \cong \vec{k}_{\sigma=1} & \varphi_z \vec{k}' \cong \vec{k}'_{\sigma'=3} & \varphi_z \vec{k}'' \cong \vec{k}''_{\sigma''=1} \\
 \varphi_z \vec{k}_x \cong 5\vec{k}_x & \varphi_z 5\vec{k}_x \cong \vec{k}_x & \varphi_z \vec{k}_M \cong \vec{k}_M \\
 \Downarrow & \Downarrow & \Downarrow \\
 5^{-1} \varphi_z \vec{k}_x \cong \vec{k}_x & \varphi_z 5 \in G(\vec{k}_x) & \varphi_z \in G(\vec{k}_M)
 \end{array}$$

$$\begin{array}{l}
 9\varphi_z \in G(\vec{k}_x) \xrightarrow{\quad\quad\quad} \varphi_z = 13 \\
 \text{czyli} \quad \{\varphi_z | \vec{t}_z\} = \{13 | \vec{t}_z\}
 \end{array}$$

oraz

$$\begin{aligned} \{ \varphi_k | \vec{t}_k \} &= \{ 5|0 \}^{-1} \{ 13 | \vec{t} \} = \{ 21 | \vec{t} \} , \\ \{ \varphi_{k'} | \vec{t}_{k'} \} &= \{ 9|0 \}^{-1} \{ 13 | \vec{t} \} = \{ 17 | \vec{t} \} , \\ \{ \varphi_{k''} | \vec{t}_{k''} \} &= \{ 1|0 \}^{-1} \{ 13 | \vec{t} \} = \{ 13 | \vec{t} \} . \end{aligned}$$

Dla otrzymania wszystkich bloków współczynników C-G dla rozkładu $\chi(\lambda) \otimes \chi(\lambda') \rightarrow \sum \gamma_{\lambda''} M(\lambda'')$ w równaniu (IV.5.11a) podstawiono $d^{(\vec{k}' = 5\vec{k}_x)(\lambda')}$ a nie $d^{(\vec{k}' = \vec{k}_x)(\lambda')}$, a w obliczeniach wykorzystano (III.1.7).

Powracając do poprzednich (tab. 4) oznaczeń wektorów falowych otrzymujemy właściwą, wspólną dla obu kanałów rozkładu (tzn. sumy prostej reprezentacji indukowanych przez $GM(\lambda)$ i sumy prostej reprezentacji indukowanych przez $M(\lambda)$) numerację niezerowych bloków współczynników Clebscha-Gordana, umieszczoną w kolumnie pierwszej tabeli 5.

Uwaga. Ostatnio zostały policzone przez Lee i Birmana [35], jeszcze nie opublikowane, współczynniki C-G dla niektórych iloczynów $R \otimes R$, ale dla reprezentacji Kovaleva [34].

V. Współczynniki Clebscha-Gordana

dla $R \otimes R \rightarrow GM$ oraz $X \otimes X \rightarrow GM \oplus M$.

Tablice.

Oznaczenia

$$a = 1/\sqrt{2}, \quad b = 1/\sqrt{3}, \quad c = (1/\sqrt{3})\exp(2\pi i/3), \quad d = 1/\sqrt{6},$$

$$s = (1/\sqrt{2})\exp(2\pi i/3).$$

* - gwiazdka oznacza sprzężenie zespolone.

- - znak "minus" pisany jest nad daną liczbą np. $\bar{a} = -a$.

W tablicach zostały wydrukowane tylko niezerowe bloki współczynników Clebscha-Gordana.

Wskaźniki $\sigma, \sigma', \sigma''$ numerują bloki współczynników C-G.

Wskaźniki $\alpha, \alpha', \alpha''$ odnoszą się do elementów macierzywych reprezentacji grup wektora falowego.

Tablica I

$R1 \otimes R1$					$R1 \otimes R2$			$R2 \otimes R2$			
	GM1+	GM2+	GM1-	GM2-		GM3+	GM3-		GM1-	GM2-	GM3+
α''	1	1	1	1	α''	1 2	1 2	α''	1	1	1 2
$\alpha\alpha'$					$\alpha\alpha'$			$\alpha\alpha'$			
11	a	a	0	0	11	1 0	0 0	11	0	0	0 1
12	0	0	a	\bar{a}	12	0 0	0 $\bar{1}$	12	a	\bar{a}	0 0
21	0	0	a	\bar{a}	21	0 0	1 0	21	a	\bar{a}	0 0
22	a	\bar{a}	0	0	22	0 1	0 0	22	0	0	1 0

$R1 \otimes R3$			$R2 \otimes R3$			$R3 \otimes R3$				
	GM3+	GM3-		GM1+	GM2+	GM3-		GM1-	GM2-	GM3+
α''	1 2	1 2	α''	1	1	1 2	α''	1	1	1 2
$\alpha\alpha'$			$\alpha\alpha'$				$\alpha\alpha'$			
11	0 1	0 0	11	a	a	0 0	11	0	0	1 0
12	0 0	1 0	12	0	0	0 $\bar{1}$	12	a	\bar{a}	0 0
21	0 0	0 $\bar{1}$	21	0	0	1 0	21	a	\bar{a}	0 0
22	1 0	0 0	22	a	\bar{a}	0 0	22	0	0	0 1

Tablica II

$R1 \otimes R4 \rightarrow$

$\alpha \alpha'$	GM4+			GM5+			GM4-			GM5-		
	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3
11	0	0	0	0	0	0	a	0	0	a	0	0
12	0	0	0	0	0	0	0	a	0	0	a	0
13	0	0	0	0	0	0	0	0	a	0	0	a
14	a	0	0	a	0	0	0	0	0	0	0	0
15	0	0	a	0	0	a	0	0	0	0	0	0
16	0	a	0	0	a	0	0	0	0	0	0	0
21	a	0	0	a	0	0	0	0	0	0	0	0
22	0	a	0	0	a	0	0	0	0	0	0	0
23	0	0	a	0	0	a	0	0	0	0	0	0
24	0	0	0	0	0	0	a	0	0	a	0	0
25	0	0	0	0	0	0	0	0	a	0	0	a
26	0	0	0	0	0	0	0	a	0	0	a	0

$R2 \otimes R4 \rightarrow$

$\alpha \alpha'$	GM4+			GM5+			GM4-			GM5-		
	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3
11	0	0	0	0	0	0	a	0	0	a	0	0
12	0	0	0	0	0	0	0	s	0	0	s	0
13	0	0	0	0	0	0	0	0	s*	0	0	s*
14	a	0	0	a	0	0	0	0	0	0	0	0
15	0	0	s*	0	0	s*	0	0	0	0	0	0
16	0	s	0	0	s	0	0	0	0	0	0	0
21	a	0	0	a	0	0	0	0	0	0	0	0
22	0	s*	0	0	s*	0	0	0	0	0	0	0
23	0	0	s	0	0	s	0	0	0	0	0	0
24	0	0	0	0	0	0	a	0	0	a	0	0
25	0	0	0	0	0	0	0	0	s	0	0	s
26	0	0	0	0	0	0	0	s*	0	0	s*	0

$R3 \otimes R4 \rightarrow$

$\alpha \alpha'$	GM4+			GM5+			GM4-			GM5-		
	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3
11	0	0	0	0	0	0	a	0	0	a	0	0
12	0	0	0	0	0	0	0	s*	0	0	s*	0
13	0	0	0	0	0	0	0	0	s	0	0	s
14	a	0	0	a	0	0	0	0	0	0	0	0
15	0	0	s	0	0	s	0	0	0	0	0	0
16	0	s*	0	0	s*	0	0	0	0	0	0	0
21	a	0	0	a	0	0	0	0	0	0	0	0
22	0	s	0	0	s	0	0	0	0	0	0	0
23	0	0	s*	0	0	s*	0	0	0	0	0	0
24	0	0	0	0	0	0	a	0	0	a	0	0
25	0	0	0	0	0	0	0	0	s*	0	0	s*
26	0	0	0	0	0	0	0	s	0	0	s	0

Tablica III

$R_4 \otimes R_4 \rightarrow GM$

	GM1+	GM2+	GM1-	GM2-	GM3+	GM3+	GM3-	GM3-
$\alpha \alpha'$	1	1	1	1	1 2	1 2	1 2	1 2
11	d	d	0	0	b 0	0 b	0 0	0 0
14	0	0	d	d	0 0	0 0	b 0	0 b
22	d	d	0	0	c* 0	0 c	0 0	0 0
26	0	0	d	d	0 0	0 0	c* 0	0 c
33	d	d	0	0	e 0	0 e*	0 0	0 0
35	0	0	d	d	0 0	0 0	e 0	c*
41	0	0	d	d	0 0	0 0	0 0	0 0
44	d	d	0	0	0 b	b 0	0 0	0 0
53	0	0	d	d	0 0	0 0	0 0	0 0
55	d	d	0	0	0 c*	c 0	0 0	0 0
62	0	0	d	d	0 0	0 0	0 0	c* 0
66	d	d	0	0	0 c	c* 0	0 0	0 0

	GM4+	GM4+	GM5+	GM5+	GM4-	GM4-	GM5-	GM5-
$\alpha \alpha'$	1 2 3	1 2 3	1 2 3	1 2 3	1 2 3	1 2 3	1 2 3	1 2 3
12	0 0 a	0 0 0	0 0 a	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0
13	0 0 0	0 a 0	0 0 0	0 a 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0
15	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 a 0	0 0 0	0 a 0	0 0 0
16	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 a	0 0 0	0 0 a
21	0 0 0	0 0 a	0 0 0	0 0 a	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0
23	a 0 0	0 0 0	a 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0
24	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 a	0 0 0	0 0 a	0 0 0
25	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	a 0 0	0 0 0	a 0 0
31	0 a 0	0 0 0	0 a 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0
32	0 0 0	a 0 0	0 0 0	a 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0
34	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 a 0	0 0 0	0 a 0
36	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	a 0 0	0 0 0	a 0 0	0 0 0
42	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 a	0 0 0	0 0 a	0 0 0
43	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 a 0	0 0 0	0 a 0
45	0 a 0	0 0 0	0 a 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0
46	0 0 0	0 0 a	0 0 0	0 0 a	0 a 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0
51	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 a 0	0 0 0	0 a 0	0 0 0
52	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	a 0 0	0 0 0	a 0 0
54	0 0 0	0 a 0	0 0 0	0 a 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0
56	a 0 0	0 0 0	a 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 a	0 0 0	0 0 a
61	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 a	0 0 0	0 0 a
63	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	a 0 0	0 0 0	a 0 0	0 0 0
64	0 0 a	0 0 0	0 0 a	0 0 a	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0
65	0 0 0	a 0 0	0 0 0	a 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0

		GM1+	GM2+	GM3+	GM3+	GM4-	GM5-
σ''	α''	1	1	1 1	1 1	1 1 1	1 1 1
$\sigma\sigma'$	$\alpha\alpha'$	1	1	1 2	1 2	1 2 3	1 2 3
11	11	d	d	b 0	0 b	0 0 0	0 0 0
	12	0	0	0 0	0 0	0 0 <u>a</u>	0 0 a
	21	0	<u>0</u>	0 0	0 0	0 0 <u>a</u>	0 0 a
	22	d	d	0 c	c* 0	0 0 0	0 0 0
22	11	d	d	c 0	0 c*	0 0 0	0 0 0
	12	0	0	0 0	0 0	0 <u>a</u> 0	0 a 0
	21	0	<u>0</u>	0 0	0 0	0 <u>a</u> 0	0 a 0
	22	d	d	0 b	b 0	0 0 0	0 0 0
33	11	d	d	c* 0	0 c	0 0 0	0 0 0
	12	0	0	0 0	0 0	<u>a</u> 0 0	a 0 0
	21	0	<u>0</u>	0 0	0 0	<u>a</u> 0 0	a 0 0
	22	d	d	0 c*	c 0	0 0 0	0 0 0

Tablica IV

X1 ⊗ X1 → GM ⊕ M

		M1-	M2-	M3-	M4-	M5+	M5+
σ''	α''	1 2 3	1 2 3	1 2 3	1 2 3	1 1 2 2 3 3	1 1 2 2 3 3
$\sigma\sigma'$	$\alpha\alpha'$	1 1 1	1 1 1	1 1 1	1 1 1	1 2 1 2 1 2	1 2 1 2 1 2
12	11	0	0	0	0	1 0	0 0
	12	a	a	0	0	0 0	0 0
	21	0	0	a	a	0 0	0 0
	22	0	0	0	0	0 0	0 1
13	11		0	0	0		0 0
	12		<u>0</u>	<u>0</u>	a		0 0
	21		a	0	0		0 0
	22		0	0	0		0 1
21	11	0	0	0	0	0 0	1 0
	12	0	<u>0</u>	<u>0</u>	a	0 0	0 0
	21	a	a	0	0	0 0	0 0
	22	0	0	0	0	0 1	0 0
23	11	0	0	0	0	1 0	0 0
	12	a	a	0	0	0 0	0 0
	21	0	0	a	a	0 0	0 0
	22	0	0	0	0	0 0	0 1
31	11		0	0	0		1 0
	12		a	0	0		0 0
	21		0	a	a		0 0
	22		0	0	0		0 0
32	11	0	0	0	0	0 0	1 0
	12	0	<u>0</u>	<u>0</u>	a	0 0	0 0
	21	a	a	0	0	0 0	0 0
	22	0	0	0	0	0 1	0 0

		GM1-	GM2-	GM3-	GM3-	GM4+	GM5+
σ''	α''	1	1	1 1	1 1	1 1 1	1 1 1
$\sigma\sigma'$	$\alpha\alpha'$	1	1	1 2	1 2	1 2 3	1 2 3
11	11	d	d	b 0	0 b	0 0 0	0 0 0
	12	0	0	0 0	0 0	0 0 a	0 0 $\frac{a}{a}$
	21	0	0	0 0	0 0	0 0 a	0 0 $\frac{a}{a}$
	22	\overline{d}	d	0 c	$c^* \cdot 0$	0 0 0	0 0 0
22	11	d	d	c 0	0 c^*	0 0 0	0 0 0
	12	0	0	0 0	0 0	0 a 0	0 $\frac{a}{a}$ 0
	21	0	0	0 0	0 0	0 a 0	0 a 0
	22	d	d	0 b	b 0	0 0 0	0 0 0
33	11	d	d	$c^* 0$	0 c	0 0 0	0 0 0
	12	0	0	0 0	0 0	a 0 0	$\frac{a}{a}$ 0 0
	21	0	0	0 0	0 0	a 0 0	$\frac{a}{a}$ 0 0
	22	\overline{d}	d	0 c^*	c 0	0 0 0	0 0 0

Tablica V

$X1 \otimes X2 \rightarrow GM \oplus M$

		M1+	M2+	M3+	M4+	M5-	M5-
σ''	α''	1 2 3	1 2 3	1 2 3	1 2 3	1 1 2 2 3 3	1 1 2 2 3 3
$\sigma\sigma'$	$\alpha\alpha'$	1 1 1	1 1 1	1 1 1	1 1 1	1 2 1 2 1 2	1 2 1 2 1 2
12	11	0	0	0	0	1 0	0 0
	12	a	a	0	0	0 0	0 0
	21	0	0	a	a	0 0	0 0
	22	0	0	0	0	0 0	0 1
13	11		0	0	0		0 0
	12	0	0	a	$\frac{0}{a}$		0 0
	21	$\frac{0}{a}$	a	0	0		0 0
	22	0	0	0	0		0 1
21	11	0	0	0	0	0 0	1 0
	12	$\frac{0}{a}$	0	a	$\frac{0}{a}$	0 0	0 0
	21	$\frac{0}{a}$	a	0	0	0 0	0 0
	22	0	0	0	0	0 1	0 0
23	11	0	0	0	0	1 0	0 0
	12	a	a	0	0	0 0	0 0
	21	0	0	a	a	0 0	0 0
	22	0	0	0	0	0 0	0 1
31	11		0	0	0		1 0
	12	0	a	0	0		0 0
	21	0	0	a	a		0 0
	22	0	0	0	0		0 0
32	11	0	0	0	0	0 0	1 0
	12	$\frac{0}{a}$	0	a	$\frac{0}{a}$	0 0	0 0
	21	$\frac{0}{a}$	a	0	0	0 0	0 0
	22	0	0	0	0	0 1	0 0

		GM1+	GM2+	GM3+	GM3+	GM4-	GM5-
σ''		1	1	1 1	1 1	1 1 1	1 1 1
α''		1	1	1 2	1 2	1 2 3	1 2 3
σ	α'						
11	11	d	d	b 0	0 b	0 0 0	0 0 0
	12	0	0	0 0	0 0	0 0 $\frac{a}{a}$	0 0 a
	21	0	0	0 0	0 0	0 0 $\frac{a}{a}$	0 0 a
	22	d	d	0 c	c* 0	0 0 0	0 0 0
22	11	d	d	c 0	0 c*	0 0 0	0 0 0
	12	0	0	0 0	0 0	0 $\frac{a}{a}$ 0	0 a 0
	21	0	0	0 0	0 0	0 $\frac{a}{a}$ 0	0 a 0
	22	d	d	0 b	b 0	0 0 0	0 0 0
33	11	d	d	c* 0	0 c	0 0 0	0 0 0
	12	0	0	0 0	0 0	$\frac{a}{a}$ 0 0	a 0 0
	21	0	0	0 0	0 0	$\frac{a}{a}$ 0 0	a 0 0
	22	d	d	0 c*	c 0	0 0 0	0 0 0

Tablica VI

$X2 \otimes X2 \rightarrow GM \oplus M$

		M1-	M2-	M3-	M4-	M5+	M5+
σ''		1 2 3	1 2 3	1 2 3	1 2 3	1 1 2 2 3 3	1 1 2 2 3 3
α''		1 1 1	1 1 1	1 1 1	1 1 1	1 2 1 2 1 2	1 2 1 2 1 2
σ	α'						
12	11	0	0	0	0	1 0	0 0
	12	a	a	0	0	0 0	0 0
	21	0	0	a	a	0 0	0 0
	22	0	0	0	0	0 0	0 1
13	11		0		0		
	12	0	0	0	0	0 0	1 0
	21	a	$\frac{a}{a}$	$\frac{a}{a}$	a	0 0	0 0
	22	0	0	0	0	0 1	0 0
21	11	0	0	0	0	0 0	1 0
	12	0	0	0	0	0 0	0 0
	21	a	$\frac{a}{a}$	$\frac{a}{a}$	a	0 0	0 0
	22	0	0	0	0	0 1	0 0
23	11	0	0	0	0	1 0	0 0
	12	a	a	0	0	0 0	0 0
	21	0	0	a	a	0 0	0 0
	22	0	0	0	0	0 0	0 1
31	11		0		0		
	12	0	0	0	0	1 0	0 0
	21	0	0	a	a	0 0	0 0
	22	0	0	0	0	0 0	0 1
32	11	0	0	0	0	0 0	1 0
	12	0	0	0	a	0 0	0 0
	21	a	$\frac{a}{a}$	0	0	0 0	0 0
	22	0	0	0	0	0 1	0 0

		GM4+	GM5+	GM4-	GM5-
σ	α	1 1 1	1 1 1	1 1 1	1 1 1
		1 2 3	1 2 3	1 2 3	1 2 3
11	11	0 0 0	0 0 0	a 0 0	a 0 0
	12	a 0 0	a 0 0	0 0 0	0 0 0
	21	0 a 0	0 a 0	0 0 0	0 0 0
	22	0 0 0	0 0 0	0 a 0	0 a 0
22	11	0 0 0	0 0 0	0 0 a	0 0 a
	12	0 0 a	0 0 a	0 0 0	0 0 0
	21	a 0 0	a 0 0	0 0 0	0 0 0
	22	0 0 0	0 0 0	a 0 0	a 0 0
33	11	0 0 0	0 0 0	0 a 0	0 a 0
	12	0 a 0	0 a 0	0 0 0	0 0 0
	21	0 0 a	0 0 a	0 0 0	0 0 0
	22	0 0 0	0 0 0	0 0 a	0 0 a

Tablica VII

$X1 \otimes X3 \rightarrow GM \oplus M$

		M3+	M4+	M3-	M4-	M5+	M5-
σ	α	1 2 3	1 2 3	1 2 3	1 2 3	1 1 2 2 3 3	1 1 2 2 3 3
		1 1 1	1 1 1	1 1 1	1 1 1	1 2 1 2 1 2	1 2 1 2 1 2
12	11	0	0	a	a	0 0	0 0
	12	a	a	0	0	0 0	0 0
	21	0	0	0	0	1 0	0 0
	22	0	0	0	0	0 0	1 0
13	11	0	0	0	0	0 0	0 1
	12	0	0	0	0	0 1	0 0
	21	a	a	0	0	0 0	0 0
	22	0	0	a	a	0 0	0 0
21	11	0	0	0	0	0 0	0 1
	12	0	0	0	0	0 1	0 0
	21	a	a	0	0	0 0	0 0
	22	0	0	a	a	0 0	0 0
23	11	0	0	a	a	0 0	0 0
	12	a	a	0 0	0 0	0 0	0 0
	21	0	0	0	0	1 0	0 0
	22	0	0	0	0	0 0	1 0
31	11	0	0	a	a	0 0	0 0
	12	a	a	0 0	0 0	0 0	0 0
	21	0	0	0	0	1 0	0 0
	22	0	0	0	0	0 0	1 0
32	11	0	0	0	0	0 0	0 1
	12	0	0	0	0	0 1	0 0
	21	a	a	0	0	0 0	0 0
	22	0	0	a	a	0 0	0 0

		GM4+	GM5+	GM4-	GM5-
σ''		1 1 1	1 1 1	1 1 1	1 1 1
α''		1 2 3	1 2 3	1 2 3	1 2 3
σ	α				
11	11	a 0 0	a 0 0	0 0 0	0 0 0
	12	0 0 0	0 0 0	a 0 0	a 0 0
	21	0 0 0	0 0 0	0 a 0	0 a 0
	22	0 a 0	0 a 0	0 0 0	0 0 0
22	11	0 0 a	0 0 a	0 0 0	0 0 0
	12	0 0 0	0 0 0	0 0 a	0 0 a
	21	0 0 0	0 0 0	a 0 0	a 0 0
	22	a 0 0	a 0 0	0 0 0	0 0 0
33	11	0 a 0	0 a 0	0 0 0	0 0 0
	12	0 0 0	0 0 0	0 a 0	0 a 0
	21	0 0 0	0 0 0	0 0 a	0 0 a
	22	0 0 a	0 0 a	0 0 0	0 0 0

Tablica VIII

$X2 \otimes X3 \rightarrow GM \oplus M$

		M3+	M4+	M3-	M4-	M5+	M5-
σ''		1 2 3	1 2 3	1 2 3	1 2 3	1 1 2 2 3 3	1 1 2 2 3 3
α''		1 1 1	1 1 1	1 1 1	1 1 1	1 2 1 2 1 2	1 2 1 2 1 2
σ	α						
12	11	a	a	0	0	0 0	0 0
	12	0 0	0 0	a	a	0 0	0 0
	21	0 0	0 0	0 0	0 0	0 0	1 0
	22	0	0	0	0	1 0	0 0
13	11		0		0		0 1
	12		0 0		0 0		0 0
	21		0 0		a 0		0 0
	22		a 0		0		0 0
21	11	0	0	0	0	0 1	0 0
	12	0 0	0 0	0 0	0 0	0 0	0 1
	21	0 0	0 0	0 a	a 0	0 0	0 0
	22	a 0	a 0	0	0	0 0	0 0
23	11	a	a	0	0	0 0	0 0
	12	0 0	0 0	a 0	a 0	0 0	0 0
	21	0 0	0 0	0 0	0 0	0 0	1 0
	22	0	0	0	0	1 0	0 0
31	11		a		0		0 0
	12		0 0		a 0		0 0
	21		0 0		0 0		1 0
	22		0		0		0 0
32	11	0	0	0	0	0 1	0 0
	12	0 0	0 0	0 0	0 0	0 0	0 1
	21	0 0	0 0	a 0	a 0	0 0	0 0
	22	a 0	a 0	0	0	0 0	0 0

		GM4+	GM5+	GM4-	GM5-
σ''		1 1 1	1 1 1	1 1 1	1 1 1
α''		1 2 3	1 2 3	1 2 3	1 2 3
$\sigma\sigma'$	$\alpha\alpha'$				
11	11	0 a 0	0 a 0	0 0 0	0 0 0
	12	0 0 0	0 0 0	0 a 0	0 a 0
	21	0 0 0	0 0 0	a 0 0	a 0 0
	22	a 0 0	a 0 0	0 0 0	0 0 0
22	11	a 0 0	a 0 0	0 0 0	0 0 0
	12	0 0 0	0 0 0	a 0 0	a 0 0
	21	0 0 0	0 0 0	0 0 a	0 0 a
	22	0 0 a	0 0 a	0 0 0	0 0 0
33	11	0 0 a	0 0 a	0 0 0	0 0 0
	12	0 0 0	0 0 0	0 0 a	0 0 a
	21	0 0 0	0 0 0	0 a 0	0 a 0
	22	0 a 0	0 a 0	0 0 0	0 0 0

Tablica X

$$X1 \otimes X4 \rightarrow GM \oplus M$$

		M1+	M2+	M1-	M2-	M5+	M5-
σ''		1 2 3	1 2 3	1 2 3	1 2 3	1 1 2 2 3 3	1 1 2 2 3 3
α''		1 1 1	1 1 1	1 1 1	1 1 1	1 2 1 2 1 2	1 2 1 2 1 2
$\sigma\sigma'$	$\alpha\alpha'$						
12	11	0	0	0	0	0 1	0 0
	12	0	0	0	0	0 0	0 1
	21	0	0	a	a	0 0	0 0
	22	a	a	0	0	0 0	0 0
13	11		a		0		0 0
	12		0 0		a		0 0
	21		0 0		0 0		0 0
	22		0		0	1 0	0 0
21	11	a	a	0	0	0 0	0 0
	12	0 0	0 0	a	a	0 0	0 0
	21	0 0	0 0	0 0	0 0	0 0	0 0
	22	0	0	0	0	1 0	0 0
23	11	0	0	0	0	0 1	0 0
	12	0 0	0 0	0 0	0 0	0 0	0 1
	21	0 0	0 0	a	a	0 0	0 0
	22	a	a	0	0	0 0	0 0
31	11		0		0		0 0
	12		0 0		0 0	0 1	0 0
	21		0 0		a	0 0	0 1
	22		a		0	0 0	0 0
32	11	a	a	0	0	0 0	0 0
	12	0	0 0	a	a	0 0	0 0
	21	0	0	0	0	0 0	1 0
	22	0	0	0	0	1 0	0 0

		GM4+	GM5+	GM4-	GM5-
σ''		1 1 1	1 1 1	1 1 1	1 1 1
α''		1 2 3	1 2 3	1 2 3	1 2 3
$\sigma\sigma'$	$\alpha\alpha'$				
11	11	0 0 0	0 0 0	0 a 0	0 a 0
	12	0 a 0	0 a 0	0 0 0	0 0 0
	21	a 0 0	a 0 0	0 0 0	0 0 0
	22	0 0 0	0 0 0	a 0 0	a 0 0
22	11	0 0 0	0 0 0	a 0 0	a 0 0
	12	a 0 0	a 0 0	0 0 0	0 0 0
	21	0 0 a	0 0 a	0 0 0	0 0 0
	22	0 0 0	0 0 0	0 0 a	0 0 a
33	11	0 0 0	0 0 0	0 0 a	0 0 a
	12	0 0 a	0 0 a	0 0 0	0 0 0
	21	0 a 0	0 a 0	0 0 0	0 0 0
	22	0 0 0	0 0 0	0 a 0	0 a 0

Tablica XI

$X2 \otimes X4 \rightarrow GM \oplus M$

		M1+	M2+	M1-	M2-	M5+	M5-
σ''		1 2 3	1 2 3	1 2 3	1 2 3	1 1 2 2 3 3	1 1 2 2 3 3
α''		1 1 1	1 1 1	1 1 1	1 1 1	1 2 1 2 1 2	1 2 1 2 1 2
$\sigma\sigma'$	$\alpha\alpha'$						
12	11	0	0	0	0	0 0	0 1
	12	0	0	0	0	0 1	0 0
	21	a	a	0	0	0 0	0 0
	22	0	0	a	a	0 0	0 0
13	11		0	a			0 0
	12	a	a	0	0	0 0	0 0
	21	0	0	0	0	1 0	0 0
	22	0	0	0	0	0 0	1 0
21	11	a	0	a	a	0 0	0 0
	12	0	a	0	0	0 0	0 0
	21	0	0	0	0	1 0	0 0
	22	0	0	0	0	0 0	1 0
23	11	0	0	0	0	0 0	0 1
	12	0	0	0	0	0 1	0 0
	21	a	a	0	0	0 0	0 0
	22	0	0	a	a	0 0	0 0
31	11		0	0	0		0 1
	12	a	a	0	0	0 1	0 0
	21	0	0	0	0	0 0	0 0
	22	0	0	a	a	0 0	0 0
32	11	a	0	a	a	0 0	0 0
	12	0	a	0	0	0 0	0 0
	21	0	0	0	0	1 0	0 0
	22	0	0	0	0	0 0	1 0

		GM4+	GM5+	GM4-	GM5-
σ''		1 1 1	1 1 1	1 1 1	1 1 1
α''		1 2 3	1 2 3	1 2 3	1 2 3
σ	α'				
11	11	0 0 0	0 0 0	0 0 a	0 0 a
	12	0 0 a	0 0 a	0 0 0	0 0 0
	21	0 0 a	0 0 a	0 0 0	0 0 0
	22	0 0 0	0 0 0	0 0 a	0 0 a
22	11	0 0 0	0 0 0	0 a 0	0 a 0
	12	0 a 0	0 a 0	0 0 0	0 0 0
	21	0 a 0	0 a 0	0 0 0	0 0 0
	22	0 0 0	0 0 0	0 a 0	0 a 0
33	11	0 0 0	0 0 0	a 0 0	a 0 0
	12	a 0 0	a 0 0	0 0 0	0 0 0
	21	a 0 0	a 0 0	0 0 0	0 0 0
	22	0 0 0	0 0 0	a 0 0	a 0 0

Tablica XII

$X3 \otimes X4 \rightarrow GM \oplus M$

		M 5+	M 5+	M 5-	M 5-
σ''		1 1 2 2 3 3	1 1 2 2 3 3	1 1 2 2 3 3	1 1 2 2 3 3
α''		1 2 1 2 1 2	1 2 1 2 1 2	1 2 1 2 1 2	1 2 1 2 1 2
σ	α'				
12	11	0 0	0 0	1 0	0 0
	12	1 0	0 0	0 0	0 0
	21	0 0	1 0	0 0	0 0
	22	0 0	0 0	0 0	1 0
13	11		0 0		0 0
	12		0 0		0 0
	21		0 1		0 0
	22		0 0		0 1
21	11	0 0	0 0	0 0	0 1
	12	0 0	0 1	0 0	0 0
	21	0 1	0 0	0 0	0 0
	22	0 0	0 0	0 1	0 0
23	11	0 0	0 0	1 0	0 0
	12	1 0	0 0	0 0	0 0
	21	0 0	1 0	0 0	0 0
	22	0 0	0 0	0 0	1 0
31	11		0 0		0 0
	12		1 0		0 0
	21		0 0		0 0
	22		0 0		1 0
32	11	0 0	0 0	0 0	0 1
	12	0 0	0 1	0 0	0 0
	21	0 1	0 0	0 0	0 0
	22	0 0	0 0	0 1	0 0

VI. Zastosowania współczynników Clebscha-Gordana.

Jednym z podstawowych zadań fizyki ciała stałego jest wyznaczenie widm energetycznych elektronów czy też quasicząstek w punktach charakteryzujących się wysoką symetrią np. Γ , X , M , R (vide rys. 2). Ten ostatni dla związków o strukturze A-15 wyróżnia się stanem o najwyższej degeneracji wynikającej z istnienia sześciowymiarowej reprezentacji $R(4)$ grupy $G(\vec{k}_R)$. Właśnie na bazie tej reprezentacji przedstawiony został w pracy [30] nowy model elektronowej struktury związków typu A-15.

Sposoby konstruowania widm są różne ([25] rozdział 4). Jednym z nich jest metoda $\vec{k} \cdot \vec{p}$, która w istocie jest modyfikacją zwykłej teorii zaburzeń dla widma zdegenerowanego ([26], [27] §21). Pozwala ona ustalić ogólną postać macierzy hamiltonianu $\mathcal{H}(\vec{k})$ i otrzymać jawne wyrażenia na stałe wchodzące do hamiltonianu \mathcal{H} poprzez odpowiednie elementy macierzowe. Jednakże zazwyczaj wystarczy znać tylko ogólną postać hamiltonianu, bowiem jest regułą, że stałe wchodzące do tego hamiltonianu wyznacza się z danych doświadczalnych. Dla jej otrzymania wykorzystuje się tzw. metodę niezmienników [28], przedstawioną i przedyskutowaną szczegółowo przez Bira i Pikusa ([27] §25, 26). Istotnym krokiem naprzód jest wykazanie [29], że tzw. macierze bazowe występujące w powyższej metodzie są współczynnikami Clebscha-Gordana.

Hamiltonian \mathcal{H} zależy w ogólności nie tylko od wektora falowego \vec{k} , ale też od pól zewnętrznych magnetycznego, elektrycznego oraz od składowych tensora deformacji. Wszystkie te wielkości, oznaczane przez \mathcal{H} , możemy rozbić na składowe $\mathcal{H}_{\xi}^{(k'')(l'')}$, które transformują się zgodnie z reprezentacjami $D^{(k'')(l'')}$ występującymi co najwyżej raz w rozkładzie iloczynu Kroneckera $D^{(k)(l)*} \otimes D^{(k')(l)}$ na sumę prostą. Wtedy elementy macierzowe

wyrażają się następująco ([29] wzór (2.15))

$$\mathcal{H}(\mathcal{H})_{\mu\nu} = \sum_{\vec{k}'' l''} \alpha_{\vec{k}'' l''} \sum_{\xi} U_{\mu\nu, (k'')(l'')\xi} \mathcal{H}_{\xi}^{(k'')(l'')*}$$

gdzie $\alpha_{\vec{k}'' l''}$ - pewne stałe oraz μ, ν, ξ należy traktować jako wskaźniki podwójne (aby być w zgodzie z wprowadzonymi poprzednio ozna-

czieniami współczynników C-G uwzględniającymi blokową strukturę zbudowanych z nich macierzy).

Powyższy wzór łatwo uogólnić na wyższe krotności występowania $D^{(\vec{k}'')(l'')}$ w $D^{(\vec{k})(l)*} \otimes D^{(\vec{k})(l)}$.

Widzimy więc, że w tym przypadku mają zastosowanie współczynniki C-G dla iloczynów Kroneckera postaci $D^{(\vec{k})(l)} \otimes D^{(\vec{k}')(l')}$, gdzie $\vec{k} = \vec{k}'$ i $l = l'$ (reprezentacje sprzężone $D^{(\vec{k})(l)*}$ w większości przypadków pokrywają się z $D^{(\vec{k})(l)}$ ze względu na ich częstą rzeczywistość).

Przy rozważaniu amplitud przejścia z jednego stanu elektronowego do drugiego istotną sprawą jest wyznaczenie reguł wyboru ([14] §6.3). Zagadnienie to jest równoważne badaniu rozkładów iloczynów Kroneckera na sumy proste reprezentacji grupy symetrii, względem której dany układ fizyczny jest niezmienniczy. Współczynniki Clebscha-Gordana pozwalają tutaj konstruować funkcje bazowe dla reprezentacji zawartych w tych iloczynach.

Korzystając z (IV.2.2) przedstawimy przykładowo kilka układów funkcji (z których każda jest kombinacją liniową funkcji iloczynowych), będących bazami odpowiednich reprezentacji zawartych w iloczynach Kroneckera.

Wprowadźmy wprawdzie dodatkowe oznaczenie $\omega = \exp(2\pi i/3)$. Wtedy (vide str. 25) $c = b\omega = \omega/\sqrt{3}$, $s = a\omega = \omega/\sqrt{2}$.

Z tabl. II dla $R(2) \otimes R(4) \rightarrow GM(4+)$ mamy

$$\begin{aligned} \psi_1^{(\vec{k}_R)(4+)} &\equiv \psi_{11}^{(\vec{k}_R)(4+)} = \sum_{\delta\alpha\delta'\alpha'} U_{\delta\alpha\delta'\alpha'}^{(\vec{k}_R)(2) \otimes (\vec{k}_R)(4), (\vec{k}_R)(4+)_1} \psi_{\delta\alpha}^{(\vec{k}_R)(2)} \psi_{\delta'\alpha'}^{(\vec{k}_R)(4)} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_{11}^{(\vec{k}_R)(2)} \psi_{14}^{(\vec{k}_R)(4)} + \psi_{12}^{(\vec{k}_R)(2)} \psi_{11}^{(\vec{k}_R)(4)} \right) \\ &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_1^{(\vec{k}_R)(2)} \psi_4^{(\vec{k}_R)(4)} + \psi_2^{(\vec{k}_R)(2)} \psi_1^{(\vec{k}_R)(4)} \right), \\ \psi_2^{(\vec{k}_R)(4+)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\omega \psi_1^{(\vec{k}_R)(2)} \psi_6^{(\vec{k}_R)(4)} + \omega^2 \psi_2^{(\vec{k}_R)(2)} \psi_2^{(\vec{k}_R)(4)} \right), \\ \psi_3^{(\vec{k}_R)(4+)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\omega^2 \psi_1^{(\vec{k}_R)(2)} \psi_5^{(\vec{k}_R)(4)} + \omega \psi_2^{(\vec{k}_R)(2)} \psi_3^{(\vec{k}_R)(4)} \right); \end{aligned}$$

dla $R(3) \otimes R(4) \rightarrow GM(5-)$

$$\psi_1^{(\vec{k}_R)(5-)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_1^{(\vec{k}_R)(3)} \psi_1^{(\vec{k}_R)(4)} - \psi_2^{(\vec{k}_R)(3)} \psi_4^{(\vec{k}_R)(4)} \right),$$

$$\Psi_2^{(\vec{k}_r)(5-)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\omega^2 \Psi_1^{(\vec{k}_r)(3)} \Psi_2^{(\vec{k}_r)(4)} - \omega \Psi_2^{(\vec{k}_r)(3)} \Psi_6^{(\vec{k}_r)(4)} \right),$$

$$\Psi_3^{(\vec{k}_r)(5-)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\omega \Psi_1^{(\vec{k}_r)(3)} \Psi_3^{(\vec{k}_r)(4)} - \omega^2 \Psi_2^{(\vec{k}_r)(3)} \Psi_5^{(\vec{k}_r)(4)} \right).$$

Z tabl. III dla $R(4) \otimes R(4) \rightarrow GM(1+)$

$$\Psi_1^{(\vec{k}_r)(1+)} = \frac{1}{\sqrt{6}} \left(\Psi_1^{(\vec{k}_r)(4)} \Psi_1^{(\vec{k}_r)(4)} + \Psi_2^{(\vec{k}_r)(4)} \Psi_2^{(\vec{k}_r)(4)} + \Psi_3^{(\vec{k}_r)(4)} \Psi_3^{(\vec{k}_r)(4)} + \right. \\ \left. + \Psi_4^{(\vec{k}_r)(4)} \Psi_4^{(\vec{k}_r)(4)} + \Psi_5^{(\vec{k}_r)(4)} \Psi_5^{(\vec{k}_r)(4)} + \Psi_6^{(\vec{k}_r)(4)} \Psi_6^{(\vec{k}_r)(4)} \right);$$

dla $R(4) \otimes R(4) \rightarrow GM(3+)$

$$\Psi_1^{(\vec{k}_r)(3+)} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\Psi_1^{(\vec{k}_r)(4)} \Psi_1^{(\vec{k}_r)(4)} + \omega^2 \Psi_2^{(\vec{k}_r)(4)} \Psi_2^{(\vec{k}_r)(4)} + \omega \Psi_3^{(\vec{k}_r)(4)} \Psi_3^{(\vec{k}_r)(4)} \right),$$

$$\Psi_2^{(\vec{k}_r)(3+)} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\Psi_4^{(\vec{k}_r)(4)} \Psi_4^{(\vec{k}_r)(4)} + \omega^2 \Psi_5^{(\vec{k}_r)(4)} \Psi_5^{(\vec{k}_r)(4)} + \omega \Psi_6^{(\vec{k}_r)(4)} \Psi_6^{(\vec{k}_r)(4)} \right)$$

lub

$$\Psi_1^{(\vec{k}_r)(3+)} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\Psi_4^{(\vec{k}_r)(4)} \Psi_4^{(\vec{k}_r)(4)} + \omega \Psi_5^{(\vec{k}_r)(4)} \Psi_5^{(\vec{k}_r)(4)} + \omega^2 \Psi_6^{(\vec{k}_r)(4)} \Psi_6^{(\vec{k}_r)(4)} \right),$$

$$\Psi_2^{(\vec{k}_r)(3+)} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\Psi_1^{(\vec{k}_r)(4)} \Psi_1^{(\vec{k}_r)(4)} + \omega \Psi_2^{(\vec{k}_r)(4)} \Psi_2^{(\vec{k}_r)(4)} + \omega^2 \Psi_3^{(\vec{k}_r)(4)} \Psi_3^{(\vec{k}_r)(4)} \right)$$

dla $R(4) \otimes R(4) \rightarrow GM(3-)$

$$\Psi_1^{(\vec{k}_r)(3-)} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\Psi_1^{(\vec{k}_r)(4)} \Psi_4^{(\vec{k}_r)(4)} + \omega^2 \Psi_2^{(\vec{k}_r)(4)} \Psi_6^{(\vec{k}_r)(4)} + \omega \Psi_3^{(\vec{k}_r)(4)} \Psi_5^{(\vec{k}_r)(4)} \right),$$

$$\Psi_2^{(\vec{k}_r)(3-)} = -\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\Psi_4^{(\vec{k}_r)(4)} \Psi_1^{(\vec{k}_r)(4)} + \omega^2 \Psi_5^{(\vec{k}_r)(4)} \Psi_3^{(\vec{k}_r)(4)} + \omega \Psi_6^{(\vec{k}_r)(4)} \Psi_2^{(\vec{k}_r)(4)} \right)$$

lub

$$\Psi_1^{(\vec{k}_r)(3-)} = -\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\Psi_4^{(\vec{k}_r)(4)} \Psi_1^{(\vec{k}_r)(4)} + \omega \Psi_5^{(\vec{k}_r)(4)} \Psi_3^{(\vec{k}_r)(4)} + \omega^2 \Psi_6^{(\vec{k}_r)(4)} \Psi_2^{(\vec{k}_r)(4)} \right)$$

$$\Psi_2^{(\vec{k}_r)(3-)} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\Psi_1^{(\vec{k}_r)(4)} \Psi_4^{(\vec{k}_r)(4)} + \omega \Psi_2^{(\vec{k}_r)(4)} \Psi_6^{(\vec{k}_r)(4)} + \omega^2 \Psi_3^{(\vec{k}_r)(4)} \Psi_5^{(\vec{k}_r)(4)} \right),$$

gdzie dodatkowy wskaźnik u góry $\gamma=1,2$ odnosi się do krotności występowania reprezentacji indukowanych z $GM(3+)$, $GM(3-)$ w iloczynie Kroneckera.

Z tabl. IV dla $X(1) \otimes X(1) \rightarrow GM(1+)$

$$\Psi_1^{(\vec{k}_x)(1+)} = \frac{1}{\sqrt{6}} \left(\Psi_{11}^{(\vec{k}_x)(1)} \Psi_{11}^{(\vec{k}_x)(1)} + \Psi_{12}^{(\vec{k}_x)(1)} \Psi_{12}^{(\vec{k}_x)(1)} + \Psi_{21}^{(\vec{k}_x)(1)} \Psi_{21}^{(\vec{k}_x)(1)} + \right. \\ \left. + \Psi_{22}^{(\vec{k}_x)(1)} \Psi_{22}^{(\vec{k}_x)(1)} + \Psi_{31}^{(\vec{k}_x)(1)} \Psi_{31}^{(\vec{k}_x)(1)} + \Psi_{32}^{(\vec{k}_x)(1)} \Psi_{32}^{(\vec{k}_x)(1)} \right);$$

dla $X(1) \otimes X(1) \rightarrow GM(2+)$

$$\psi_1^{(\vec{k}_r)(2+)} = \frac{1}{\sqrt{6}} \left(\psi_{11}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{11}^{(\vec{k}_x)(1)} - \psi_{12}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{12}^{(\vec{k}_x)(1)} + \psi_{21}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{21}^{(\vec{k}_x)(1)} - \right. \\ \left. - \psi_{22}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{22}^{(\vec{k}_x)(1)} + \psi_{31}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{31}^{(\vec{k}_x)(1)} - \psi_{32}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{32}^{(\vec{k}_x)(1)} \right);$$

dla $X(1) \otimes X(1) \rightarrow GM(3+)$

$$\psi_1^{(\vec{k}_r)(3+)_1} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\psi_{11}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{11}^{(\vec{k}_x)(1)} + \omega \psi_{21}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{21}^{(\vec{k}_x)(1)} + \omega^2 \psi_{31}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{31}^{(\vec{k}_x)(1)} \right),$$

$$\psi_2^{(\vec{k}_r)(3+)_1} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\omega \psi_{12}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{12}^{(\vec{k}_x)(1)} + \psi_{22}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{22}^{(\vec{k}_x)(1)} + \omega^2 \psi_{32}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{32}^{(\vec{k}_x)(1)} \right)$$

lub

$$\psi_1^{(\vec{k}_r)(3+)_2} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\omega^2 \psi_{12}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{12}^{(\vec{k}_x)(1)} + \psi_{22}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{22}^{(\vec{k}_x)(1)} + \omega \psi_{32}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{32}^{(\vec{k}_x)(1)} \right),$$

$$\psi_2^{(\vec{k}_r)(3+)_2} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\psi_{11}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{11}^{(\vec{k}_x)(1)} + \omega^2 \psi_{21}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{21}^{(\vec{k}_x)(1)} + \omega \psi_{31}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{31}^{(\vec{k}_x)(1)} \right)$$

dla $X(1) \otimes X(1) \rightarrow GM(4-)$

$$\psi_1^{(\vec{k}_r)(4-)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_{31}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{32}^{(\vec{k}_x)(1)} - \psi_{32}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{31}^{(\vec{k}_x)(1)} \right),$$

$$\psi_2^{(\vec{k}_r)(4-)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_{21}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{22}^{(\vec{k}_x)(1)} - \psi_{22}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{21}^{(\vec{k}_x)(1)} \right),$$

$$\psi_3^{(\vec{k}_r)(4-)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_{11}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{12}^{(\vec{k}_x)(1)} - \psi_{12}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{11}^{(\vec{k}_x)(1)} \right);$$

dla $X(1) \otimes X(1) \rightarrow GM(5-)$

$$\psi_1^{(\vec{k}_r)(5-)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_{31}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{32}^{(\vec{k}_x)(1)} + \psi_{32}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{31}^{(\vec{k}_x)(1)} \right),$$

$$\psi_2^{(\vec{k}_r)(5-)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_{21}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{22}^{(\vec{k}_x)(1)} + \psi_{22}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{21}^{(\vec{k}_x)(1)} \right),$$

$$\psi_3^{(\vec{k}_r)(5-)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_{11}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{12}^{(\vec{k}_x)(1)} + \psi_{12}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{11}^{(\vec{k}_x)(1)} \right).$$

Z tabl. V dla $X(1) \otimes X(2) \rightarrow M(1+)$

$$\psi_{11}^{(\vec{k}_M)(1+)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_{11}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{22}^{(\vec{k}_x)(2)} - \psi_{22}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{11}^{(\vec{k}_x)(2)} \right),$$

$$\psi_{21}^{(\vec{k}_M)(1+)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_{21}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{32}^{(\vec{k}_x)(2)} - \psi_{32}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{21}^{(\vec{k}_x)(2)} \right),$$

$$\psi_{31}^{(\vec{k}_M)(1+)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\psi_{12}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{31}^{(\vec{k}_x)(2)} + \psi_{31}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{12}^{(\vec{k}_x)(2)} \right);$$

dla $X(1) \otimes X(2) \rightarrow M(5-)$

$$\psi_{11}^{(\vec{k}_M)(5-)_1} = \psi_{11}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{21}^{(\vec{k}_x)(2)}, \quad \psi_{12}^{(\vec{k}_M)(5-)_1} = \psi_{22}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{12}^{(\vec{k}_x)(2)},$$

$$\psi_{21}^{(\vec{k}_M)(5-)_1} = \psi_{21}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{31}^{(\vec{k}_x)(2)}, \quad \psi_{22}^{(\vec{k}_M)(5-)_1} = \psi_{32}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{22}^{(\vec{k}_x)(2)},$$

$$\psi_{31}^{(\vec{k}_M)(5-)_1} = \psi_{31}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{11}^{(\vec{k}_x)(2)}, \quad \psi_{32}^{(\vec{k}_M)(5-)_1} = \psi_{12}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{32}^{(\vec{k}_x)(2)}$$

lub

$$\psi_{11}^{(\vec{k}_M)(5-)_2} = \psi_{21}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{11}^{(\vec{k}_x)(2)}, \quad \psi_{12}^{(\vec{k}_M)(5-)_2} = \psi_{12}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{22}^{(\vec{k}_x)(2)},$$

$$\psi_{21}^{(\vec{k}_M)(5-)_2} = \psi_{31}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{21}^{(\vec{k}_x)(2)}, \quad \psi_{22}^{(\vec{k}_M)(5-)_2} = \psi_{22}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{32}^{(\vec{k}_x)(2)},$$

$$\psi_{31}^{(\vec{k}_M)(5-)_2} = \psi_{11}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{31}^{(\vec{k}_x)(2)}, \quad \psi_{32}^{(\vec{k}_M)(5-)_2} = \psi_{32}^{(\vec{k}_x)(1)} \psi_{12}^{(\vec{k}_x)(2)}.$$

Przejdźmy teraz do układów oddziaływających. Z prac [31a, 31b] wynika, że dla ramanowskiego rozpraszania na fononach lub innych wzbudzeniach w kryształach elementy tensora rozpraszania pierwszego rzędu są określoną liniową kombinacją współczynników C-G, a elementy tensora drugiego rzędu ich biliniową kombinacją.

Na zakończenie rozważmy sytuację, której interpretacja fizyczna jest prosta. Niech przed oddziaływaniem w polu krystalicznym stany dwóch cząstek opisane będą przez funkcje bazowe reprezentacji $D^{(\vec{k})(l)}$ i $D^{(\vec{k}')(l')}$. Po oddziaływaniu stany cząstek opisane są przez funkcje stanowiące bazy dla reprezentacji $D^{(\vec{k}'')(l'')}$ zawartych w iloczynie $D^{(\vec{k})(l)} \otimes D^{(\vec{k}')(l')}$. Funkcje stanów cząstek po oddziaływaniu wyrażają się za pomocą określonych przez współczynniki Clebscha-Gordana liniowych kombinacji iloczynów funkcji stanów cząstek przed oddziaływaniem.

Zauważmy na koniec, że w przypadku oddziaływań międzypasmowych w kryształach mają zastosowanie współczynniki Clebscha-Gordana dla iloczynów Kroneckera postaci $D^{(\vec{k})(l)} \otimes D^{(\vec{k}')(l')}$, gdzie $\vec{k} = \vec{k}'$ oraz $l \neq l'$.

VII. Literatura.

- [1] B. T. Matthias, T. H. Geballe and V. B. Compton, *Rev. Mod. Phys.* 35 (1963) 1.
- [2] M. Weger and I. B. Goldberg, *Solid State Phys.*, edited by H. Ehrenreich, F. Seitz and D. Turnbull (Academic Press, New York) 28 (1973) 1.
- [3] L. R. Testardi, in *Physical Acoustics*, edited by W. P. Mason and R. N. Thurston (Academic Press, New York) 1973, Chap. 10, p. 193
- [4] L. R. Testardi, *Rev. Mod. Phys.* 47 (1975) 637.
- [5] G. Bilbro and L. W. McMillan, *Phys. Rev.* B 14 (1976) 1887.
- [6] R. N. Bhatt and L. W. McMillan, *Phys. Rev.* B 14 (1976) 1007.
- [7] M. V. Jarić and J. L. Birman, *Phys. Rev.* B 16 (1977) 2564.
- [8a] J. L. Birman, *Phys. Rev. Lett.* 17 (1966) 1216.
- [8b] J. L. Birman, *Chem. Phys. Lett.* 1 (1967) 343.
- [8c] A. P. Cracknell, *Adv. Phys.* 23 (1974) 673, 852.
- [9] L. J. Sham, *Phys. Rev.* B 6 (1972) 3584.
- [10] B. N. N. Achar and G. R. Barsch, *Phys. stat. sol.(b)* 76 (1976) 133, 677.
- [11] J. A. Benda, T. H. Geballe and J. H. Wernick, *Phys. Lett.* 46 A (1974) 389.
- [12] S. Foner, E. J. Jr. McNiff, J. R. Gavaler and M. A. Janocko, *Phys. Lett.* 47 A (1974) 485.
- [13] L. F. Mattheiss, *Phys. Rev.* B 12 (1975) 2161.
- [14] M. Hamermesh, *Teoria grup w zastosowaniach do zagadnień fizycznych* (PWN, Warszawa) 1968.
- [15] J. L. Birman, *Theory of Crystal Space Groups and Infrared and Raman Lattice Processes of Insulating Crystals*, in *Handbuch der Physik, Encyclopedia of Physics*, vol. XXV/2b, edited by S. Flügge (Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York) 1974.
- [16] R. Berenson and J. L. Birman, *J. Math. Phys.* 16 (1975) 227.
- [17] R. Berenson, I. Itzkan and J. L. Birman, *J. Math. Phys.* 16 (1975) 236.
- [18] I. Sakata, *J. Math. Phys.* 15 (1974) 1702, 1710.

- [19] P. Gard, J. Phys. A 6 (1973) 1837.
- [20] C. J. Bradley, J. Math. Phys. 7 (1966) 1145.
- [21] C. J. Bradley and A. P. Cracknell, The Mathematical Theory of Symmetry in Solids (Clarendon Press, Oxford) 1972.
- [22] H. W. Streitwolf, Gruppentheorie in der Festkörperphysik (Akademische Verlagsgesellschaft Geest & Portig K.-G., Leipzig) 1967.
- [23] S. C. Miller and W. F. Love, Tables of Irreducible Representations of Space Groups and Co-Representations of Magnetic Space Groups (Pruett Press, Boulder, Colorado) 1967.
- [24] N. V. Huong, P. D. Tien, H. Kunert and M. Suffczyński, J. Physique 38 (1977) 51.
- [25] W. Brauer, H. Streitwolf, Teoretyczne podstawy fizyki półprzewodników (PWN, Warszawa) 1977.
- [26] O. Kane, J. Phys. Chem. Solids 1 (1957) 249.
- [27] G. L. Bir, G. E. Pikus, Symetria i odkształcenia w półprzewodnikach (PWN, Warszawa) 1977.
- [28] J. M. Luttinger, Phys. Rev. 102 (1956) 1030.
- [29] J. L. Birman, T. K. Lee and R. Berenson, Phys. Rev. B 14 (1976) 318.
- [30] T. K. Lee, J. L. Birman and S. J. Williamson, Phys. Rev. Lett. 39 (1977) 839, Phys. Lett. 64 A (1977) 89.
- [31a] J. L. Birman and R. Berenson, Phys. Rev. B 9 (1974) 4512.
- [31b] J. L. Birman, Phys. Rev. B 9 (1974) 4518.
- [32] M. Suffczyński, R. Kowalczyk, Irreducible Representations of the Little Groups of Crystallographic Space Groups, Prace IF PAN (Warszawa) 72 1977.
- [33] H. Kunert, J. Popenda and M. Suffczyński, J. Physique 39 (1978) 526.
- [34] O. V. Kovalev, Irreducible Representations of the Space Groups (Kiev) 1961 (in Russian).
- [35] T. K. Lee, J. L. Birman, preprint (1978).