第21卷 第4期　　物 理 学 报　　Vol. 21, No. 4
1965年4月　　ACTA PHYSICA SINICA　　April, 1965

空間羣算符的矩陣元*

徐至中　謝希德
(复旦大学物理系)

提　　要

本文首先通过对波矢星直接乘积的分析指出，如果 $^*\mathbf{K}'' \in {}^*\mathbf{K} \otimes {}^*\mathbf{K}'$，则波矢羣 $G_{\mathbf{k}''}$ 可以有下面四种情况：A) $G_{\mathbf{k}}$ 同 $G_{\mathbf{k}'}$ 是 $G_{\mathbf{k}''}$ 的子羣，B) $G_{\mathbf{k}} = G_{\mathbf{k}'} = G_{\mathbf{k}''}$，C) $G_{\mathbf{k}''} = G_s$，D) G_s 是 $G_{\mathbf{k}''}$ 的子羣。根据上述四种情况，分别考虑积分 $A = \langle f^{i''}_{\mu''}(\mathbf{k}'')|f^{i}_{\mu}(\mathbf{k})|f^{i'}_{\mu'}(\mathbf{k}')\rangle$ 的簡约。并且証明，对所有四种情况，积分 A 的值均可由矩阵 U 的矩阵元统一地表达出来。矩阵 U 是使可约表示 Γ' 簡约的转换矩阵，对四种情况，可约表示 Γ' 分别是：A) $(\Gamma^{i}_{\mathbf{k}} \otimes \Gamma^{i'}_{\mathbf{k}'})^{(\mathfrak{g})}$，B) $\Gamma^{i} \otimes \Gamma^{i'}_{\mathbf{k}'}$，C) $\Gamma^{i(s)}_{\mathbf{k}} \otimes \Gamma^{i'(s)}_{\mathbf{k}'}$，D) $(\Gamma^{i(s)}_{\mathbf{k}} \otimes \Gamma^{i'(s)}_{\mathbf{k}'})^{(\mathfrak{g})}$。最后，利用准投影算符的方法，对矩阵 U 进行了计算，导出空间羣 Wigner-Eckart 定理的表式。

一、引　　言

根据 Wigner-Eckart 定理[1]，积分 $\langle f^{J}_{M}|f^{j_1}_{m_1}|f^{j_2}_{m_2}\rangle$ 可以簡化成两个量的乘积：$aW^{j_1 j_2 J}_{m_1 m_2 M}$。如 $f^{j_1}_{m_1}$、$f^{j_2}_{m_2}$、f^{J}_{M} 依轉动羣的不可約表示 $\Gamma^{j_1}, \Gamma^{j_2}, \Gamma^{J}$ 变换，则 $W^{j_1 j_2 J}_{m_1 m_2 M}$ 就是矢量耦合系数。a 只与 j_1、j_2、J 有关，而与 m_1、m_2、M 无关，并且其数值与問題的对称性沒有关系。Koster[2] 将 Wigner-Eckart 定理推广到点羣的情形，并应用此方法研究晶体場中順磁离子的塞曼效应[3]。本文在上述原理的基础上，研究由属于空間羣的波矢羣 $G_{\mathbf{k}}(G_{\mathbf{k}'}, G_{\mathbf{k}''})$ 的第 $i(i', i'')$ 个不可約表示第 $\mu(\mu', \mu'')$ 列的基矢 $f^{i}_{\mu}(\mathbf{k})$，$(f^{i'}_{\mu'}(\mathbf{k}')\, f^{i''}_{\mu''}(\mathbf{k}''))$ 所組成的矩陣元 $\langle f^{i''}_{\mu''}(\mathbf{k}'')|f^{i}_{\mu}(\mathbf{k})|f^{i'}_{\mu'}(\mathbf{k}')\rangle$ 的簡約。对于积分可能有数値的四种情况作了討論。由 $G_{\mathbf{k}}$，$G_{\mathbf{k}'}$，$G_{\mathbf{k}''}$ 等波矢羣的不可約表示，可以計算积分中与对称性有关部分的值。所得的結果不仅适用于空間羣，也可用于一般的有限羣。最后，以六角密积晶体 $\left(\text{空間羣}\ P\frac{6_3}{m}mc\right)$ 为例，簡单說明了結果的应用。关于所得結果在其他物理問題中的应用，将另文叙述。

二、波矢星直接乘积的分类

只有当波矢星 $^*\mathbf{K}$，$^*\mathbf{K}'$ 和直接乘积的簡約系数 $(\mathbf{K}\mathbf{K}'|\mathbf{K}'')$ 不是零的时候，积分 $\langle f^{i''}_{\mu''}(\mathbf{k}'')|f^{i}_{\mu}(\mathbf{k})|f^{i'}_{\mu'}(\mathbf{k}')\rangle$ 才有数值，$^*\mathbf{K}$，$^*\mathbf{K}'$，$^*\mathbf{K}''$ 分別代表波矢 $\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}''$ 的星。Birman[4] 列出了金刚石与閃鋅矿結构波矢星的直接乘积以及該直接乘积的簡約系数。陈孝琛[5]等也列出了对六角密积及纖維鋅矿結构的計算結果。为了計算积分

$$A = \langle f^{i''}_{\mu''}(\mathbf{k}'')|f^{i}_{\mu}(\mathbf{k})|f^{i'}_{\mu'}(\mathbf{k}')\rangle$$

的值，本文首先对波矢星直接乘积进行分析，得知可以就四种不同情况来討論 A 的数値。

---

* 1964年2月17日收到。

設空間羣 $G = \sum_{i=1}^{s} \alpha_i G_{\mathbf{k}}$, $s = g_{\mathbf{k}}$ 是 $G/G_{\mathbf{k}}$ 的阶，α_i 是波矢羣 $G_{\mathbf{k}}$ 的陪集代表元素．如設 α_i 中有元素 α_m^i, α_n^i 滿足 $\alpha_m^i\alpha_n^i = \alpha_p^i\zeta_t$, $\zeta_t \in G_{\mathbf{k}}$, 我們說 α_m^i, α_n^i, α_p^i 組成封閉子組，由于空間羣是可解的[6]，可以証明在 $G/G_{\mathbf{k}}$ 中，存在封閉子組1)．設 $\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_s$ 可分为若干封閉子組 $H_{\mathbf{k}}^1 \subset H_{\mathbf{k}}^2 \subset \cdots \subset H_{\mathbf{k}}^n$, 封閉子組 $H_{\mathbf{k}}^i$ 由元素 $\alpha_m^i (m = 1, 2, \cdots, d)$ 組成，$d = l_{\mathbf{k}}^i$ 是子組的阶．同理，$G = \sum_{j=1}^{s'} \beta_j G_{\mathbf{k}'}$, $s' = g_{\mathbf{k}'}$ 是 $G/G_{\mathbf{k}'}$ 的阶．$\beta_1\beta_2\cdots\beta_{s'}$ 又可分为封閉子組 $H_{\mathbf{k}'}^{i'}$ $(i' = 1, 2, \cdots, n')$, 子組中的元素为 $\beta_l^{i'}$ $(l = 1, 2, \cdots, d')$, $d' = l_{\mathbf{k}'}^{i'}$ 是 $H_{\mathbf{k}'}^{i'}$ 的阶．

在直接乘积 $^*\mathbf{K}\otimes{}^*\mathbf{K}'$ 中，可能出現的波矢具有如下形式：

$$\alpha_i(\mathbf{k} + \beta_j\mathbf{k}') \quad (i = 1, 2, \cdots, s;\ j = 1, 2, \cdots, s').$$

将这些量的集合排列成矩陣 $P(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$：

$$P_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \equiv \alpha_i(\mathbf{k} + \beta_j\mathbf{k}'),$$

可以得到下面的結果：

1. 若波矢星 $^*\mathbf{K}''$ 出現在直接乘积 $^*\mathbf{K}\otimes{}^*\mathbf{K}'$ 中，則 $G/G_{\mathbf{k}''}$ 的阶 $g_{\mathbf{k}''}$ 是 $g_{\mathbf{k}}/l_{\mathbf{k}}^i$ 与 $g_{\mathbf{k}'}/l_{\mathbf{k}'}^{i'}$ 的公倍数．

首先来証明波矢星 $^*\mathbf{K}''$ 的波矢数（卽 $G/G_{\mathbf{k}''}$ 的阶）是 $g_{\mathbf{k}}/l_{\mathbf{k}}^i$ 的倍数．

为方便起見，在这里把所有波矢都限制在一个簡約布里淵区以內，卽認为两个只相差一个倒格子矢量的波矢是完全等价的．因此，如果羣操作元素 α 使波矢 $\mathbf{k}$ 变成 $\mathbf{k} + \mathbf{k}_h$ ($\mathbf{k}_h$ 是倒格子矢量)，則仍然認为 α 使 $\mathbf{k}$ 不变，并記为 $\alpha\mathbf{k} = \mathbf{k}$.

（1）設在 $G/G_{\mathbf{k}}$ 的封閉子組 $H_{\mathbf{k}}^i$ 中有一部分元素 α_1^i, α_2^i, α_3^i 使 $(\mathbf{k} + \mathbf{k}')$ 不变，例如：

$$\alpha_1^i(\mathbf{k} + \mathbf{k}') = \alpha_2^i(\mathbf{k} + \mathbf{k}') = \alpha_3^i(\mathbf{k} + \mathbf{k}') = \mathbf{K}_1,\ \alpha_1^i$$

是不变操作．根据封閉子組的定义，$\alpha_2^i\alpha_3^i = \alpha_m^i\zeta_n$, ζ_n 是波矢羣 $G_{\mathbf{k}}$ 的元素，如果 ζ_n 也是 $G_{\mathbf{k}'}$ 的元素，也就是說 ζ_n 是 $G_{\mathbf{k}}$ 与 $G_{\mathbf{k}'}$ 的公共羣 G_s 的元素，則 $\alpha_m^i(\mathbf{k} + \zeta_n\mathbf{k}') = \alpha_m^i(\mathbf{k} + +\mathbf{k}') = \mathbf{K}_1$, 卽 $\mathbf{K}_1$ 在 P_{m1} 中出現．如 ζ_n 不是 $G_{\mathbf{k}'}$ 的元素，可設 $\zeta_n = \beta_n$, $\alpha_m^i(\mathbf{k} + \zeta_n\mathbf{k}') = =\mathbf{K}_1$, 則 $\mathbf{K}_1$ 在 P_{mn} 中出現．因此得到，如 $\mathbf{K}_1$ 在 P_{i1} 中的一部分矩陣元（例如 P_{11}, P_{21}, P_{31}）中出現，也必在与 α_2^i, α_3^i 属于同一子組的元素（例如 α_m^i）所属的行中出現一次．

（2）将 $G/G_{\mathbf{k}}$ 写成

$$G/G_{\mathbf{k}} = \sum_{j=1}^{g_{\mathbf{k}}/d} \alpha_{(j-1)d+1} H_{\mathbf{k}}^i. \tag{1a}$$

如 $\alpha_{(j-1)d+1}$ 也使 $\mathbf{k} + \mathbf{k}'$ 不变，則意味着在 $G/G_{\mathbf{k}}$ 中可以找到一个比 $H_{\mathbf{k}}^i$ 更大的封閉子組，在此封閉子組的每个元素所属的行中都能找到 $\mathbf{K}_1$．令 $\bar{H}_{\mathbf{k}}^i$ 代表 $G/G_{\mathbf{k}}$ 的最大封閉子組，根据封閉子組定义，可将 $G/G_{\mathbf{k}}$ 写成

$$G/G_{\mathbf{k}} = \sum_{j=1}^{g_{\mathbf{k}}/d} \alpha'_{(j-1)\bar{d}+1} \bar{H}_{\mathbf{k}}^i, \tag{1b}$$

式中 $\bar{d}$ 是 $\bar{H}_{\mathbf{k}}^i$ 的阶．

由于 $\bar{H}_{\mathbf{k}}^i$ 是具有这种性质的最大封閉子組，所以 $\alpha'_{(j-1)\bar{d}+1}(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \risingdotseq \mathbf{k} + \mathbf{k}'$, 并且 $\alpha'_{(j_1-1)\bar{d}+1}(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \risingdotseq \alpha'_{(j_2-1)\bar{d}+1}(\mathbf{k} + \mathbf{k}')$, 在此 $\alpha'_{(j_1-1)\bar{d}+1}$ 及 $\alpha'_{(j_2-1)\bar{d}+1}$ 表示 $\bar{H}_{\mathbf{k}}^i$ 的两个不同的

1) 见附录 I.

陪集代表元素，因为假若 $\alpha'_{(j_1-1)\bar{d}+1}(\mathbf{k}+\mathbf{k}')=\alpha'_{(j_2-1)\bar{d}+1}(\mathbf{k}+\mathbf{k}')$，则

$$[\alpha'_{(j_2-1)\bar{d}+1}]^{-1}\alpha'_{(j_1-1)\bar{d}+1}(\mathbf{k}+\mathbf{k}')=\mathbf{k}+\mathbf{k}'=\mathbf{K}_1,\quad \text{即 } [\alpha'_{(j_2-1)\bar{d}+1}]^{-1}\alpha'_{(j_1-1)\bar{d}+1}\in\bar{H}^i_{\mathbf{k}},$$

因此 $\alpha'_{(j_1-1)\bar{d}+1}\in\alpha'_{(j_2-1)\bar{d}+1}\bar{H}^i_{\mathbf{k}}$，即$\alpha'_{(j_1-1)\bar{d}+1}$与$\alpha'_{(j_2-1)\bar{d}+1}$属于$\bar{H}^i_{\mathbf{k}}$的同一陪集，与原来假定不符，所以，所有的 $\alpha'_{(j-1)\bar{d}+1}(\mathbf{k}+\mathbf{k}')$ 是不等价的，在此 $j=1,2,\cdots,g_{\mathbf{k}}/l^i_{\mathbf{k}}$. 这些波矢 $\mathbf{K}_j\equiv\alpha'_{(j-1)\bar{d}+1}(\mathbf{k}+\mathbf{k}')$ 組成波矢星$^*\mathbf{K}''$.

（3）根据以上两点，可将矩陣 P 的元素重新排列，使所有的 $\mathbf{K}_1$，$\alpha'_{(j-1)\bar{d}+1}\mathbf{K}_1(j=1,2,\cdots,s/d)$ 等調換到第一列，則在第一列的元素中，可以只包含 $\mathbf{K}_1$ 或包含所有組成 $^*\mathbf{K}''$ 的 s/d 个波矢.

（4）也可对 $P_{i2},\cdots,P_{im},\cdots$ 等进行討論，得到类似的結果，因此我們証明了 $^*\mathbf{K}''$ 的波矢数 $=m\,g_{\mathbf{k}}/l^i_{\mathbf{k}}$，也就是

$$g_{\mathbf{k}''}=m\,g_{\mathbf{k}}/l^i_{\mathbf{k}},\quad G_{\mathbf{k}''}\text{ 在 }G_{\mathbf{k}}\otimes G_{\mathbf{k}'}\text{ 中}.$$

同理可将矩陣 $P(\mathbf{k},\mathbf{k}')$ 写成

$$P_{ij}(\mathbf{k}',\mathbf{k})=\beta_i(\mathbf{k}'+\alpha_j\mathbf{k}),$$

由此証明，

$$g_{\mathbf{k}''}=m'\,g_{\mathbf{k}'}/l^{i'}_{\mathbf{k}'},$$

因此 $g_{\mathbf{k}''}$ 是 $g_{\mathbf{k}}/l^i_{\mathbf{k}}$ 与 $g_{\mathbf{k}'}/l^{i'}_{\mathbf{k}'}$ 的公倍数，$l^i_{\mathbf{k}}$，$l^{i'}_{\mathbf{k}'}$ 是最大封閉子組 $\bar{H}^i_{\mathbf{k}}$，$\bar{H}^{i'}_{\mathbf{k}'}$ 的阶.

2. $G_{\mathbf{k}''}$ 与 $g_{\mathbf{k}''}$ 可能有下面几种情况：

（1）$G_{\mathbf{k}}=G_{\mathbf{k}'}$，即两个波矢羣的对称元素全部相同.

(i) $l^i_{\mathbf{k}}=l^{i'}_{\mathbf{k}'}=g_{\mathbf{k}}=g_{\mathbf{k}'}$，$g_{\mathbf{k}''}=m$，可以証明 m 只能为 1，$G_{\mathbf{k}''}=G$.

(ii) $l^i_{\mathbf{k}}=l^{i'}_{\mathbf{k}'}=1$，$g_{\mathbf{k}''}=m\,g_{\mathbf{k}}=m\,g_{\mathbf{k}'}$，也可以証明 m 只能为 1，$g_{\mathbf{k}''}=g_{\mathbf{k}}=g_{\mathbf{k}'}$，$G_{\mathbf{k}''}=G_{\mathbf{k}}=G_{\mathbf{k}'}$.

(iii) $l^i_{\mathbf{k}}=l^{i'}_{\mathbf{k}'}$，$g_{\mathbf{k}''}=m\,g_{\mathbf{k}}/l^i_{\mathbf{k}}=m\,g_{\mathbf{k}'}/l^{i'}_{\mathbf{k}'}$，可以証明在此情况下，$m$ 也只能为 1，

$$g_{\mathbf{k}''}=g_{\mathbf{k}}/l^i_{\mathbf{k}}=g_{\mathbf{k}'}/l^{i'}_{\mathbf{k}'},$$

$$G/G_{\mathbf{k}''}=G/G_{\mathbf{k}}/\bar{H}^i_{\mathbf{k}}=G/G_{\mathbf{k}}\bar{H}^i_{\mathbf{k}},$$

$$G_{\mathbf{k}''}/G_{\mathbf{k}}=\bar{H}^i_{\mathbf{k}},\quad G_{\mathbf{k}}\text{ 是 }G_{\mathbf{k}''}\text{ 的子羣}.$$

（2）$G_{\mathbf{k}}\neq G_{\mathbf{k}'}$，两个不同构的波矢羣或两个同构的共軛子羣 $G_{\mathbf{k}}$ 和 $G_{\mathbf{k}'}$ 都属于这种情况.

(i) $l^i_{\mathbf{k}}=l^{i'}_{\mathbf{k}'}=1$，$g_{\mathbf{k}''}=mg_{\mathbf{k}}=m'g_{\mathbf{k}'}$，在此情况下，$G_{\mathbf{k}''}=G_s$，即只有公共羣 G_s 的元素属于 $G_{\mathbf{k}''}$.

(ii) $l^i_{\mathbf{k}}=l^{i'}_{\mathbf{k}'}$ 或 $l^i_{\mathbf{k}}\neq l^{i'}_{\mathbf{k}'}$，$g_{\mathbf{k}''}=mg_{\mathbf{k}}/l^i_{\mathbf{k}}=m'g_{\mathbf{k}'}/l^{i'}_{\mathbf{k}'}$，可以証明[1)]，

$$G_{\mathbf{k}''}=(\bar{H}^i_{\mathbf{k}}+\bar{H}^{i'}_{\mathbf{k}'}-H_s)\,G_s,$$

H_s 是由最大子組 $\bar{H}^i_{\mathbf{k}}$ 与 $\bar{H}^{i'}_{\mathbf{k}'}$ 的公共元素組成的.

总之，綜合上述討論，$G_{\mathbf{k}''}$ 可以有下面几种情况：

A）$G_{\mathbf{k}}$ 与 $G_{\mathbf{k}'}$ 是 $G_{\mathbf{k}''}$ 的子羣（包括情形(1)中的 (i) 和 (iii)）；

B）$G_{\mathbf{k}}=G_{\mathbf{k}'}=G_{\mathbf{k}''}$（情形(1)中的 (ii)）；

C）$G_{\mathbf{k}''}=G_s$，$G_{\mathbf{k}''}$ 是 $G_{\mathbf{k}}$ 与 $G_{\mathbf{k}'}$ 的公共子羣（情形(2)中的 (i)）；

---

1) 见附录 II.

D）G_s 是 $G_{\mathbf{k}''}$ 的子羣(情形(2)中的 (ii))．

由于 G_s 的元素必使 $\mathbf{k}+\mathbf{k}'$ 不变，因此 $G_s \subset G_{\mathbf{k}''}$ 是明显的，也就是說，在上述的四种情况，情况 D 是普遍的，而 A，B，C 都是特殊情况．但是，为了方便起見，在下面对积分 A 的簡約的討論中，仍分四种情况进行．

三、积分 A 的簡化

本节将就上面所得到的四种不同情况的 $G_{\mathbf{k}''}$，討論积分 A 的簡化．

情况 A　$G_{\mathbf{k}} = G_{\mathbf{k}'}$，$G_{\mathbf{k}}$ 是 $G_{\mathbf{k}''}$ 的子羣，这里包括两种情况：$g_{\mathbf{k}''} = 1$，$G_{\mathbf{k}''} = G$，或 $g_{\mathbf{k}''} = g_{\mathbf{k}}/l^i_{\mathbf{k}}$，下面将証明

$$A = \langle f^{i''}_{\mu''}(\mathbf{k}'')\,|\,f^i_\mu(\mathbf{k})\,|\,f^{i'}_{\mu'}(\mathbf{k}')\rangle = \sum_{m=0}^{C_{i''}-1} A^{i''}_m(\mathbf{k}'')\,U^{ii'}_{\mu''+md_{i''}(\mu\mu')}, \tag{2}$$

式中 U 是使 $(\Gamma^i_{\mathbf{k}}\otimes\Gamma^{i'}_{\mathbf{k}'})^{(9)}$ 按 $G_{\mathbf{k}''}/T^{\mathbf{k}''}$ 的不可約表示簡約的轉換矩陣，在 $(\Gamma^i_{\mathbf{k}}\otimes\Gamma^{i'}_{\mathbf{k}'})^{(9)}$ 的簡約形式中，$G_{\mathbf{k}''}/T^{\mathbf{k}''}$ 的第 i'' 不可約表示处在最前列与最前行．$A^{i''}_m(\mathbf{k}'')$ 是与 μ，μ'，μ'' 无关的常数，$C_{i''}$ 是在簡約表示中 $\Gamma^{i''}_{\mathbf{k}''}$ 出現的次数，$(\Gamma^i_{\mathbf{k}}\otimes\Gamma^{i'}_{\mathbf{k}'})^{(9)}$ 是直接乘积 $\Gamma^i_{\mathbf{k}}\otimes\Gamma^{i'}_{\mathbf{k}'}$ 在 $G_{\mathbf{k}''}/T^{\mathbf{k}''}$ 中的誘导表示，$T^{\mathbf{k}''}$ 是平移羣的核，滿足条件：$e^{i\mathbf{k}''\cdot\mathbf{R}_n} = 1$，$\mathbf{R}_n$ 是格矢．

証：

$$G_{\mathbf{k}''}/T^{\mathbf{k}''} = G_{\mathbf{k}}/T^{\mathbf{k}''} + \alpha_2 G_{\mathbf{k}}/T^{\mathbf{k}''} + \cdots + \alpha_s G_{\mathbf{k}}/T^{\mathbf{k}''}. \tag{3}$$

由于 $G_{\mathbf{k}} = G_{\mathbf{k}'}$，直接乘积 $\Gamma^i_{\mathbf{k}}\otimes\Gamma^{i'}_{\mathbf{k}'}$ 的基矢 $f^i_\mu(\mathbf{k})f^{i'}_{\mu'}(\mathbf{k}')$ 可以做为 $G_{\mathbf{k}}$ 表示的基矢，由 $\Gamma^i_{\mathbf{k}}\otimes\Gamma^{i'}_{\mathbf{k}'}$ 可以誘导出 $G_{\mathbf{k}''}/T^{\mathbf{k}''}$ 的表示 D，$D = (\Gamma^i_{\mathbf{k}}\otimes\Gamma^{i'}_{\mathbf{k}'})^{(9)}$．如 θ 是 $G_{\mathbf{k}''}/T^{\mathbf{k}''}$ 的元素，根据羣的誘导理論[7]，

$$D(\theta) = \sum_{h_t\in G_{\mathbf{k}}} \sigma(\theta, h_t)\otimes[\Gamma^i_{\mathbf{k}}(h_t)\otimes\Gamma^{i'}_{\mathbf{k}'}(h_t)],$$

$$\sigma(\theta, h_t)_{ml} = \begin{cases} 1, & \text{如 } \alpha_m h_t \alpha_l^{-1} = \theta; \\ 0, & \text{其它情况.} \end{cases} \tag{4}$$

在一般情况，D 是可約的，可以找到使 D 依 $G_{\mathbf{k}''}/T^{\mathbf{k}''}$ 的不可約表示而簡約的矩陣 U：

$$UDU^{-1} = \begin{pmatrix} \Gamma^i_{\mathbf{k}''} & & & \\ & \Gamma^i_{\mathbf{k}''} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \ddots \end{pmatrix}.$$

在此矩陣中，$\Gamma^i_{\mathbf{k}''}$ 可以出現数次，設第 m 个不可約表示 $\Gamma^j_{\mathbf{k}''}$ 的基矢为 $u^{j(m)}_\nu(\mathbf{k}'')$ $(\nu = 1, 2, \cdots, d_j)$；則

$$f^i_\mu(\mathbf{k})f^{i'}_{\mu'}(\mathbf{k}') = \sum_j \sum_{\nu=1}^{d_j}\left[\sum_{m=0}^{C_j-1} U^{ii'}_{\nu+md_j+\sum\limits_{\alpha}^{j-1} d_\alpha,(\mu\mu')}\, u^{j(m)}_\nu(\mathbf{k}'')\right],$$

$$A = \sum_j \sum_{\nu=1}^{d_j}\left[\sum_{m=0}^{C_j-1} U^{ii'}_{\nu+md_j+\sum\limits_{\alpha}^{j-1} d_\alpha,(\mu\mu')}\,\langle f^{i''}_{\mu''}(\mathbf{k}'')\,|\,u^{j(m)}_\nu(\mathbf{k}'')\rangle\right] =$$

$$= \sum_{m=0}^{C_{i''}-1} U^{ii'}_{\mu''+md_{i''}+\sum\limits_{\alpha}^{i''-1} d_\alpha,(\mu\mu')}\,\langle f^{i''}_{\mu''}(\mathbf{k}'')\,|\,u^{i''(m)}_{\mu''}(\mathbf{k}'')\rangle. \tag{5}$$

如选择 U，使 D 在簡約后 $\Gamma^{i''}_{\mathbf{k}''}$ 处在最前列与最前行，則在(5)中 U 的下标求和中，可以略去 $\sum_{\alpha}^{i''-1} d_\alpha$，令 $A^{i''}_m(\mathbf{k}'') = \langle f^{i''}_{\mu''}(\mathbf{k}'') | u^{i''(m)}_{\mu''}(\mathbf{k}'') \rangle$，可以証明 $\langle f^{i''}_{\mu''}(\mathbf{k}'') | u^{i''(m)}_{\mu''}(\mathbf{k}'') \rangle$ 与 μ'' 无关[7]，因此得到要証明的(2)式.

情况 B $g_{\mathbf{k}} = g_{\mathbf{k}'} = g_{\mathbf{k}''}$, $G_{\mathbf{k}} = G_{\mathbf{k}'} = G_{\mathbf{k}''}$.

用和上面相类似的方法可以得到与(2)式相同的式子，但是由于 $G_{\mathbf{k}} = G_{\mathbf{k}'} = G_{\mathbf{k}''}$，这里的 $U^{ii'}$ 是使 $\Gamma^i_{\mathbf{k}} \otimes \Gamma^{i'}_{\mathbf{k}'}$ 依 $G_{\mathbf{k}''}/T^{\mathbf{k}''}$ 不可約表示簡約的轉換矩陣.

情况 C $G_{\mathbf{k}''} = G_s$, $G_{\mathbf{k}''}$ 是 $G_{\mathbf{k}}$ 与 $G_{\mathbf{k}'}$ 的子羣.

可以証明积分 A 仍可依(2)式簡化，但是由于 $G_{\mathbf{k}''}$ 是 $G_{\mathbf{k}}$ 与 $G_{\mathbf{k}'}$ 的子羣，轉換矩陣 $U^{ii'}$ 有不同的意义. $f^i_\mu(\mathbf{k})$ 可以作为 $G_{\mathbf{k}}$ 在 $G_{\mathbf{k}''}$ 的分导表示 $\Gamma^{i(s)}_{\mathbf{k}}$ 的基矢[7]，而 $f^{i'}_{\mu'}(\mathbf{k}')$ 是 $G_{\mathbf{k}'}$ 在子羣 $G_{\mathbf{k}''}$ 的分导表示 $\Gamma^{i'(s)}_{\mathbf{k}'}$ 的基矢，因此 $f^i_\mu(\mathbf{k}) f^{i'}_{\mu'}(\mathbf{k}')$ 可以作为直接乘积表示 $\Gamma^{i(s)}_{\mathbf{k}} \otimes \Gamma^{i'(s)}_{\mathbf{k}'}$ 的基矢，这个直接乘积对 $G_{\mathbf{k}''}/T^{\mathbf{k}''}$ 来說一般是可約的，$U^{ii'}$ 就是使 $\Gamma^{i(s)}_{\mathbf{k}} \otimes \Gamma^{i'(s)}_{\mathbf{k}'}$ 依 $G_{\mathbf{k}''}/T^{\mathbf{k}''}$ 不可約表示而簡約的轉換矩陣.

情况 D $G_s \subset G_{\mathbf{k}''}$，即 G_s 是 $G_{\mathbf{k}''}$ 的子羣.

由于 G_s 是 $G_{\mathbf{k}}$ 与 $G_{\mathbf{k}'}$ 的子羣，$\Gamma^{i(s)}_{\mathbf{k}} \otimes \Gamma^{i'(s)}_{\mathbf{k}'}$ 可以作为 G_s 的表示，G_s 又是 $G_{\mathbf{k}''}$ 的子羣，因此由 $\Gamma^{i(s)}_{\mathbf{k}} \otimes \Gamma^{i'(s)}_{\mathbf{k}'}$ 可以誘导 $G_{\mathbf{k}''}$ 的表示，而这个表示一般又是可約的，如令 $U^{ii'}$ 代表使 $(\Gamma^{i(s)}_{\mathbf{k}} \otimes \Gamma^{i'(s)}_{\mathbf{k}'})^{(9)}$ 依 $G_{\mathbf{k}''}/T^{\mathbf{k}''}$ 不可約表示簡約的轉換矩陣，积分 A 仍可用(2)式表出.

总之，可以用(2)式統一地表示四种情况下积分 A 的值，只是对于每种情况，轉換矩陣 $U^{ii'}$ 有不同的涵义. 积分 A 的簡約，也归結为对四种不同情况求轉換矩陣 $U^{ii'}$. 下面就介紹如何求一般的使可約表示 Γ' 簡約的轉換矩陣 U.

四、轉換矩陣 U 的計算

为了适合本文計算的目的，用准投影算符[8]的方法导出轉換矩陣 U，这个方法可以避免計算复杂的可約表示(例如上面所得到的 $\Gamma^i_{\mathbf{k}} \otimes \Gamma^{i'}_{\mathbf{k}'}$, $(\Gamma^i_{\mathbf{k}} \otimes \Gamma^{i'}_{\mathbf{k}'})^{(9)}$, $\Gamma^{i(s)}_{\mathbf{k}} \otimes \Gamma^{i'(s)}_{\mathbf{k}'}$, $(\Gamma^{i(s)}_{\mathbf{k}} \otimes \Gamma^{i'(s)}_{\mathbf{k}'})^{(9)}$ 等). 下面将首先就三种情况分别导出 U 的形式，然后将結果应用于計算积分 A.

1) 在可約表示 Γ' 的簡約中，各不可約表示只出现一次(在上节的情况下，即 $C_{i''} = 1$).

設 $v_i (i = 1, 2, \cdots, m)$ 表示可約表示 Γ' 的基矢，根据 U 的定义，

$$U\Gamma' U^{-1} = \begin{pmatrix} \Gamma^\alpha & & & \\ & \Gamma^{\alpha'} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \ddots \end{pmatrix}, \tag{6}$$

不可約表示 Γ^α 在簡約表示的最前列最前行. 設 $u^\alpha_j (j = 1, 2, \cdots, d_\alpha)$ 是 Γ^α 的基矢，則

$$v_i = \sum_j U_{ji} u^\alpha_j + \sum_j U_{j+d_\alpha, i} u^{\alpha'}_j + \cdots. \tag{7}$$

引用准投影算符

$$P^\alpha_{jt} = \sum_{R \in G} \Gamma^\alpha_{jt}(R)^* R, \tag{8}$$

在此，R 是羣 G 的元素.

下面将証明

$$U_{jl} = C(\alpha ti)\langle v_i | P^{\alpha}_{tj} | v_l \rangle, \tag{9}$$

式中 $C(\alpha ti) = [B(\alpha ti)^{-1/2}]^* A(\alpha ti)^*$.

$$u^{\alpha}_j = A(\alpha ti)\, P^{\alpha}_{jt} v_i,$$

$B\,(\alpha ti)$ 是一个常数，其值在附录 III 中給出.

証：　将准投影算符 P^{α}_{jt} 作用在 Γ' 的基矢 v_i 上，并利用(7)式得到

$$P^{\alpha}_{jt} v_i = \sum_R \sum_{j'l} \Gamma^{\alpha}_{jt}(R)^* U_{j'i} \Gamma^{\alpha}_{lj'}(R) u^{\alpha}_l + $$
$$+ \sum_R \sum_{j'l} \Gamma^{\alpha}_{jt}(R)^* U_{j'+d_\alpha, i} \Gamma^{\alpha'}_{lj'}(R) u^{\alpha'}_l + \cdots.$$

利用不可約表示的正交关系

$$P^{\alpha}_{jt} v_i = \frac{g}{d_\alpha} \sum_l U_{j'i} u^{\alpha}_l \delta_{lj} \delta_{tj'} = \frac{g}{d_\alpha} U_{ti} u^{\alpha}_j, \tag{10}$$

令

$$A^{-1}(\alpha ti) = \frac{g}{d_\alpha} U_{ti}. \tag{11}$$

显然，为了得到有意义的結果，必須选擇适当的 t 及 i，使 $U_{ti} \neq 0$.

$$u^{\alpha}_j = A(\alpha ti) P^{\alpha}_{jt} v_i. \tag{12.a}$$

由于 v_i 是 Γ' 的基矢，由(12.a) 式及(8)式

$$u^{\alpha}_j = A(\alpha ti) \sum_{R\in G} \sum_k \Gamma^{\alpha}_{jt}(R)^* \Gamma'_{ki}(R) v_k, \tag{12.b}$$

即

$$P^{\alpha}_{jt} v_i = \sum_{R\in G} \sum_k \Gamma^{\alpha}_{jt}(R)^* \Gamma'_{ki}(R) v_k,$$

$$\langle v_k | P^{\alpha}_{jt} | v_i \rangle = \sum_{R\in G} \Gamma^{\alpha}_{jt}(R)^* \Gamma'_{ki}(R). \tag{13}$$

代入(12.b)式后，得到

$$u^{\alpha}_j = A(\alpha ti) \sum_k \langle v_k | P^{\alpha}_{jt} | v_i \rangle v_k. \tag{14}$$

定义矩陣 M，它滿足下式:

$$u = MV, \tag{15.a}$$

u 是由基矢 $u^{\alpha}_j, u^{\alpha'}_{j'}, \cdots (j = 1, 2, \cdots, d_\alpha, j' = d_\alpha + 1, \cdots, d_\alpha + d_{\alpha'})$ 等組成的列矩陣，V 是基矢 v_i 等組成的列矩陣. 矩陣M的矩陣元可写成

$$\begin{aligned} M^{\alpha(ti)}_{kj} &= \langle v_k | u^{\alpha}_j \rangle = \\ &= A(\alpha ti) \langle v_k | P^{\alpha}_{jt} | v_i \rangle = \\ &= A(\alpha ti) \sum_{R\in G} \Gamma^{\alpha}_{jt}(R)^* \Gamma'_{ki}(R). \end{aligned} \tag{16}$$

可以証明[1)]

$$M^+ M = B(\alpha ti).$$

1) 见附录 III.

如令 $\overline{M}_{nj}^{\alpha(ti)} = B(\alpha ti)^{-1/2} M_{nj}^{\alpha(ti)}$，$\overline{M}$ 是么正矩陣，相应地令

$$\bar{u}_j^\alpha = B(\alpha ti)^{-1/2} u_j^\alpha,$$

(15.a) 可写成

$$\bar{u} = \overline{M} V. \tag{15.b}$$

$\bar{u}$ 是由 $\bar{u}_j^\alpha$, $\bar{u}_{j'}^{\alpha'}$, $\cdots$ 等組成的列矩陣 ($j = 1, 2, \cdots, d_\alpha$, $j' = d_\alpha + 1, \cdots, d_\alpha + d_{\alpha'}$). 根据轉換矩陣定义，

$$V = U u. \tag{17}$$

将(17)式与(15.b)式比較，可得

$$\begin{aligned} U &= \overline{M}^{-1} B(\alpha ti)^{-1/2} = B(\alpha ti)^{-1/2} \overline{M}^{+}, \\ U_{lj} &= B(\alpha ti)^{-1/2} \overline{M}_{jl}^{\alpha(ti)*}. \end{aligned} \tag{18}$$

将(16)式代入(18)式，得到轉換矩陣的矩陣元

$$U_{jl} = |B(\alpha ti)^{-1/2}|^2 A(\alpha ti)^* \sum_{R \in G} \Gamma_{jt}^\alpha(R) \Gamma'_{li}(R)^*.$$

令 $C(\alpha ti) = |B(\alpha ti)^{-1/2}|^2 A(\alpha ti)^*$，就得到要証明的結果：

$$U_{jl} = C(\alpha ti) \sum_{R \in G} \Gamma_{jt}^\alpha(R) \Gamma'_{li}(R)^* = C(\alpha ti) \sum_{R \in G} \Gamma_{tj}^\alpha(R)^* \Gamma'_{il}(R), \tag{19}$$

$$U_{jl} = C(\alpha ti) \langle v_i | P_{tj}^\alpha | v_l \rangle. \tag{20}$$

在附录 IV 中証明了(20)式与 Koster 所得的結果是完全一致的. 利用(20)式，不需要知道 Γ' 的形式，而只要知道 Γ^α 的表示(在本文的情况，即只需要知道 $G_{\mathbf{k}''}$ 的各个不可約表示)，就可以求出轉換矩陣. 可以看出，U 不是唯一的，由于选择不同的参数 t 及 i，可以有常数的差別.

2) 在可約表示 Γ' 中含有两个 Γ^α 的情况，并設 Γ' 的簡約形式中，它們列于最前列最前行. 令 $u_j^{\alpha_1}$ 及 $u_j^{\alpha_2}$ ($j = 1, 2, \cdots, d_\alpha$) 代表这两个不可約表示的基矢，用和前面类似的方法，根据 U 的定义，将 v_i 写成

$$v_i = \sum_j U_{ji} u_j^{\alpha_1} + \sum_j U_{j+d_\alpha, i} u_j^{\alpha_2} + \cdots, \tag{21}$$

用准投影算符 P_{jt}^α 作用在 v_i 上：

$$\begin{aligned} P_{jt}^\alpha v_i &= \sum_{R \in G} \Gamma_{jt}^\alpha(R)^* R v_i = \frac{g}{d_\alpha} U_{ti} u_j^{\alpha_1} + \frac{g}{d_\alpha} U_{t+d_\alpha, i} u_j^{\alpha_2} = \\ &= w_j^{\alpha_1} = \sum_k \langle v_k | P_{jt}^\alpha | v_i \rangle v_k, \end{aligned} \tag{22}$$

w_j^α 也是 Γ^α 的不可約表示的基矢，改变参数 t 及 i，得到

$$P_{jt'}^\alpha v_{i'} = w_j^{\alpha_2} = \sum_k \langle v_k | P_{jt'}^\alpha | v_{i'} \rangle v_k. \tag{23}$$

利用 $w_j^{\alpha_1}$ 和 $w_j^{\alpha_2}$ 可以組成彼此正交的基矢 $w_j'^{\alpha_1}$ 及 $w_j'^{\alpha_2}$：

$$\left.\begin{aligned} w_j'^{\alpha_1} &= w_j^{\alpha_1}, \\ w_j'^{\alpha_2} &= w_j^{\alpha_1} - (\langle w_j^{\alpha_1} | w_j^{\alpha_1} \rangle / \langle w_j^{\alpha_1} | w_j^{\alpha_2} \rangle) w_j^{\alpha_2}. \end{aligned}\right\} \tag{24}$$

利用准投影算符的性質[7,8]，可以証明1)

1) 见附录 V.

$$-\langle w_j^{\alpha_1}|w_j^{\alpha_1}\rangle/\langle w_j^{\alpha_1}|w_j^{\alpha_2}\rangle = -\langle v_i|P_{tt}^{\alpha}|v_i\rangle/\langle v_i|P_{tt'}^{\alpha}|v_{i'}\rangle \equiv \chi\begin{pmatrix} t\,i \\ t'i' \end{pmatrix}. \tag{25}$$

(25) 式表明正交化系数与 j 无关，而只与 t, t', i, i' 有关．因此可以选取这些参数，使所有的基矢 $w_j'^{\alpha_2}$ $(j=1, 2, \cdots, d_\alpha)$ 有相同的正交化系数，由 (22)、(23)、(24) 及 (25) 式得到

$$w_j'^{\alpha_2} = \sum_k \langle v_k|P_{jt}^{\alpha}|v_i\rangle v_k + \chi\begin{pmatrix} t\,i \\ t'i' \end{pmatrix}\sum_k \langle v_k|P_{jt'}^{\alpha}|v_{i'}\rangle v_k, \tag{26}$$

引进矩陣 M:

$$W' = MV, \tag{27}$$

W' 是由 $w_j'^{\alpha_2}$ $(j=1, 2, \cdots, d_\alpha)$、$w_i'^{\alpha_2}$ $(j=1, 2, \cdots, d_\alpha)$、$w_j^{\alpha'}$、$\cdots$等組成的列矩陣，可以証明[1] $M^+M =$ 常数 $= B\begin{pmatrix} \alpha \\ t\,i \\ t'i' \end{pmatrix}$, $\overline{M} = B^{-1/2}M$ 是么正矩陣.

$$M_{kj}^{\alpha} = \langle v_k|P_{jt}^{\alpha}|v_i\rangle, \tag{28}$$

$$M_{k,j+d_\alpha}^{\alpha} = \langle v_k|P_{jt}^{\alpha}|v_i\rangle + \chi\begin{pmatrix} t\,i \\ t'i' \end{pmatrix}\langle v_k|P_{jt'}^{\alpha}|v_{i'}\rangle. \tag{29}$$

由(22),(23)及(24)式，可以将(21)式写成

$$\begin{aligned} v_i &= \sum_j U_{ji}\left[b_{11}\begin{pmatrix} \alpha \\ t\,i \\ t'i' \end{pmatrix} w_j'^{\alpha_1} + b_{21}\begin{pmatrix} \alpha \\ t\,i \\ t'i' \end{pmatrix} w_j'^{\alpha_2}\right] + \\ &\quad + \sum_j U_{j+d_\alpha,i}\left[b_{12}\begin{pmatrix} \alpha \\ t\,i \\ t'i' \end{pmatrix} w_j'^{\alpha_1} + b_{22}\begin{pmatrix} \alpha \\ t\,i \\ t'i' \end{pmatrix} w_j'^{\alpha_2}\right] + \cdots \\ &= \sum_j U_{ji}' w_j'^{\alpha_1} + U_{j+d_\alpha}' w_j'^{\alpha_2} + \cdots, \end{aligned} \tag{30}$$

式中

$$U_{ji}' = b_{11}U_{ji} + b_{12}U_{j+d_\alpha,i},$$
$$U_{j+d_\alpha,i}' = b_{21}U_{ji} + b_{22}U_{j+d_\alpha,i},$$

而 $b_{11}, b_{21}, b_{12}, b_{22}$ 分别是由 $U_{ti}, U_{t+d_\alpha,i}, U_{t'i'}, U_{t'+d_\alpha,i'}$ 及 $\chi\begin{pmatrix} t\,i \\ t'i' \end{pmatrix}$ 所組成的、仅与参数 t, t', i, i' 有关的常数.

(30)式可写成

$$V = U'W',$$

由(27)式

$$V = M^{-1}W' = B^{-1/2}\overline{M}^{-1}W',$$

即

$$U' = B^{-1/2}\overline{M}^{-1}.$$

$$\begin{aligned} U_{jl}' &= B^{-1/2}\overline{M}_{lj}^{*} = |B^{-1/2}|^2\langle v_l|P_{jt}^{\alpha}|v_i\rangle^{*} = C\langle v_i|P_{tj}^{\alpha}|v_l\rangle, \\ U_{j+d_\alpha,l}' &= B^{-1/2}\overline{M}_{l\ j+d_\alpha}^{*} = |B^{-1/2}|^2\left\{\langle v_i|P_{tj}^{\alpha}|v_l\rangle + \chi\begin{pmatrix} t\,i \\ t'i' \end{pmatrix}\langle v_{i'}|P_{t'j}^{\alpha}|v_l\rangle\right\}. \end{aligned} \tag{31}$$

从上面可以看出，在这种情况下，由于(21)及(30)式，矩陣 U 并不是唯一确定的.

---

1) 证明方法与附录 III 相同.

3）在可約表示中包含有三个以上的 Γ^a.

可以用和上面类似的方法得到 Γ^a 的相互正交化的基矢，

$$w_j'^{a_1} = P^a_{jt_1} v_{i_1} = \sum_k \langle v_k | P^a_{jt_1} | v_{i_1} \rangle v_k,$$

$$w_j'^{a_2} = P^a_{jt_1} v_{i_1} + \chi_1^1 P^a_{jt_2} v_{i_2} = \sum_k \langle v_k | P^a_{jt_1} | v_{i_1} \rangle v_k + \chi_1^1 \sum_k \langle v_k | P^a_{jt_2} | v_{i_2} \rangle v_k,$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$w_j'^{a_n} = P^a_{jt_1} v_{i_1} + \chi_1^{n-1} P^a_{jt_2} v_{i_2} + \cdots + \chi_{n-1}^{n-1} P^a_{jt_n} v_{i_n}.$$

参数 $\chi_1^1, \chi_1^2, \cdots, \chi_{n-1}^{n-1}$ 仅与 $t_1, t_2, \cdots, t_n$, 及 $i_1, i_2, \cdots, i_n$ 有关．由此得到轉換矩陣

$$U'_{jl} = C\langle v_{i_1} | P^a_{t_1 j} | v_l \rangle,$$

$$U'_{j+d_a, l} = C\left\{ \langle v_{i_1} | P^a_{t_1 j} | v_l \rangle + \chi_1^1 \begin{pmatrix} t_1 i_1 \\ t_2 i_2 \end{pmatrix} \langle v_{i_2} | P^a_{t_2 j} | v_l \rangle \right\},$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$U'_{j+(n-1)d_a, l} = C\left\{ \langle v_{i_1} | P^a_{t_1 j} | v_l \rangle + \chi_1^{n-1} \begin{pmatrix} t_1 i_1 \\ t_2 i_2 \\ \cdots \\ t_n i_n \end{pmatrix} \langle v_{i_2} | P^a_{t_2 j} | v_l \rangle + \right.$$

$$\left. + \cdots + \chi_{n-1}^{n-1} \begin{pmatrix} t_1 i_1 \\ t_2 i_2 \\ \cdots \\ t_n i_n \end{pmatrix} \langle v_{i_n} | P^i_{t_n j} | v_l \rangle \right\}. \tag{32}$$

五、积分 A 的計算

由 (20)、(31)、(32) 式可以导出对第三节所討論的四种情况的轉換矩陣，从而計算 A 的积分值.

1）可約表示 Γ' 中只包含一个不可約表示 $\Gamma^{i''}$，即 $C_{i''} = 1$.

情况 A $G_{\mathbf{k}}$ 和 $G_{\mathbf{k}'}$ 是 $G_{\mathbf{k}''}$ 的子羣，$G_{\mathbf{k}} = G_{\mathbf{k}'}$.

(2) 式的 $U^{ii'}_{\mu''(\mu\mu')}$ 是使 $(\Gamma^i_{\mathbf{k}} \otimes \Gamma^{i'}_{\mathbf{k}'})^{(9)}$ 簡約的轉換矩陣.

由(21)式,选择 $i = t = 1$, 得到

$$U^{ii'}_{\mu''(\mu\mu')} = C(i''11) \langle v_1 | P^{i''}_{1\mu''} | v_{(\mu\mu')} \rangle =$$

$$= C(i''11) \langle f^i_1(\mathbf{k}) f^{i'}_1(\mathbf{k}') | P^{i''}_{1\mu''} | f^i_\mu(\mathbf{k}) f^{i'}_{\mu'}(\mathbf{k}') \rangle =$$

$$= C(i''11) \sum_{R \in G_{\mathbf{k}''}/T^{\mathbf{k}''}} [\Gamma^{i''}_{\mathbf{k}''}(R)]^*_{1\mu''} \langle f^i_1(\mathbf{k}) f^{i'}_1(\mathbf{k}') | R | f^i_\mu(\mathbf{k}) f^{i'}_{\mu'}(\mathbf{k}') \rangle.$$

将 $G_{\mathbf{k}''}/T^{\mathbf{k}''}$ 依 $G_{\mathbf{k}}/T^{\mathbf{k}''}$ 作陪集展开[1)],再利用羣表示的基矢正交关系,可以証明

$$U^{ii'}_{\mu''(\mu\mu')} = C(i''11) \sum_{R \in G_{\mathbf{k}}/T^{\mathbf{k}''}} [\Gamma^{i''}_{\mathbf{k}''}(R)]^*_{1\mu''} [\Gamma^i_{\mathbf{k}}(R)]_{1\mu} [\Gamma^{i'}_{\mathbf{k}'}(R)]_{1\mu'} =$$

$$= C(i''11) \sum_{R \in G_s/T^{\mathbf{k}''}} [\Gamma^{i''}_{\mathbf{k}''}(R)]^*_{1\mu''} [\Gamma^i_{\mathbf{k}}(R)]_{1\mu} [\Gamma^{i'}_{\mathbf{k}'}(R)]_{1\mu'},$$

G_s 是公共羣．因为在这里，$G_{\mathbf{k}} = G_{\mathbf{k}'}$ 是 $G_{\mathbf{k}''}$ 的子羣，因此 $G_s = G_{\mathbf{k}} = G_{\mathbf{k}'}$ 也是这三个

---

1) $T^{\mathbf{k}''}$ 是平移羣的核,滿足条件 $e^{i\mathbf{k}''\mathbf{R}_n} = 1$, 这里 $\mathbf{R}_n$ 是格矢.

羣的公共羣．(2) 式可写成

$$A = \langle f^{i''}_{\mu''}(\mathbf{k}'')|f^{i}_{\mu}(\mathbf{k})|f^{i'}_{\mu'}(\mathbf{k}')\rangle =$$
$$= N(i'', 1, 1) \sum_{R\in G_s/T\mathbf{k}''} [\Gamma^{i''}_{\mathbf{k}''}(R)]^{*}_{1\mu''}[\Gamma^{i}_{\mathbf{k}}(R)]_{1\mu}[\Gamma^{i'}_{\mathbf{k}'}(R)]_{1\mu'},$$

式中

$$N(i'', 1, 1) = C(i'', 1, 1)\, A^{i''}(\mathbf{k}''). \tag{33}$$

情况 B　$G_s = G_{\mathbf{k}} = G_{\mathbf{k}'} = G_{\mathbf{k}''}$.

用和上面类似的討論，得到

$$A = \langle f^{i''}_{\mu''}(\mathbf{k}'')|f^{i}_{\mu}(\mathbf{k})|f^{i'}_{\mu'}(\mathbf{k}')\rangle =$$
$$= N(i'',1,1) \sum_{R\in G_{\mathbf{k}''}/T\mathbf{k}''} [\Gamma^{i''}_{\mathbf{k}''}(R)]^{*}_{1\mu''}[\Gamma^{i}_{\mathbf{k}}(R)]_{1\mu}[\Gamma^{i'}_{\mathbf{k}'}(R)]_{1\mu'}. \tag{34}$$

由于 $G_s = G_{\mathbf{k}''}$, (34) 式与 (33) 式是相同的.

同理可以証明，对于情况 C，也可以用(33)式来表示积分 A 的值，此时，$G_s = G_{\mathbf{k}''}$ 是 $G_{\mathbf{k}}$ 及 $G_{\mathbf{k}'}$ 的公共子羣．对于情況 D，也得到相同的結果，因此可以看出，(33)式对于四种不同情况都是合适的.

2) 可約表示 Γ' 中包含有两个不可約表示 $\Gamma^{i''}_{\mathbf{k}''}$, $C_{i''} = 2$．由 (2) 式，

$$A = \langle f^{i''}_{\mu''}(\mathbf{k}'')|f^{i}_{\mu}(\mathbf{k})|f^{i'}_{\mu'}(\mathbf{k}')\rangle = A^{i''}_{1}(\mathbf{k}'')U^{ii'}_{\mu''(\mu\mu')} + A^{i''}_{2}(\mathbf{k}'')U^{ii'}_{\mu''+d_{i''}(\mu\mu')},$$

取 $t_1 = i_1 = 1$, $t_2 = i_2 = 2$，利用(13)、(31)式，用和推导(33)式类似的方法，可以証明，对四种不同情况

$$A = N_1\begin{pmatrix} i'' \begin{matrix} 1 & 1 \\ 2 & 2 \end{matrix}\end{pmatrix} \sum_{R\in G_s/T\mathbf{k}''} [\Gamma^{i''}_{\mathbf{k}''}(R)]^{*}_{1\mu''}[\Gamma^{i}_{\mathbf{k}}(R)]_{1\mu}[\Gamma^{i'}_{\mathbf{k}'}(R)]_{1\mu'} +$$
$$+ N_2\begin{pmatrix} i'' \begin{matrix} 1,1 \\ 2,2 \end{matrix}\end{pmatrix} \sum_{R\in G_s/T\mathbf{k}''} [\Gamma^{i''}_{\mathbf{k}''}(R)]^{*}_{2\mu''}[\Gamma^{i}_{\mathbf{k}}(R)]_{2\mu}[\Gamma^{i'}_{\mathbf{k}'}(R)]_{2\mu'}. \tag{35}$$

3) 可約表示 Γ' 中包含有 3 个以上的 $\Gamma^{i''}$:

取 $t_1 = i_1 = 1$, $t_2 = i_2 = 2$; $\cdots$; $t_n = i_n = n$，利用(13)、(32)等式及(5)式:

$$A = \langle f^{i''}_{\mu''}(\mathbf{k}'')|f^{i}_{\mu}(\mathbf{k})|f^{i'}_{\mu'}(\mathbf{k}')\rangle =$$
$$= \sum_{i=1}^{n} N_i \sum_{R\in G_s/T\mathbf{k}''} [\Gamma^{i''}_{\mathbf{k}''}(R)]^{*}_{i\mu''}[\Gamma^{i}_{\mathbf{k}}(R)]_{i\mu}[\Gamma^{i'}_{\mathbf{k}'}(R)]_{i\mu'}, \tag{36}$$

$N_i\begin{pmatrix} & 1,1 \\ i'' & 2,2 \\ & \cdots \\ & n,n \end{pmatrix}$ 是仅与参数 t_m, i_m $(m = 1, 2, \cdots, n)$ 的选取有关的常数.

以上导出的式子(33)，(35)及(36)式，不仅适用于空間羣，对于一般有限羣也是适合的.

下面将以六角密积晶体 $\left(\text{空間羣 } P\frac{6_3}{m}mc\right)$ 为例，說明积分 A 的計算.

积分 $\langle f^{i''}_{\mu''}(\Gamma)|f^{i}_{\mu}(U)|f^{i'}_{\mu'}(U)\rangle$ 的計算，$G_{\mathbf{k}} = G_{\mathbf{k}'} = U$[1)]，这个积分属于前面的情况 A，根据准动量守恆，波矢羣 $G_{\mathbf{k}}$ 与 $G_{\mathbf{k}'}$ 满足条件 $\mathbf{k} = -\mathbf{k}'$，对于 U, $\mathbf{k} = \left(0, \frac{2\pi}{\sqrt{3}\,a}, k/c\right)$,

1) 六角密积波矢羣及对称操作的符号与文献[9]相同.

$\mathbf{k}' = \left(0, \frac{-2\pi}{\sqrt{3}\,a}, -k/c\right)$. 为容易分别起見,令 $U^+ = G_{\mathbf{k}}$, $U^- = G_{\mathbf{k}'}$.

波矢羣 U 的操作与不可約表示列于下表:

	$\{\varepsilon\|0\}$	$\{\delta_2\|\tau_2\}$	$\{\rho_2'\|0\}$	$\{\rho_2''\|\tau_2\}$
U_1	1	$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{t}_1/2}$	1	$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{t}_1/2}$
U_2	1	$-e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{t}_1/2}$	1	$-e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{t}_1/2}$
U_3	1	$-e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{t}_1/2}$	-1	$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{t}_1/2}$
U_4	1	$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{t}_1/2}$	-1	$-e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{t}_1/2}$
$U_1^+\otimes U_3^-$	1	-1	-1	1
$\chi(U_1^+\otimes U_3^-)^{(9)}$	6	-6	-2	2

在此 $\chi(U_1^+\otimes U_3^-)^{(9)}$ 表示誘导表示 $(U_1^+\otimes U_3^-)^{(9)}$ 的品格. 可以求出

$$(U_1^+\otimes U_3^-)^{(9)} = \Gamma_4^+\oplus\Gamma_3^-\oplus\Gamma_6^+\oplus\Gamma_6^-.$$

利用(34)式,取 $t=1$, $i=1$, 对于 Γ_6^+ 的两个基矢 $f_1^{6+}(\Gamma)$ 及 $f_2^{6+}(\Gamma)$ 的积分数值分别为

$$A_1^{(\Gamma_6^+)} = \langle f_1^{6+}(\Gamma)\,|\,f_1^1(U^+)\,|\,f_1^3(U^-)\rangle = N\sum_{R\in G_{\mathbf{k}}/T^{\mathbf{k}}} D_{11}^{\Gamma_6^+}(R)D^{U_1^+}(R)D^{U_3^-}(R) = 2N,$$

$$A_2^{(\Gamma_6^+)} = \langle f_2^{6+}(\Gamma)\,|\,f_1^1(U^+)\,|\,f_1^3(U^-)\rangle = N\sum_{R\in G_{\mathbf{k}}/T^{\mathbf{k}}} D_{12}^{\Gamma_6^+}(R)D^{U_1^+}(R)D^{U_3^-}(R) = -2\omega^2N,$$

其中 $\omega = (-1+i\sqrt{3})/2$,

$$A_2^{(\Gamma_6^+)}/A_1^{(\Gamma_6^+)} = -\omega^2.$$

对于 Γ_6^- 得到

$$A_1^{(\Gamma_6^-)} = 2N',\ A_2^{(\Gamma_6^-)} = 2\omega^2N',$$

因此 $A_2^{(\Gamma_6^-)}/A_1^{(\Gamma_6^-)} = \omega^2$, 而 $A_1^{(\Gamma_6^+)}/A_1^{(\Gamma_6^-)} = N/N'$.

同理可以求出其它积分,在这里不再詳述.

六、討 論

根据上面的討論,本文得到下述結果.

1. 由于空間羣的性质,对积分 A, 根据选择定則,波矢羣 $G_{\mathbf{k}}$ 与 $G_{\mathbf{k}'}$, $G_{\mathbf{k}''}$ 間可以存在有四种不同的关系.

2. 导出了对空間羣的类似于 Wigner-Eckart 定理的关系式(34)及(35)式. 由于空間羣比完全轉动羣复杂,决定积分数值的因素也比較多.

3. 对于 $C_{i''}=2$ 的情况,应选择 t, i, t', i', 使

$$\begin{vmatrix} U_{ti} & U_{t+d_a,i} \\ U_{t'i'} & U_{t'+d_a,i'} \end{vmatrix} \neq 0.$$

对于 $C_{i''}\geqslant 3$ 的情况,应选择 t_n, i_n $(n=1, 2, \cdots, c_{i''})$, 使

$$\begin{vmatrix} U_{t_1 i_1} & U_{t_1+d_a, i_1} & \cdots & U_{t_1+(c_{i''}-1)d_a, i_1} \\ U_{t_2 i_2} & U_{t_2+d_a, i_2} & \cdots & U_{t_2+(c_{i''}-1)d_a, i_2} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ U_{t_n i_n} & U_{t_n+d_a, i_n} & \cdots & U_{t_n+(c_{i''}-1)d_a, i_n} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \end{vmatrix} \neq 0.$$

4. 所得的結果可用于計算研究晶体中有关問題的矩陣元. 利用轉換矩陣 $U^{ii'}$, 也可以計算正交化平面波的耦合系数,在这里就不加贅述了.

5. 在情况 A 及情况 D 中,本方法还可被用来检驗 Lax 选择定則[10]的眞实性,因为 Lax 选择定則实質上是計算表示 $(\Gamma_{\mathbf{k}}^{i(s)} \otimes \Gamma_{\mathbf{k}'}^{i'(s)})^{(S)} = \sum\limits_{i''} c_{ii'i''} \Gamma_{\mathbf{k}''}^{i''}$ 的簡約系数 $c_{ii'i''}$. 在誘导过程中除去原来函数 $f_\mu^i(\mathbf{k}) f_{\mu'}^{i'}(\mathbf{k}')$ 外,还引进了函数 $Sf_\mu^i(\mathbf{k}) f_{\mu'}^{i'}(\mathbf{k}')$, 在此,設 $G_{\mathbf{k}''} = \sum SG_s$, 如此,就可能有下面情况发生: $\Gamma_{\mathbf{k}''}^{i''}$ 的基矢只由这样一些 $Sf_\mu^i(\mathbf{k}) f_{\mu'}^{i'}(\mathbf{k}')$ 的綫性組合构成,在这些綫性組合中,并不含有 $f_\mu^i(\mathbf{k}) f_{\mu'}^{i'}(\mathbf{k}')$ 的成分. 在这样的場合下,积分 A 显然为零,但是根据 Lax 选择定則計算,积分 A 应不为零,因为 $c_{ii'i''}$ 不等于零. 这样, Lax 选择定則对这种情况就得到了不正确的結論. 本方法因考虑了不可約表示本身,故将給出正确的結果,在此情况下,将正确地指出积分 A 为零.

附录 I　在 $G/G_{\mathbf{k}}$ 中封閉子組的存在性

可以証明,在 $G/G_{\mathbf{k}}$ 中总存在有一系列的封閉子組,在极限的情况下, $G/G_{\mathbf{k}}$ 包含有两个明显的封閉子組,即不变操作元素及 $G/G_{\mathbf{k}}$ 本身.

由于空間羣 G 是可解羣,便存在下面的合成商列:

$$G \supset G_{H_n} \supset G_{H_{n-1}} \supset G_{H_{n-2}} \supset \cdots \supset G_{H_2} \supset G_{H_1} \supset G_{\mathbf{k}}.$$

設 $G = \sum\limits_n \alpha_n G_{\mathbf{k}}$, 則 $\{\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_n, \cdots, \alpha_s\}$ 組成了 $G/G_{\mathbf{k}}$, 現在在合成商列中任取一个子羣 G_{H_i}, 并且令

$G_{H_i} = \sum\limits_m \alpha_m^i G_{\mathbf{k}}$, 显然, $\{\alpha_1^i, \alpha_2^i, \cdots, \alpha_m^i, \cdots, \alpha_d^i\}$ 就組成了 $G/G_{\mathbf{k}}$ 中的一个子組,很容易証明这个子組是封閉的,由于 α_m^i, α_n^i 都是 G_{H_i} 的羣元,因此它們的乘积也是 G_{H_i} 的羣元,即 $\alpha_m^i \alpha_n^i = \vartheta_p \in G_{H_i}$, 因为 G_{H_i} 可按 $G_{\mathbf{k}}$ 进行陪集分解,因此 G_{H_i} 的任何元素都可写成 $G_{\mathbf{k}}$ 的陪集形式,即 $\vartheta_p = \alpha_p^i \zeta_t$, 在此 $\zeta_t \in G_{\mathbf{k}}$, 所以, $\alpha_m^i \alpha_n^i = \alpha_p^i \zeta_t$, 根据封閉子組的定义,显然可見子組 $H_{\mathbf{k}}^i$: $\{\alpha_1^i, \alpha_2^i, \cdots, \alpha_m^i, \cdots, \alpha_d^i\}$ 是封閉的.

这样,对每一个 G_{H_i}, 就有一个相应的封閉子組 $H_{\mathbf{k}}^i$, 在 $G_{\mathbf{k}}$ 是空間羣 G 的最大子羣的极限情况下, $G/G_{\mathbf{k}}$ 就只包含有两个明显的封閉子組,即不变操作元素及 $G/G_{\mathbf{k}}$ 本身.

附　录　II

若 $G_{\mathbf{k}} \neq G_{\mathbf{k}'}$, $g_{\mathbf{k}''} = m g_{\mathbf{k}} / l_{\mathbf{k}}^i = m' g_{\mathbf{k}'} / l_{\mathbf{k}'}^{i'}$, 則 $G_{\mathbf{k}''} = (\overline{H}_{\mathbf{k}}^i + \overline{H}_{\mathbf{k}'}^{i'} - H_s) G_s$.

証明: 由正文中的叙述可知,在最大封閉子組 $\overline{H}_{\mathbf{k}}^i$ 內的所有元素 α_m^i 滿足关系 $\alpha_m^i(\mathbf{k} + \rho_n \mathbf{k}') = \mathbf{k} + \mathbf{k}'$, 由于 ζ_n 是波矢羣 $G_{\mathbf{k}}$ 的元素,上式也可写成 $\alpha_m^i \zeta_n(\mathbf{k} + \mathbf{k}')$, 即在最大封閉子組內的所有元素滿足关系式 $\alpha_m^i \rho_n(\mathbf{k} + \mathbf{k}') = \mathbf{k} + \mathbf{k}'$. 同理,在最大封閉子組 $\overline{H}_{\mathbf{k}'}^{i'}$

內的所有元素 $\beta_p^{i'}$ 也满足关系式 $\beta_p^{i'}\rho_t'(\mathbf{k}+\mathbf{k}')=\mathbf{k}+\mathbf{k}'$. 如果 ρ_n, ρ_t' 都是公共羣 G_s 元素，則 $\sum_{m=1}^{n_{\mathbf{k}}^i}\alpha_m^i G_s+\sum_{n=1}^{n_{\mathbf{k}'}^{i'}}\beta_n^{i'}G_s=(\overline{H}_k^i+\overline{H}_{k'}^{i'})G_s$ 将使 $\mathbf{k}+\mathbf{k}'$ 不变，若 H_s 是 $\overline{H}_{\mathbf{k}}^i$ 及 $\overline{H}_{\mathbf{k}'}^{i'}$ 的公共子組，則 H_s 在 $(\overline{H}_{\mathbf{k}}^i+\overline{H}_{\mathbf{k}'}^{i'})$ 中必出現两次. 为了不計入重复的元素，在 $(\overline{H}_{\mathbf{k}}^i+\overline{H}_{\mathbf{k}'}^{i'})$ 中減去 H_s，即 $(\overline{H}_{\mathbf{k}}^i+\overline{H}_{\mathbf{k}'}^{i'}-H_s)G_s$ 內的所有元素都使 $\mathbf{k}+\mathbf{k}'$ 不变，并且，因为 $\overline{H}_{\mathbf{k}}^i$, $\overline{H}_{\mathbf{k}'}^{i}$ 是 $\frac{G}{G_{\mathbf{k}}}$ 及 $\frac{G}{G_{\mathbf{k}'}}$ 的最大封閉子組，因此除 $(\overline{H}_{\mathbf{k}}^i+\overline{H}_{\mathbf{k}'}^{i'}-H_s)G_s$ 內的元素外，再沒有其他元素使 $\mathbf{k}+\mathbf{k}'$ 不变，所以这些元素构成波矢羣 $G_{\mathbf{k}''}$.

附录 III M 矩陣的正交性，$M^+M=B(\alpha,t,i)$

由(16)式得

$$\sum_j M_{kj}^{\alpha'(t'i')+}M_{jn}^{\alpha(ti)}=\sum_j M_{jk}^{\alpha'(t'i')*}M_{jn}^{\alpha(ti)}=$$

$$=A(\alpha,t,i)A^*(\alpha',t',i')\sum_j\sum_{Rs\in G}\Gamma_{kt'}^{\alpha'}(s)\Gamma_{nt}^{\alpha}(R)^*\Gamma_{ji'}'(s)^*\Gamma_{ji}'(R)=$$

$$=A^*(\alpha',t',i')A(\alpha,t,i)\sum_{Rs\in G}\Gamma_{nt}^{\alpha}(R)^*\Gamma_{kt'}^{\alpha'}(s)\Gamma_{i'i}'(s^{-1}R),$$

令 $R=sT$，則

$$\sum_j M_{kj}^{\alpha'(t'i')+}M_{jn}^{\alpha(ti)}=A^*(\alpha',t',i')A(\alpha,t,i)\sum_{sT\in G}\Gamma_{nt}^{\alpha}(sT)^*\Gamma_{kt'}^{\alpha'}(s)\Gamma_{i'i}'(T)=$$

$$=A^*(\alpha',t',i')A(\alpha,t,i)\sum_{sT\in G}\sum_m\Gamma_{nm}^{\alpha}(s)^*\Gamma_{mt}^{\alpha}(T)^*\Gamma_{kt'}^{\alpha'}(s)\Gamma_{i'i}'(T)=$$

$$=A^*(\alpha',t',i')A(\alpha,t,i)\sum_m\delta_{mt'}\delta_{nk}\delta_{\alpha\alpha'}\frac{g}{d_\alpha}\sum_T\Gamma_{mt}^{\alpha}(T)^*\Gamma_{i'i}'(T)=$$

$$=A^*(\alpha',t',i')A(\alpha,t,i)\frac{g}{d_\alpha}\left[\sum_{T\in G}\Gamma_{t't}^{\alpha}(T)^*\Gamma_{i'i}'(T)\right]\delta_{nk}\delta_{\alpha\alpha'}.$$

如果規定对于相同的 α，都采用相同的参变量 t 及 i，則 $\sum_j M_{kj}^{\alpha'(t'i')+}M_{jn}^{\alpha(ti)}=A^2(\alpha,t,i)\frac{g}{d_\alpha}\left[\sum_{T\in G}\Gamma_{tt}^{\alpha}(T)^*\Gamma_{ii}'(T)\right]\delta_{nk}\delta_{\alpha\alpha'}$. 若令 $B(\alpha,t,i)=A^2(\alpha,t,i)\frac{g}{d_\alpha}\left[\sum_{T\in G}\Gamma_{tt}^{\alpha}(T)^*\Gamma_{ii}'(T)\right]$，則

$$M^+M=B(\alpha,t,i).$$

附录 IV 与 Koster 結果的比較

为了和 Koster 的結果进行比較，必須注意，在这里 U 矩陣的定义与 Koster 的定义并不一致，Koster 对 U 矩陣的定义是这样的[2]:

$$U\Gamma'U^{-1}=\begin{pmatrix}\Gamma^{\nu*} & & \\ & \Gamma^{\nu*} & \\ & & \ddots\end{pmatrix},$$

而在这里，U 矩陣的定义是:

$$U\Gamma' U^{-1} = \begin{pmatrix} \Gamma^{\alpha} & & \\ & \Gamma^{\alpha'} & \\ & & \ddots \end{pmatrix}.$$

因此这里的 Γ^{α} 相当于 Koster 的 $\Gamma^{\nu *}$，卽 $\Gamma^{\alpha} = \Gamma^{\nu *}$，若把此关系代入(19)式，卽得 Koster 的結果：

$$U_{jl} = C(\alpha, t, i) \sum_{R \in G} \Gamma^{\nu}_{tj}(R) \Gamma'_{il}(R).$$

附录 V (25)式的証明

为了証明(25)式，首先必須証明准投影算符的准厄密性質：

$$\langle v_k | P^{\alpha}_{jt} | v_i \rangle^* = \langle v_i | P^{\alpha}_{tj} | v_k \rangle.$$

証：

$$\langle v_i | P^{\alpha}_{tj} | v_k \rangle = \left\langle v_i \left| \sum_R \Gamma^{\alpha}_{tj}(R)^* R \right| v_k \right\rangle = \sum_R \Gamma^{\alpha}_{tj}(R)^* \langle v_i | R | v_k \rangle =$$

$$= \sum_R \Gamma^{\alpha}_{tj}(R)^* \Gamma'_{ik}(R) = \sum_R \Gamma^{\alpha}_{jt}(R^{-1}) \Gamma'_{ki}(R^{-1})^* = \left[\sum_T \Gamma^{\alpha}_{jt}(T)^* \Gamma'_{ki}(T) \right]^* =$$

$$= \langle v_k | P^{\alpha}_{jt} | v_i \rangle^*. \tag{V-1}$$

現在再来計算 $P^{\alpha}_{tj} P^{\alpha}_{j't'}$. 由(8)式得

$$P^{\alpha}_{tj} P^{\alpha}_{j't'} = \sum_{R,S} \Gamma^{\alpha}_{tj}(R)^* \Gamma^{\alpha}_{j't'}(s)^* Rs = \sum_{TS} \Gamma^{\alpha}_{tj}(Ts^{-1})^* \Gamma^{\alpha}_{t'j'}(s^{-1}) T =$$

$$= \sum_m \sum_{TS} \Gamma^{\alpha}_{tm}(T)^* \Gamma^{\alpha}_{mj}(S^{-1})^* \Gamma^{\alpha}_{t'j'}(S^{-1}) T = \frac{g}{d_\alpha} \sum_m \sum_T \delta_{mt'} \delta_{jj'} \Gamma^{\alpha}_{tm}(T)^* T =$$

$$= \delta_{jj'} \frac{g}{d_\alpha} \sum_T \Gamma^{\alpha}_{tt'}(T) T = \delta_{jj'} \frac{g}{d_\alpha} P^{\alpha}_{tt'}. \tag{V-2}$$

利用 (V-1) 及 (V-2) 式，由(22)式，很容易得到

$$\langle w^{q_1}_j | w^{q_1}_j \rangle = \sum_k \sum_{k'} \langle v_k | P^{\alpha}_{jt} | v_i \rangle^+ \langle v_{k'} | P^{\alpha}_{jt} | v_i \rangle \langle v_k | v_{k'} \rangle =$$

$$= \sum_{kk'} \langle v_i | P^{\alpha}_{tj} | v_k \rangle \langle v_{k'} | P^{\alpha}_{jt} | v_i \rangle \delta_{kk'} = \langle v_i | P^{\alpha}_{tj} P^{\alpha}_{jt} | v_i \rangle = \frac{g}{d_\alpha} \langle v_i | P^{\alpha}_{tt} | v_i \rangle.$$

同理可証

$$\langle w^{q_1}_j | w^{q_2}_j \rangle = \frac{g}{d_\alpha} \langle v_i | P^{\alpha}_{tt'} | v_{i'} \rangle,$$

由此卽得(25)式.

参 考 文 献

[1] Rose, M. E., Elementary Theory of Angular Momentum, p. 85, John Wiley and Sons, New York, 1957.

[2] Koster, G. F., *Phys. Rev.*, **109** (1958), 227.

[3] Koster, G. F. and Statz, H., *Phys. Rev.*, **113** (1959), 445.

[4] Birman, J. L., *Phys. Rev.*, **127** (1962), 1093.

[5] 谢希德、陈孝琛，物理学报，**20** (1964)，970.

[6] Seitz, F., *Annals of Math.*, **37** (1936), 17.
[7] Lomont, J. S., Applications of Finite Groups, p. 223, Academic Press, New York, 1959.
[8] Lomer, W. M., *Proc. Roy. Soc.*, **A227** (1955),330; Meijer, P. H. E., *Phys. Rev.*, **95** (1954), 1443; Melvin, M. A., *Rev. Mod. Phys.*, **28** (1956), 18; Nielson, J. R. and Birryman, L. H., *J. Chem. Phys.*, **17** (1949), 659; Raghavsharyulu, I. V. V., *Canadian J. Phys.*, **39** (1961), 1704.
[9] Herring, C., *J. Franklin Inst.*, **233** (1942), 525.
[10] Lax, M. and Hopfield, J. J., *Phys. Rev.*, **124** (1961), 115.

THE MATRIX ELEMENT OF SPACE GROUP OPERATORS

Hsü Chih-chung Hsieh Hsi-teh
(*Department of Physics, Fudan University*)

Abstract

It is shown that in the direct product of two wave vector stars $\mathbf{k}\otimes\mathbf{k}'$, if $\mathbf{k}''\in\mathbf{k}\otimes\mathbf{k}'$, the wave vector group, $G_{\mathbf{k}''}$, may belong to any one of the following cases: A) Both $G_{\mathbf{k}}$ and $G_{\mathbf{k}'}$ are subgroups of $G_{\mathbf{k}''}$; B) $G_{\mathbf{k}} = G_{\mathbf{k}'} = G_{\mathbf{k}''}$; C) $G_{\mathbf{k}''} = G_s$; D) G_s is the subgroup of $G_{\mathbf{k}''}$. The reduction of an integral $A = \langle f_{\mu''}^{i''}(k'')|f_{\mu}^{i}(k)|f_{\mu'}^{i'}(k')\rangle$, is then studied for each of the four cases. It is found that for all cases, the value of the integral can be expressed in terms of the matrix element of a transformed matrix U by which the reducible representation has been reduced. The corresponding reducible representations Γ's are respectively: A) $(\Gamma_{\mathbf{k}}^{i}\otimes\Gamma_{\mathbf{k}'}^{i'})^{9}$; B) $\Gamma_{\mathbf{k}}^{i}\otimes\Gamma_{\mathbf{k}'}^{i'}$; C) $\Gamma_{\mathbf{k}}^{i(s)}\otimes\Gamma_{\mathbf{k}'}^{i'(s)}$; and D) $(\Gamma_{\mathbf{k}}^{i(s)}\otimes\Gamma_{\mathbf{k}'}^{i'(s)})^{9}$. The final form of the integral is then obtained by finding the explicit form of the transformation matrix by using the pseudo-projection operator.