配位场理论方法

补编

三维旋转群—点群的偶合系数

唐敖庆 等著

科学出版社

内 容 简 介

本书作为《配位场理论方法》一书的补编，其主要内容是提供三维旋转群 $SO(3)$ 到点群 O 的 V 偶合系数的数值表格和计算机程序，这种程序可以用来计算三维旋转群不可约表示 j 从 $\frac{1}{2}$ 到 $12\frac{1}{2}$ 的全部 V 偶合系数的数值。本书只发表了整数 j 从 1 到 10 和半整数 j 从 $\frac{1}{2}$ 到 $7\frac{1}{2}$ 的 V 偶合系数的数值结果，其它数值结果可用提供的计算机程序完成。

本书可供有关方面的化学工作者、物理工作者以及从事这方面的研究人员使用和参考。

配位场理论方法补编

三维旋转群—点群的偶合系数

唐敖庆 等 著

责任编辑 白明珠

科 学 出 版 社 出 版

北京朝阳门内大街137号

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1988年8月第 一 版　　开本：850×1168 1/32

1988年8月第一次印刷　　印张：17 1/8

印数：0001－1,210　　字数：454,000

ISBN 7-03-000191-5/O·55

定价：15.60元

序

本书作为《配位场理论方法》一书的补编，其主要内容是提供三维旋转群 $SO(3)$—点群 O 的偶合系数的数值表格. 在 60 年代中期，曾经用手算的办法造出对应 $SO(3)$ 群不可约表示从 $j=1$ 到 $j=6$ 的全部表格，这对过渡金属络合物的光、电、磁等性质的理论分析，已基本够用. 但对稀土络合物的结构和性能的理论分析，偶合系数的计算工作量比较大. 因此，由李学奎和赵景愚两位同志设计了 $SO(3)$—O 群偶合系数的 FORTRAN IV 计算机程序，用此程序可以算出从 $j=\frac{1}{2}$ 到 $j=12\frac{1}{2}$ 的整数和半整数的全部数值结果. 本书除了给出从 $j=1$ 到 $j=10$ 的全部整数的数值结果和从 $j=\frac{1}{2}$ 到 $j=7\frac{1}{2}$ 的半整数的数值结果外，并附上了计算机程序，以便有关科学工作者的实际应用.

唐敖庆

目　　录

第 一 部 分

1. V 系数和 W 系数 …………………………………… 3
　(1) $SO(3)$ 群—O 群 V 系数 ………………………………… 3
　(2) O 群的 V 系数和 W 系数 ………………………………… 6
　(3) O 群—D_4 群 V 系数和 O 群—D_3 群 V 系数 ………… 12
　(4) D_4 群的 V 系数和 W 系数 ………………………………… 15
　(5) D_3 群的 V 系数和 W 系数 ………………………………… 16
2. $SO(3)$ 群—O 群 V 系数表和旋转群不可约基向量与 O 群不可约基向量的变换系数表的用法 ……………………… 20
　(1) $SO(3)$ 群—O 群的 V 系数表的用法 ……………………… 20
　(2) 旋转群不可约基向量与 O 群不可约基向量的变换系数表的用法 ………………………………………………… 22

第 二 部 分

1. O，D_4 和 D_3 群的特征标表 ………………………………… 27
2. 特征标表的应用 …………………………………………… 28
　(1) O，D_4 和 D_3 群不可约表示的直积分解表 ………………… 28
　(2) O，D_4 和 D_3 群不可约表示的对称乘方 $[\Gamma^2]$ 和反对称乘方 (Γ^2) 表 ………………………………………………… 29
3. 旋转群不可约表示在 O 群中的分解表 …………………… 30
4. O 群不可约表示在 D_4，D_3 群中的分解表 ………………… 31
5. O 群的 V 系数表和 W 系数表 ……………………………… 32
　(1) O 群的 V 系数表 …………………………………………… 32
　(2) O 群的 W 系数表 …………………………………………… 35

6. D_4群的V系数表和W系数表 …………………………… 41
(1) D_4群的V系数表……………………………………………… 41
(2) D_4群的W系数表……………………………………………… 42
7. D_3群的V系数表和W系数表 …………………………… 43
(1) D_3群的V系数表……………………………………………… 43
(2) D_3群的W系数表……………………………………………… 43
8. O群—D_4群的V系数表 ………………………………… 44
9. O群—D_3群的V系数表 ………………………………… 47
10. $SO(3)$群—O群的V系数表 …………………………… 51
11. 旋转群不可约基向量与O群不可约基向量的变换系数表
…………………………………………………………………… 487

附录 $SO(3)$群—O 群的V系数计算机程序…………………… 526
参考文献…………………………………………………………… 545

第一部分

1. V 系数和 W 系数

在《配位场理论方法》一书中，引进了一类新的偶合系数：旋转群—点群和点群—点群偶合系数。借助于这类偶合系数，就扩大了 Wigner-Eckart 定理的应用范围，使配位场理论中的计算可直接引用原子结构的结果，也能使低配位场的计算可引用八面体配位场的结果。这本书作为《配位场理论方法》一书的补编，主要是提供三维旋转群 $SO(3)$ 到点群 O 的 V 偶合系数的数值表格和计算机程序，这种程序可以用来计算三维旋转群不可约表示 j 从 $\frac{1}{2}$ 到 $12\frac{1}{2}$ 的全部 V 偶合系数的数值。为了避免本书中出现过多的表格，只发表整数 j 从 1 到 10 和半整数 j 从 $\frac{1}{2}$ 到 $7\frac{1}{2}$ 的 V 偶合系数的数值结果，其它没有发表的数值结果可用我们提供的计算机程序来完成。为了本书更为实际应用，和下列群链

$$SO(3) \supset O \supset D_4 \text{ 或 } D_3$$

相关的各类偶合系数表格也列入本书。

为了帮助读者使用本书中的各种表格，下面将各种偶合系数的定义和性质，依次作扼要的说明。

(1) $SO(3)$群—O 群 V 系数

$SO(3)-O$ 群 V 系数定义如下：

$$V\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \Gamma_{1a} & \Gamma_{2b} & \Gamma_{3c} \end{pmatrix}_i = \sqrt{\frac{\lambda(\Gamma_3)}{\lambda(j_3)}}\,(j_1 j_2 \Gamma_{1a} \Gamma_{2b} | j_3 \Gamma_{3c})_i$$

$$= (-1)^{j_1+j_2+j_3} \sum_{\substack{m_1 m_2 m_3 \\ \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3}} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} V\begin{pmatrix} \Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3 \\ \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_3 \end{pmatrix}_i^*$$

$$\cdot S^{j_1^*}_{m_1,\Gamma_{1a}\gamma_1} S^{j_2^*}_{m_2,\Gamma_{2b}\gamma_2} S^{j_3^*}_{m_3,\Gamma_{3c}\gamma_3} \tag{1}$$

$$\sum_i V\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \Gamma_{1a} & \Gamma_{2b} & \Gamma_{3c} \end{pmatrix}_i V\begin{pmatrix} \Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3 \\ \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_3 \end{pmatrix}_i$$

$$= (-1)^{j_1+j_2+j_3} \sum_{m_1 m_2 m_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$$

$$\cdot S^{j_1^*}_{m_1,\Gamma_{1a}\gamma_1} S^{j_2^*}_{m_2,\Gamma_{2b}\gamma_2} S^{j_3^*}_{m_3,\Gamma_{3c}\gamma_3} \tag{2}$$

其中$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$代表 3-$j$ 符号；$S^j_{m,\Gamma\gamma}$ 代表三维旋转群 $SO(3)$ 不可约表示基底与点群 O 的不可约表示基底的变换系数；

$$V\begin{pmatrix} \Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3 \\ \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_3 \end{pmatrix}_i$$

代表 O 群的 V 系数；由于不可约表示 Γ_3 在直积 $\Gamma_1 \otimes \Gamma_2$ 分解中可能重复出现，用 i 来加以区别。

$SO(3)$—O 群 V 系数有下列正交归一性

$$\frac{\lambda(j_3)}{\lambda(\Gamma_3)} \sum_{\substack{i\,a\,b \\ \Gamma_1\Gamma_2}} V\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \Gamma_{1a} & \Gamma_{2b} & \Gamma_{3c} \end{pmatrix}_i V\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3' \\ \Gamma_{1a} & \Gamma_{2b} & \Gamma_{3c'} \end{pmatrix}_i = \delta_{j_3 j_3'}\delta_{cc'} \tag{3}$$

$$\sum_{i j_3 \Gamma_{3c}} \frac{\lambda(j_3)}{\lambda(\Gamma_3)} V\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \Gamma_{1a} & \Gamma_{2b} & \Gamma_{3c} \end{pmatrix}_i V\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \Gamma'_{1a'} & \Gamma'_{2b'} & \Gamma_{3c} \end{pmatrix}^*_i$$

$$= \delta_{\Gamma_1\Gamma_1'}\delta_{\Gamma_2\Gamma_2'}\delta_{aa'}\delta_{bb'} \tag{4}$$

其中 $\lambda(j)$ 和 $\lambda(\Gamma)$ 分别表示不可约表示 j 和 Γ 的维数。

另外，这种 V 系数有如下的对称性

$$V\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3 \end{pmatrix}_i = V\begin{pmatrix} j_2 & j_3 & j_1 \\ \Gamma_2 & \Gamma_3 & \Gamma_1 \end{pmatrix}_i$$

$$= (-1)^{j_1+j_2+j_3+\Gamma_1+\Gamma_2+\Gamma_3}\theta(\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_3)_i V\begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ \Gamma_2 & \Gamma_1 & \Gamma_3 \end{pmatrix}_i \tag{5}$$

其中相因子 $(-1)^{\Gamma}$ 和 $\theta(\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_3)$ 作如下规定

$$(-1)^{A_1} = (-1)^{E} = (-1)^{T_2} = 1$$

$$(-1)^{A_2} = (-1)^{T_1} = -1$$
$$(-1)^{E'} = (-1)^{E''} = (-1)^{1/2}$$
$$(-1)^{U'} = (-1)^{3/2}$$
$$\theta(U'U'T_2)_2 = -1$$
$$\theta(\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_3)_i = \theta(\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_3) = 1 \quad \text{所有其它情况}$$

在时间反演作用下，变换系数 $S^j_{m,\Gamma\gamma}$ 有如下关系式

$$S^{j*}_{m,\Gamma\gamma} = [-1]^{\Gamma-\gamma}(-1)^{j-m}S^j_{m,\Gamma\bar{\gamma}} \tag{6}$$

其中 $\bar{\gamma}$ 代表 $-\gamma$，时间反演相因子$[-1]^{\Gamma-\gamma}$ 的意义为

$$[-1]^{\Gamma-\gamma} = [-1]^{\Gamma}/[-1]^{\gamma} \tag{7}$$

关于 O 群的时间反演相因子$[-1]^{\Gamma}$ 和 $[-1]^{\gamma}$ 的数值列入表 1.1。

表 1.1　O 群复四角组分系相因子 $[-1]^{\Gamma}$和 $[-1]^{\gamma}$ 表

Γ	$[-1]^{\Gamma}$	γ	$\bar{\gamma}$	$[-1]^{\gamma}$
A_1 (或 A_2)	1	a	a	1
E	1	θ	θ	1
		ε	ε	1
T_1 (或 T_2)	-1	1	-1	-1
		0	0	1
		-1	1	-1
E'	$(-1)^{1/2}$	α'	β'	$(-1)^{1/2}$
		β'	α'	$(-1)^{-1/2}$
E''	$(-1)^{1/2}$	α''	β''	$(-1)^{1/2}$
		β''	α''	$(-1)^{-1/2}$
U'	$(-1)^{3/2}$	κ	ν	$(-1)^{3/2}$
		λ	μ	$(-1)^{1/2}$
		μ	λ	$(-1)^{-1/2}$
		ν	κ	$(-1)^{-3/2}$

对于 O 群，变换系数 $S^j_{m,\Gamma\gamma}$ 的数值从 $j = 1/2$ 到 $j = 12\frac{1}{2}$ 全部列入第二部分表 11 中。

(2) O 群的 V 系数和 W 系数

对于 O 群的 V 系数定义为

$$V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_3\end{pmatrix}=\frac{[-1]^{2\Gamma_2+\Gamma_3+\gamma_3}}{\sqrt{\lambda(\Gamma_3)}}(\Gamma_1\Gamma_2\gamma_1\gamma_2|\Gamma_3\bar{\gamma}_3) \tag{8}$$

O 群 V 系数的对称性和酉变换性质可写成下列形式

$$V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_3\end{pmatrix}_i^*=[-1]^{\Gamma_1+\Gamma_2+\Gamma_3-\gamma_1-\gamma_2-\gamma_3}V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ \bar{\gamma}_1 & \bar{\gamma}_2 & \bar{\gamma}_3\end{pmatrix}_i \tag{9}$$

$$\begin{aligned}V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_3\end{pmatrix}_i&=(-1)^{\Gamma_1+\Gamma_2+\Gamma_3}\theta(\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_3)V\begin{pmatrix}\Gamma_2 & \Gamma_1 & \Gamma_3\\ \gamma_2 & \gamma_1 & \gamma_3\end{pmatrix}_i\\ &=(-1)^{\Gamma_1+\Gamma_2+\Gamma_3}\theta(\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_3)V\begin{pmatrix}\Gamma_3 & \Gamma_2 & \Gamma_1\\ \gamma_3 & \gamma_2 & \gamma_1\end{pmatrix}_i\end{aligned} \tag{10}$$

$$\begin{aligned}&\sum_{\gamma_1\gamma_2}V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_3\end{pmatrix}_i V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3'\\ \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_3'\end{pmatrix}_j^*\\ &=\frac{1}{\lambda(\Gamma_3)}\delta_{ij}\delta_{\Gamma_3\Gamma_3'}\delta_{\gamma_3\gamma_3'}\end{aligned} \tag{11}$$

$$\sum_{\Gamma_3\gamma_3 i}\lambda(\Gamma_3)V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_3\end{pmatrix}_i V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ \gamma_1' & \gamma_2' & \gamma_3\end{pmatrix}_i^*=\delta_{\gamma_1\gamma_1'}\delta_{\gamma_2\gamma_2'} \tag{12}$$

O 群 V 系数的全部数值列入第二部分表 5(1)，而 O 群不可约表示的标准化基向量在生成元素作用下的变换性质列入表 1.2。

对于 O 群，W 系数的一般形式可以定义为

$$\begin{aligned}W\begin{pmatrix}a & b & c\\ d & e & f\end{pmatrix}_{\mu\nu\sigma\pi}&=\sum_{\substack{\alpha\beta\gamma\\ \delta\varepsilon\varphi}}[-1]^{a-\alpha+b-\beta+c-\gamma+d-\delta+e-\varepsilon+f-\varphi}\\ &\cdot V\begin{pmatrix}a & b & c\\ \bar{\alpha} & \bar{\beta} & \bar{\gamma}\end{pmatrix}_\mu V\begin{pmatrix}a & e & f\\ \alpha & \varepsilon & \bar{\varphi}\end{pmatrix}_\nu\\ &\cdot V\begin{pmatrix}d & b & f\\ \bar{\delta} & \beta & \varphi\end{pmatrix}_\sigma V\begin{pmatrix}d & e & c\\ \delta & \bar{\varepsilon} & \gamma\end{pmatrix}_\pi\end{aligned} \tag{13}$$

它不为零的必要条件是

$$\delta(a\,b\,c)_\mu\delta(a\,e\,f)_\nu\delta(d\,b\,f)_\sigma\delta(d\,e\,c)_\pi=1$$

$$\delta(a\ b\ c)_\mu=\begin{cases}1 & \text{当 } a\times b\supset c^{(\mu)}\\ 0 & \text{当 } a\times b\not\supset c^{(\mu)}\end{cases}$$

W系数具有下列两种类型的对称性:

(a) 任二列交换时，一般W系数不变，只在个别情况下，可能改变一符号，例如

$$W\begin{pmatrix}a & b & c\\ d & e & f\end{pmatrix}_{\mu\nu\sigma\kappa}=\theta W\begin{pmatrix}b & a & c\\ e & d & f\end{pmatrix}_{\mu\sigma\nu\kappa}$$

$$=\theta W\begin{pmatrix}c & b & a\\ f & e & d\end{pmatrix}_{\mu\kappa\sigma\nu} \tag{14}$$

$$\theta=\theta(a\,b\,c)_\mu\theta(a\,e\,f)_\nu\theta(d\,b\,f)_\sigma\theta(d\,e\,c)_\kappa=\pm1$$

(b) 任二列中两对不可约表示作行交换时，W系数不变，例如

$$W\begin{pmatrix}a & b & c\\ d & e & f\end{pmatrix}_{\mu\nu\sigma\kappa}=W\begin{pmatrix}d & e & c\\ a & b & f\end{pmatrix}_{\kappa\sigma\nu\mu}$$

$$=W\begin{pmatrix}a & e & f\\ d & b & c\end{pmatrix}_{\nu\mu\kappa\sigma} \tag{15}$$

W系数还有一些其它性质，如W系数的酉变换性质可以写成

$$\sum_c \lambda(c)W\begin{pmatrix}a & b & c\\ d & e & f\end{pmatrix}_{\mu\nu\sigma\kappa}W\begin{pmatrix}a & b & c\\ d & e & g\end{pmatrix}_{\mu\nu'\sigma'\kappa}$$

$$=\frac{\delta_{fg}\delta(a\,e\,f)_\nu\delta(d\,b\,f)_{\sigma'}\Theta}{\lambda(f)} \tag{16}$$

其中

$$\Theta=\theta(a\,f\,e)_\nu\theta(b\,d\,f)_\sigma\theta(b\,d\,f)_{\sigma'}\theta(a\,f\,e)_{\nu'}$$

$$\sum_c(-1)^{c+f+g}\lambda(c)W\begin{pmatrix}a & b & c\\ d & e & f\end{pmatrix}_{\mu\nu\sigma\kappa}W\begin{pmatrix}a & b & c\\ e & d & g\end{pmatrix}_{\mu\nu'\sigma'\kappa}$$

$$=\Theta_1 W\begin{pmatrix}a & e & f\\ b & d & g\end{pmatrix}_{\nu\nu'\sigma'\sigma} \tag{17}$$

其中

$$\Theta_1=\theta(f\,b\,d)_\sigma\theta(c\,e\,d)_\kappa\theta(e\,b\,g)_{\sigma'}$$

在第二部分表 5(2)中，列入了O群W系数的全部数值。

表 1.2　O 群不可约表示的标准化基向量在生成元素作用下的变换性质

点群不可约表示		不可约表示基向量	C_4^z	C_3^{xyz}	举　例
Bethe	Mulliken				
Γ_1	A_1	(a_1)	(1)	(1)	$a_1 = x^2 + y^2 + z^2$
Γ_2	A_2	(a_2)	(-1)	(-1)	$a_2 = xyz$
Γ_3	E	(θ, ε)	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$	$\theta = 2z^2 - x^2 - y^2$ $\varepsilon = \sqrt{3}(x^2 - y^2)$

Γ_4	T_1	(x, y, z)	$\begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$x = x$ $y = y$ $z = z$
Γ_5	T_2	(ξ, η, ζ)	$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\xi = yz$ $\eta = zx$ $\zeta = xy$

表 1.2 （续）

点群不可约表示		不可约表示基向量	C_4^z	C_4^y	举例
Bethe	Mulliken				
Γ_6	E'	(α', β')	$\begin{bmatrix} \frac{1-i}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{1+i}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$	$\alpha' = \psi_{1/2}^{1/2}$ $\beta' = \psi_{1/2}^{-1/2}$
Γ_7	E''	(α'', β'')	$\begin{bmatrix} \frac{-1+i}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{-1-i}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$	$\alpha'' = xyz\psi_{1/2}^{1/2}$ $\beta'' = xyz\psi_{1/2}^{-1/2}$

Γ_8	U'	$(\kappa, \lambda, \mu, \nu)$	$\begin{bmatrix} \frac{-1-i}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1-i}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1+i}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{-1+i}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \frac{1}{2\sqrt{2}} & -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2}} & \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2}} & -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{2}} \\ \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2}} & -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{2}} & -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{2}} & \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2}} \\ \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2}} & \frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{2}} & -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{2}} & -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2}} \\ \frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{2}} & \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2}} & \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2}} & \frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{2}} \end{bmatrix}$	$\kappa = \phi^{3/2}_{3/2}$ $\lambda = \phi^{3/2}_{1/2}$ $\mu = \phi^{3/2}_{\bar{1}/2}$ $\nu = {}^{3/2}_{\bar{3}/2}$

(3) O 群—D_4 群 V 系数和 O 群—D_3 群 V 系数

D_4 群是 O 群的一个子群，O 群—D_4 群 V 系数按下式定义

$$V\begin{pmatrix} \Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3 \\ P_1 & P_2 & P_3 \end{pmatrix}_i = \sqrt{\frac{\lambda(P_3)}{\lambda(\Gamma_3)}}(\Gamma_1\Gamma_2P_1P_2|\Gamma_3P_3)_i$$
$$= \sum_{\substack{\gamma_1\gamma_2\gamma_3 \\ \rho_1\rho_2\rho_3}} V\begin{pmatrix} \Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3 \\ \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_3 \end{pmatrix}_i V\begin{pmatrix} P_1 & P_2 & P_3 \\ \rho_1 & \rho_2 & \rho_3 \end{pmatrix}^*$$
$$\cdot S^{\Gamma_1^*}_{\gamma_1,P_1\rho_1} S^{\Gamma_2^*}_{\gamma_2,P_2\rho_2} S^{\Gamma_3^*}_{\gamma_3,P_3\rho_3} \qquad (18)$$

其中 Γ 和 P 为 O 群和 D_4 群的不可约表示；等式右边的第一和第二个 V 分别为 O 群和 D_4 群的 V 系数。

O 群—D_4 群 V 系数，具有下列酉变换性质

$$\frac{\lambda(\Gamma_3)}{\lambda(P_3)}\sum_{P_1P_2} V\begin{pmatrix} \Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3 \\ P_1 & P_2 & P_3 \end{pmatrix}_i V\begin{pmatrix} \Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3' \\ P_1 & P_2 & P_3 \end{pmatrix}^*_j = \delta_{\Gamma_3\Gamma_3'}\delta_{ij} \qquad (19)$$

$$\sum_{P_3}\frac{\lambda(\Gamma_3)}{\lambda(P_3)} V\begin{pmatrix} \Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3 \\ P_1 & P_2 & P_3 \end{pmatrix}_i V\begin{pmatrix} \Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3 \\ P_1' & P_2' & P_3 \end{pmatrix}^*_i = \delta_{P_1P_1'}\delta_{P_2P_2'} \qquad (20)$$

和对称性

$$V\begin{pmatrix} \Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3 \\ P_1 & P_2 & P_3 \end{pmatrix}_i$$
$$= V\begin{pmatrix} \Gamma_2 & \Gamma_3 & \Gamma_1 \\ P_2 & P_3 & P_1 \end{pmatrix}_i$$
$$= (-1)^{\Gamma_1+\Gamma_2+\Gamma_3+P_1+P_2+P_3}\theta(P_1P_2P_3)V\begin{pmatrix} \Gamma_2 & \Gamma_1 & \Gamma_3 \\ P_2 & P_1 & P_3 \end{pmatrix}_i \qquad (21)$$

对于 D_4 群，相因子 $(-1)^P$ 和 $\theta(P_1P_2P_3)$ 定义为

$$(-1)^{A_1} = (-1)^{B_1} = (-1)^{B_2} = 1$$
$$(-1)^{A_2} = (-1)^{E} = -1$$
$$(-1)^{E'} = (-1)^{E''} = (-1)^{1/2}$$
$$\theta(P_1P_2P_3) = 1$$

在 (18) 式中，O 群不可约表示向 D_4 群不可约表示分解的