# 正二十面体群对称性及其相关李代数

孙家钟　孙仁安　李学奎　李伯符

（吉林大学理论化学研究所，长春）

**摘　　要**

本文沿着以正二十面体群为出发点的群链途径，建立了具有正二十面体对称性的李代数．并因此详细讨论和计算了正二十面体群的 $V$-系数、$W$-系数．

正二十面体群，又称 I 群(或 K 群)，是比较大的点群，它有很多子群．因此，在正二十面体对称群的基础上，建立李代数，对处理分子物理中多体问题是很有价值的[1-8]．为此，我们首先讨论并计算了正二十面体群的 $V$-系数和 $W$-系数[9-12,2,4]．进而在准自旋图象中建立了正二十面体群的李代数[5,13-15]．

## 一、正二十面体群不可约表示基矢量的标准化

正二十面体群有 120 个元素，分属九个共轭类．对于它的基矢量可按文献 [4] 中讨论的方法标准化．

对于空间反演，标准化基矢量满足关系：

$$P_R\phi_{\Gamma r} = \sum_{r'} D^{\Gamma}_{r'r}(R)\phi_{\Gamma r'}, \tag{1}$$

表 1　I 群时间反演相因子

| $\Gamma$ | $[-1]^{\Gamma}$ | $\gamma$ | $\bar{\gamma}$ | $[-1]^{\gamma}$ |
|---|---|---|---|---|
| $A$ | 1 | $a$ | $a$ | 1 |
| $T_1$ | $-1$ | $1\ 0\ \bar{1}$ | $\bar{1}\ 0\ 1$ | $-1\ 1\ -1$ |
| $T_2$ | $-1$ | $1\ 0\ \bar{1}$ | $\bar{1}\ 0\ 1$ | $-1\ 1\ -1$ |
| $U$ | $-1$ | $\xi\ 1\ 0\ \bar{1}$ | $\xi\ \bar{1}\ 0\ 1$ | $-1\ -1\ 1\ -1$ |
| $V$ | 1 | $\phi\ \chi\ 1\ 0\ \bar{1}$ | $\phi\ \chi\ \bar{1}\ 0\ 1$ | $1\ 1\ 1\ -1\ 1$ |
| $E'$ | $(-1)^{1/2}$ | $\alpha'\beta'$ | $\beta'\alpha'$ | $(-1)^{1/2}\ (-1)^{-1/2}$ |
| $E''$ | $(-1)^{7/2}$ | $\alpha''\ \beta''$ | $\beta''\ \alpha''$ | $(-1)^{1/2}\ (-1)^{-1/2}$ |
| $U'$ | $(-1)^{3/2}$ | $\kappa\ \lambda\ \mu\ \nu$ | $\nu\ \mu\ \lambda\ \kappa$ | $(-1)^{3/2}\ (-1)^{1/2}\ (-1)^{-1/2}\ (-1)^{-3/2}$ |
| $W'$ | $(-1)^{5/2}$ | $\theta\ \iota\ \kappa\ \lambda\ \mu\ \nu$ | $\nu\ \mu\ \lambda\ \kappa\ \iota\ \theta$ | $(-1)^{5/2}\ (-1)^{3/2}(-)^{1/2}\ (-1)^{-1/2}\ (-1)^{-3/2}\ (-1)^{-5/2}$ |

本文 1982 年 5 月 3 日收到．

其中 $P_R$ 为对应于群元素 $R$ 的算子，$D^{\Gamma}_{r'r}(R)$ 是不可约表示矩阵的矩阵元.

对于时间反演,标准化基矢量满足关系:

$$K_0\phi_{\Gamma r} = \phi^*_{\Gamma r} = [-1]^{\Gamma-r}\phi_{\Gamma\bar{r}}, \tag{2}$$

式中 $K_0$ 为时间反演算子，$[-1]^{\Gamma-r}$ 是时间反演相因子[4]. 由于 $K_0$ 与 $P_R$ 对易,由 (1) 式得到

$$D^{\Gamma}_{r'r}(R)^* = [-1]^{\Gamma-r'+\Gamma-r}D^{\Gamma}_{\bar{r}'\bar{r}}, \tag{3}$$

其中 $\bar{r}$ 表示 $-r$. 对于 I 群全部时间反演相因子的数值列于表 1 中.

## 二、正二十面体群的 V-系数

点群不可约基矢量之间的耦合关系为:

$$\phi^{(i)}_{\Gamma_3 r_3} = \sum_{r_1r_2}(\Gamma_1\Gamma_2r_1r_2|\Gamma_3r_3)_i\phi_{\Gamma_1r_1}\phi_{\Gamma_2r_2}, \tag{4}$$

式中 $i$ 表示 $\Gamma_3$ 在直积 $\Gamma_1\times\Gamma_2$ 中出现的重复度，$(\Gamma_1\Gamma_2r_1r_2|\Gamma_3r_3)_i$ 为点群的矢量耦合系数,它与表示矩阵的关系为[4]:

$$\sum_{r_3'}(\Gamma_1\Gamma_2r_1'r_2'|\Gamma_3r_3')_iD^{\Gamma_3}_{r_3'r_3}(R) = \sum_{r_1r_2}(\Gamma_1\Gamma_2r_1r_2|\Gamma_3r_3)_iD^{\Gamma_1}_{r_1'r_1}(R)D^{\Gamma_2}_{r_2'r_2}(R). \tag{5}$$

我们定义点群的 $V$-系数为:

$$V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ r_1 & r_2 & r_3\end{pmatrix}_i = \frac{[-1]^{2\Gamma_2+\Gamma_3+r_3}}{\sqrt{\lambda(\Gamma_3)}}(\Gamma_1\Gamma_2r_1r_2|\Gamma_3\bar{r}_3)_i. \tag{6}$$

其中 $\lambda(\Gamma_3)$ 为不可约表示 $\Gamma_3$ 的维数. $V$-系数具有如下的性质

$$V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ r_1 & r_2 & r_3\end{pmatrix}_i^* = [-1]^{\Gamma_1-r_1+\Gamma_2-r_2+\Gamma_3-r_3}V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ \bar{r}_1 & \bar{r}_2 & \bar{r}_3\end{pmatrix}_i, \tag{7}$$

和

$$V\begin{pmatrix}\Gamma_i & \Gamma_j & \Gamma_k\\ r_i & r_j & r_k\end{pmatrix} = (-1)^{\Gamma_1+\Gamma_2+\Gamma_3}\theta(\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_3)_iV\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ r_1 & r_2 & r_3\end{pmatrix}_i. \tag{8}$$

这里 $(i, j, k)$ 为 $(1, 2, 3)$ 的某种置换. 由于直积分解的对称性和反对称性，可以得到 I 群的相因子

$$\begin{aligned}&(-1)^A = (-1)^U = (-1)^V = 1,\ (-1)^{T_1} = (-1)^{T_2} = -1,\\ &(-1)^{E'} = (-1)^{E''} = (-1)^{\frac{1}{2}},\ (-1)^{U'} = (-1)^{\frac{3}{2}},\\ &(-1)^{W'} = (-1)^{\frac{5}{2}}.\end{aligned} \tag{9}$$

$$\begin{cases}\theta(VVU)_1 = \theta(W'W'U)_2 = \theta(W'W'V)_2 = -1,\\ \theta(\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_3)_i = 1\ (\text{所有其他情况}).\end{cases}$$

把 (6) 式代到 (5) 式，得到

$$\sum_{r_3'}V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ r_1' & r_2' & r_3'\end{pmatrix}_iD^{\Gamma_3}_{r_3'r_3}(R)^* = \sum_{r_1r_2}V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ r_1 & r_2 & r_3\end{pmatrix}_iD^{\Gamma_1}_{r_1'r_1}(R)D^{\Gamma_2}_{r_2'r_2}(R). \tag{10}$$

由 (10) 式可具体计算 I 群的 $V$-系数.

有不可约表示 $A$ 出现的 $V$-系数，其值可由如下封闭公式计算

$$V\begin{pmatrix} A & \Gamma & \Gamma' \\ a & \gamma & \gamma' \end{pmatrix} = \frac{[-1]^{\Gamma+\gamma}}{\sqrt{\lambda(\Gamma)}}\,\delta_{\Gamma\Gamma'}\delta_{\bar{\gamma}\gamma'}. \tag{11}$$

## 三、正二十面体群的 W-系数

I 群的 $W$-系数定义为：

$$W\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{pmatrix}_{\mu\nu\sigma\pi} = \Sigma[-1]^{a-\alpha+b-\beta+c-\gamma+d-\delta+e-\epsilon+f-\varphi}$$

$$\cdot V\begin{pmatrix} a & b & c \\ \bar{\alpha} & \bar{\beta} & \bar{\gamma} \end{pmatrix}_{\mu} V\begin{pmatrix} a & e & f \\ \alpha & \epsilon & \bar{\varphi} \end{pmatrix}_{\nu} V\begin{pmatrix} d & b & f \\ \bar{\delta} & \beta & \varphi \end{pmatrix}_{\sigma} V\begin{pmatrix} d & e & c \\ \delta & \bar{\epsilon} & \gamma \end{pmatrix}_{\pi}, \tag{12}$$

其中 $\mu, \nu, \sigma, \pi$ 表示直积重复度.

$W$-系数具有下列两种对称性

$$W\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{pmatrix}_{\mu\nu\sigma\pi} = W\begin{pmatrix} d & e & c \\ a & b & f \end{pmatrix}_{\pi\sigma\nu\mu} = W\begin{pmatrix} a & e & f \\ d & b & c \end{pmatrix}_{\nu\mu\pi\sigma} \tag{13}$$

和

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

式中

$$\theta = \theta(abc)_{\mu}\theta(aef)_{\nu}\theta(dbf)_{\sigma}\theta(dec)_{\pi}.$$

由 $W$-系数定义，利用其对称性和点群 $V$-系数值可计算 $W$-系数.

假如 $W$-系数中有一个不可约表示是 $A$，则 (12) 式可简化为：

$$W\begin{pmatrix} A & b & c \\ d & e & f \end{pmatrix} = (-1)^{b+d+e}\{\lambda(b)\lambda(e)\}^{-\frac{1}{2}}\delta_{bc}\delta_{ef}\delta(dbe). \tag{15}$$

## 四、李代数和正二十面体对称性

现在，我们选择以正二十面体群作为群链起点的方式来建立李代数.

具有正二十面体对称性的分子轨道可写为：

$$|S\Gamma\alpha\gamma\rangle, \tag{16}$$

其中 $S=\frac{1}{2}$ 描写分子轨道自旋对称性，$\Gamma$ 表示 I 群的不可约表示，描写分子轨道的轨道对称性. $\alpha, \gamma$ 分别为 $S, \Gamma$ 的分量. 由这种分子轨道可定义具有 I 群对称性的产生和消灭算子

$$\begin{aligned} a^{+}_{\alpha\gamma}(S\Gamma)|0\rangle &= |S\Gamma\alpha\gamma\rangle, \\ a_{\alpha\gamma}(S\Gamma)|S\Gamma\alpha\gamma\rangle &= |0\rangle. \end{aligned} \tag{17}$$

这些产生和消灭算子在空间和时间反演变换下有如下关系：

$$K_0 a^{+}_{\alpha\gamma}(S\Gamma)K_0 = \tilde{a}^{+}_{\alpha\gamma}(S\Gamma) = (-1)^{S-\alpha}[-1]^{\Gamma-\gamma}a^{+}_{\bar{\alpha}\bar{\gamma}}(S\Gamma), \tag{18}$$

$$K_0 a_{\alpha\gamma}(S\Gamma)K_0 = \tilde{a}_{\alpha\gamma}(S\Gamma) = (-1)^{S-\alpha}[-1]^{\Gamma-\gamma}a_{\alpha\gamma}(S\Gamma), \tag{19}$$

$$P_R a^{+}_{\alpha\gamma}(S\Gamma)P_{R^{-1}} = \sum_{\alpha'\gamma'} D^{\Gamma}_{\gamma'\gamma}(R)D^{S}_{\alpha'\alpha}(R)a^{+}_{\alpha'\gamma'}(S\Gamma), \tag{20}$$

$$P_R a_{\alpha\gamma}(S\Gamma)P_{R^{-1}} = \sum_{\alpha'\gamma'} D^{\Gamma}_{\gamma'\gamma}(R) D^{S}_{\alpha'\alpha}(R) a_{\alpha'\gamma'}(S\Gamma). \tag{21}$$

它们还满足 Fermi 反交换关系，亦即

$$[a^+_{\alpha\gamma}(S\Gamma),\ a_{\alpha'\gamma'}(S\Gamma')]_+ = \delta_{\Gamma\Gamma'}\delta_{\alpha\alpha'}\delta_{\gamma\gamma'}, \tag{22}$$

$$[a^+_{\alpha\gamma}(S\Gamma),\ a^+_{\alpha'\gamma'}(S\Gamma')]_+ = 0, \tag{23}$$

$$[a_{\alpha\gamma}(S\Gamma),\ a_{\alpha'\gamma'}(S\Gamma')]_+ = 0. \tag{24}$$

由 (17) 式所定义的产生和消灭算子，进一步可以定义具有正二十面体对称性的准自旋算子 $Q$ 为：

$$Q_+ = \frac{1}{2}\sum_{\Gamma\alpha\gamma} a^+_{\alpha\gamma}(S\Gamma)\tilde{a}^+_{\alpha\gamma}(S\Gamma), \tag{25}$$

$$Q_- = -\frac{1}{2}\sum_{\Gamma\alpha\gamma} a_{\alpha\gamma}(S\Gamma)\tilde{a}_{\alpha\gamma}(S\Gamma), \tag{26}$$

$$Q_0 = \frac{1}{2}\left[\sum_{\Gamma\alpha\gamma} a^+_{\alpha\gamma}(S\Gamma)a_{\alpha\gamma}(S\Gamma) - \lambda\right], \tag{27}$$

式中 $\lambda = \sum_{i=1}^{\mu}\lambda(\Gamma_i)$ 表示混合组态 $\Gamma_1^{n_1}\Gamma_2^{n_2}\cdots\Gamma_\mu^{n_\mu}$ 的维数．容易证明，准自旋算子满足如下交换关系：

$$\begin{aligned}&[Q_0,\ Q_\pm] = \pm Q_\pm,\\ &[Q_+,\ Q_-] = 2Q_0.\end{aligned} \tag{28}$$

显然它产生一个准自旋群 $SU^Q(2)$．

由产生和消灭算子满足的反交换关系，可得到它们与准自旋算子的交换关系为：

$$\begin{aligned}&[Q_+,\ a^+_{\alpha\gamma}(S\Gamma)] = 0, && [Q_+,\ \tilde{a}_{\alpha\gamma}(S\Gamma)] = a^+_{\alpha\gamma}(S\Gamma),\\ &[Q_-,\ a^+_{\alpha\gamma}(S\Gamma)] = \tilde{a}_{\alpha\gamma}(S\Gamma), && [Q_-,\ \tilde{a}_{\alpha\gamma}(S\Gamma)] = 0,\\ &[Q_0,\ a^+_{\alpha\gamma}(S\Gamma)] = \frac{1}{2}a^+_{\alpha\gamma}(S\Gamma), && [Q_0,\ \tilde{a}_{\alpha\gamma}(S\Gamma)] = -\frac{1}{2}\tilde{a}_{\alpha\gamma}(S\Gamma).\end{aligned} \tag{29}$$

这说明产生和消灭算子 $a^+$ 与 $\tilde{a}$ 构成准自旋空间秩 $q=\frac{1}{2}$ 的张量算子 $\beta=\frac{1}{2}$ 和 $-\frac{1}{2}$ 的两个分量．因而这种算子实质上是具有 $q=\frac{1}{2}$，$S=\frac{1}{2}$ 的准自旋、自旋和轨道空间的三张量算子，记作

$$a_{\beta\alpha\gamma}(qS\Gamma) = \begin{cases} a_{\frac{1}{2}\alpha\gamma}(qS\Gamma) \equiv a^+_{\alpha\gamma}(S\Gamma),\\ a_{-\frac{1}{2}\alpha\gamma}(qS\Gamma) \equiv \tilde{a}_{\alpha\gamma}(S\Gamma).\end{cases} \tag{30}$$

三张量算子满足反交换关系：

$$[a_{\beta\alpha\gamma}(qS\Gamma),\ a_{\beta'\alpha'\gamma'}(qS\Gamma')]_+ = (-1)^{q-\beta}(-1)^{s+\alpha}[-1]^{\Gamma+\gamma}\delta_{\Gamma\Gamma'}\delta_{\beta\bar{\beta}'}\delta_{\alpha\bar{\alpha}'}\delta_{\gamma\bar{\gamma}'}. \tag{31}$$

进而，利用点群 $V$-系数和 3-$j$ 符号，可以引进由点群不可约表示 $\Gamma$，准自旋秩 $\chi$ 和自旋量子数 $\omega$ 所标志的耦合积算子为：

$$W^{(\chi\omega\kappa)}_{\eta\rho\zeta}(\Gamma\Gamma' i) = \sum_{\beta\beta'\alpha\alpha'\gamma\gamma'}[\lambda(\chi)\lambda(\omega)\lambda(\kappa)]^{\frac{1}{2}}(-1)^{\eta}(-1)^{\rho}[-1]^{\kappa-\zeta} \cdot \begin{pmatrix} q & q & \chi\\ \beta & \beta' & \bar{\eta}\end{pmatrix}\begin{pmatrix} S & S & \omega\\ \alpha & \alpha' & \bar{\rho}\end{pmatrix} V\begin{pmatrix}\Gamma & \Gamma' & \kappa\\ \gamma & \gamma' & \bar{\zeta}\end{pmatrix}_i a_{\beta\alpha\gamma}(qS\Gamma)a_{\beta'\alpha'\gamma'}(qS\Gamma'). \tag{32}$$

必须指出，如此定义的三张量耦合积算子并非都是独立的，其间存在如下关系

$$W_{\eta\rho\zeta}^{(\chi\omega\kappa)}(\Gamma\Gamma' i) = -(-1)^{\chi+\omega+\kappa+\Gamma+\Gamma'}\theta(\Gamma\Gamma'\kappa)_i W_{\eta\rho\zeta}^{(\chi\omega\kappa)}(\Gamma'\Gamma i) - 2\sqrt{\lambda(\Gamma)}\,\delta_{\Gamma\Gamma'}\delta_{0\chi}\delta_{0\omega}\delta_{A\kappa}. \quad (33)$$

从而，考虑方程 (8)，(14)，(32)，则我们得到具有正二十面体对称性的李交换关系：

$$\begin{aligned}
&[W_{\eta_1\rho_1\zeta_1}^{(\chi_1\omega_1\kappa_1)}(\Gamma_1\Gamma_1' i),\ W_{\eta_2\rho_2\zeta_2}^{(\chi_2\omega_2\kappa_2)}(\Gamma_2\Gamma_2' j)] = \sum_{\substack{\chi_3\omega_3\kappa_3\\ \eta_3\rho_3\zeta_3\\ kl}} \left[\prod_{t=1}^{3}\lambda(\chi_t)\lambda(\omega_t)\lambda(\kappa_t)\right]^{\frac{1}{2}}\\
&\cdot(-1)^{\chi_3+\eta_3}(-1)^{\omega_3+\rho_3}[-1]^{\kappa_3+\zeta_3}\begin{Bmatrix}\chi_1 & \chi_2 & \chi_3\\ q & q & q\end{Bmatrix}\begin{Bmatrix}\omega_1 & \omega_2 & \omega_3\\ S & S & S\end{Bmatrix}\begin{pmatrix}\chi_1 & \chi_2 & \chi_3\\ \eta_1 & \eta_2 & \bar\eta_3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\omega_1 & \omega_2 & \omega_3\\ \rho_1 & \rho_2 & \bar\rho_3\end{pmatrix} V\begin{pmatrix}\kappa_1 & \kappa_2 & \kappa_3\\ \zeta_1 & \zeta_2 & \bar\zeta_3\end{pmatrix}_k\\
&\cdot\Big\{-\delta_{\Gamma_2'\Gamma_2}(-1)^{\chi_1+\chi_2}(-1)^{\omega_1+\omega_2}(-1)^{\Gamma_1+\Gamma_2'+\kappa_3}\theta(\Gamma_1\Gamma_2'\kappa_3)_l W\begin{pmatrix}\kappa_1 & \kappa_2 & \kappa_3\\ \Gamma_2' & \Gamma_1 & \Gamma_2\end{pmatrix}_{kijl} W_{\eta_3\rho_3\zeta_3}^{(\chi_3\omega_3\kappa_3)}(\Gamma_1\Gamma_2' l)\\
&+\delta_{\Gamma_1\Gamma_2}(-1)^{\chi_2+\omega_2}(-1)^{\kappa_1+\kappa_3+\Gamma_1'+\Gamma_2'}\theta(\Gamma_2'\Gamma_1'\kappa_3)_l\theta(\Gamma_1\Gamma_1'\kappa_1)_i W\begin{pmatrix}\kappa_1 & \kappa_2 & \kappa_3\\ \Gamma_2' & \Gamma_1' & \Gamma_2\end{pmatrix}_{kijl} W_{\eta_3\rho_3\zeta_3}^{(\chi_3\omega_3\kappa_3)}(\Gamma_1\Gamma_2' l)\\
&+\delta_{\Gamma_1\Gamma_2'}(-1)^{\chi_3+\omega_3}(-1)^{\kappa_1+\kappa_2+\Gamma_1'+\Gamma_2}\theta(\Gamma_1'\Gamma_2\kappa_3)_l W\begin{pmatrix}\kappa_1 & \kappa_2 & \kappa_3\\ \Gamma_2 & \Gamma_1' & \Gamma_2'\end{pmatrix}_{kijl} W_{\eta_3\rho_3\zeta_3}^{(\chi_3\omega_3\kappa_3)}(\Gamma_2\Gamma_1' l)\\
&-\delta_{\Gamma_1'\Gamma_2'}(-1)^{\chi_1+\chi_3}(-1)^{\omega_1+\omega_3}(-1)^{\kappa_2+\Gamma_1'+\Gamma_2}\theta(\Gamma_1'\Gamma_2\kappa_2)_j W\begin{pmatrix}\kappa_1 & \kappa_2 & \kappa_3\\ \Gamma_2 & \Gamma_1 & \Gamma_2'\end{pmatrix}_{kijl} W_{\eta_3\rho_3\zeta_3}^{(\chi_3\omega_3\kappa_3)}(\Gamma_2\Gamma_1 l)\Big\}, \quad (34)
\end{aligned}$$

式中 (:::) 为 3-$j$ 符号，{:::} 为 6-$j$ 符号．相因子 $[-1]^{\Gamma-\gamma}$ 列在表 1，$(-1)^{\Gamma}$ 和 $\theta(\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_3)_i$ 由方程 (9) 给出．这些相因子确定得正确与否，将直接关系到李交换关系是否成立．

对混合组态 $\Gamma_1^{n_1}\Gamma_2^{n_2}\cdots\Gamma_\mu^{n_\mu}$，可由 (34) 式的李交换关系产生出各种群链来描述分子物理中的不同计算方案．现以组态 $t_2^m u^n$ 的一条群链为例，予以说明．亦即

$$SO(29)\supset SO(28)\supset SU^Q(2)\times\{Sp(14)\supset SU^S(2)\times[SO(7)\supset G_2\supset SO(3)\supset I]\}. \quad (35)$$

不难看到，群链中各子群的下列诸李算子均满足李交换关系 (34) 式．

$SO(29)$: $a_{\beta\alpha\gamma}(qS\Gamma)$，$\Gamma=\Gamma_2, U$；和 $SO(28)$ 的李算子

$SO(28)$:

$$\begin{aligned}
\Lambda_{\eta\rho\zeta}^{(\chi\omega\kappa)}(\Gamma\Gamma') &= (-1)^{1+\chi+\omega+\kappa+\Gamma+\Gamma'}\Lambda_{\eta\rho\zeta}^{(\chi\omega\kappa)}(\Gamma'\Gamma)\\
&= \frac{1}{2}[W_{\eta\rho\zeta}^{(\chi\omega\kappa)}(\Gamma\Gamma') - (-1)^{\chi+\omega+\kappa+\Gamma+\Gamma'}W_{\eta\rho\zeta}^{(\chi\omega\kappa)}(\Gamma'\Gamma)];
\end{aligned}$$

$$\Gamma=\Gamma'=T_2,\quad \chi=0\begin{cases}\omega=0,\ \kappa=T_2,\\ \omega=1,\ \kappa=A,\ V,\end{cases}$$

$$\chi=1\begin{cases}\omega=0,\ \kappa=A,\ V,\\ \omega=1,\ \kappa=T_2,\end{cases}$$

$$\Gamma=\Gamma'=U,\quad \chi=0,\quad \begin{cases}\omega=0,\ \kappa=T_1,\ T_2,\\ \omega=1,\ \kappa=A,\ U,\ V,\end{cases}$$

$$\chi=1,\quad \begin{cases}\omega=0,\ \kappa=A,\ U,\ V,\\ \omega=1,\ \kappa=T_1,\ T_2;\end{cases}$$

$$\Gamma=T_2,\ \Gamma'=U,\ \chi=0,1,\ \omega=0,1,\ \kappa=T_1,U,V.$$

$SU^Q(2)$:

$$Q_\pm = \pm\frac{1}{2}\sum_{\Gamma=T_2,U}\sqrt{2\lambda(\Gamma)}\,\Lambda_{\pm10a}^{(10A)}(\Gamma\Gamma) = \pm\frac{1}{2}\sum_{\Gamma=T_2,U}\sqrt{2\lambda(\Gamma)}\,W_{\pm10a}^{(10A)}(\Gamma\Gamma),$$

$$Q_0 = -\frac{1}{2}\sum_{\Gamma=T_2,U}\sqrt{\lambda(\Gamma)}\,\Lambda^{(10A)}_{00a}(\Gamma\Gamma) = -\frac{1}{2}\sum_{\Gamma=T_2,U}\sqrt{\lambda(\Gamma)}\,W^{(10A)}_{00a}(\Gamma\Gamma),$$

$Sp(14)$:

$$\Lambda^{(0\omega\kappa)}_{0\rho\zeta}(\Gamma\Gamma') = W^{(0\omega\kappa)}_{0\rho\zeta}(\Gamma\Gamma'),$$

$$\Gamma = \Gamma' = T_2,\quad \omega = 0,\ \kappa = T_2,$$
$$\omega = 1,\ \kappa = A,\ V,$$
$$\Gamma = \Gamma' = U,\quad \omega = 0,\ \kappa = T_1,\ T_2,$$
$$\omega = 1,\ \kappa = A,\ U,\ V,$$
$$\Gamma = T_2,\ \Gamma' = U,\ \omega = 0,\ 1,\ \kappa = T_1,\ U,\ V.$$

$SO(7)$:

$$\Lambda^{(00\kappa)}_{00\zeta}(\Gamma\Gamma') = W^{(00\kappa)}_{00\zeta}(\Gamma\Gamma'),$$

$$\Gamma = \Gamma' = T_2,\quad \kappa = T_2,$$
$$\Gamma = \Gamma' = U,\quad \kappa = T_1,\ T_2,$$
$$\Gamma = T_2,\ \Gamma' = U,\ \kappa = T_1,\ U,\ V.$$

$SU^S(2)$:

$$S_\pm = \pm\frac{1}{2}\sum_{\Gamma=T_2,U}\sqrt{2\lambda(\Gamma)}\,\Lambda^{(01A)}_{0\pm1a}(\Gamma\Gamma) = \pm\frac{1}{2}\sum_{\Gamma=T_2,U}\sqrt{2\lambda(\Gamma)}\,W^{(01A)}_{0\pm1a}(\Gamma\Gamma),$$

$$S_0 = -\frac{1}{2}\sum_{\Gamma=T_2,U}\sqrt{\lambda(\Gamma)}\,\Lambda^{(01A)}_{00a}(\Gamma\Gamma) = -\frac{1}{2}\sum_{\Gamma=T_2,U}\sqrt{\lambda(T)}\,W^{(01A)}_{00a}(\Gamma\Gamma).$$

$G_2$:

$$\Lambda^{(00\kappa)}_{00\zeta}(L) = \sum_{\Gamma,\Gamma'=T_2,U} V\begin{pmatrix}3 & 3 & L\\ \Gamma & \Gamma' & \kappa\end{pmatrix}\Lambda^{(00\kappa)}_{00\zeta}(\Gamma\Gamma')$$
$$= \sum_{\Gamma,\Gamma'=T_2,U} V\begin{pmatrix}3 & 3 & L\\ \Gamma & \Gamma' & \kappa\end{pmatrix}W^{(00\kappa)}_{00\zeta}(\Gamma\Gamma'),$$
$$L = 1,\ \kappa = T_1$$
$$L = 5,\ \kappa = T_1,\ T_2,\ V.$$

$SO(3)$:

$$L_\pm = \pm 2[\sqrt{6}\,\Lambda^{(00T_1)}_{00\pm1}(T_2U) - \sqrt{6}\,\Lambda^{(00T_1)}_{00\pm1}(UT_2) - \sqrt{2}\,\Lambda^{(00T_1)}_{00\pm1}(UU)]$$
$$= \pm 2[\sqrt{6}\,W^{(00T_1)}_{00\pm1}(T_2U) - \sqrt{6}\,W^{(00T_1)}_{00\pm1}(UT_2) - \sqrt{2}\,W^{(00T_1)}_{00\pm1}(UU)],$$
$$L_0 = -2[\sqrt{3}\,\Lambda^{(00T_1)}_{000}(T_2U) - \sqrt{3}\,\Lambda^{(00T_1)}_{000}(UT_2) - \Lambda^{(00T_1)}_{000}(UU)]$$
$$= -2[\sqrt{3}\,W^{(00T_1)}_{000}(T_2U) - \sqrt{3}\,W^{(00T_1)}_{000}(UT_2) - W^{(00T_1)}_{000}(UU)].$$

利用 $SO(3)$ 群的三个李算子和 I 群 $V$-系数，$W$-系数，可对出现在 $G_2$ 群李算子表达式中的 $SO(3)$ 群到 I 群的 $V$-系数作数值计算，现仅将结果列在下边.

$$V\begin{pmatrix}3 & 3 & 0\\ T_2 & T_2 & A\end{pmatrix} = \sqrt{\frac{3}{7}},\quad V\begin{pmatrix}3 & 3 & 0\\ U & U & A\end{pmatrix} = 2\sqrt{\frac{1}{7}},\quad V\begin{pmatrix}3 & 3 & 1\\ U & T_2 & T_1\end{pmatrix} = -\sqrt{\frac{3}{7}},$$

$$V\begin{pmatrix}3 & 3 & 1\\ U & U & T_1\end{pmatrix} = -\sqrt{\frac{1}{7}},\quad V\begin{pmatrix}3 & 3 & 2\\ T_2 & T_2 & V\end{pmatrix} = \sqrt{\frac{2}{7}},\quad V\begin{pmatrix}3 & 3 & 2\\ U & U & V\end{pmatrix} = \sqrt{\frac{3}{7}},$$

$$V\begin{pmatrix}3 & 3 & 2\\ T_2 & U & V\end{pmatrix} = -\sqrt{\frac{1}{7}},\quad V\begin{pmatrix}3 & 3 & 3\\ T_2 & T_2 & T_2\end{pmatrix} = \sqrt{\frac{1}{7}},\quad V\begin{pmatrix}3 & 3 & 3\\ U & U & T_2\end{pmatrix} = -\sqrt{\frac{2}{7}},$$

$$V\begin{pmatrix}3 & 3 & 3\\ U & U & U\end{pmatrix}=0, \quad V\begin{pmatrix}3 & 3 & 5\\ T_2 & T_2 & T_2\end{pmatrix}=\sqrt{\frac{2}{11}}, \quad V\begin{pmatrix}3 & 3 & 5\\ T_2 & U & V\end{pmatrix}=-\sqrt{\frac{5}{22}},$$

$$V\begin{pmatrix}3 & 3 & 5\\ T_2 & T_2 & V\end{pmatrix}=0, \quad V\begin{pmatrix}3 & 3 & 5\\ U & U & T_1\end{pmatrix}=-3\sqrt{\frac{2}{77}}, \quad V\begin{pmatrix}3 & 3 & 5\\ U & U & T_2\end{pmatrix}=\sqrt{\frac{1}{11}},$$

$$V\begin{pmatrix}3 & 3 & 5\\ U & U & V\end{pmatrix}=0, \quad V\begin{pmatrix}3 & 3 & 5\\ T_2 & U & T_1\end{pmatrix}=-\frac{1}{7}\sqrt{\frac{21}{22}}.$$

## 参　考　文　献


[1] Racah, G., *Phys. Rev.*, **76**(1949), 1352—1362.
[2] Tang Au-chin, et al., *The Summer Physics Colloquim of the Peking Symposium*, 1966.
[3] ——————, et al., *Sci. Sinica.*, **15**(1966), 610—644.
[4] ——————, et al., *Theoretical Method of the Ligand Field Theory*, Science Press, Peking, 1979.
[5] ——————, et al., *Int. J. Quantum Chem.*, **18**(1980), 545—555.
[6] ——————, et al., *Int. J. Quantum Chem. Symp.*, **14**(1980), 521—540.
[7] Wyboure, B. G., *Int. J. Quantum Chem.*, **7**(1973), 1117—1137.
[8] Kibler, M. R. & Guichon, P. A. M., *ibid.*, **10**(1976), 87—111.
[9] Tanabe, Y. & Sugano, S., *J. Phys. Soc. Japan.*, 9(1954), 753—766.
[10] Tanabe, Y. & Kamimura, H., *ibid.*, **13**(1958), 394—411.
[11] Griffith, J. S., *The Irreducible Tensor Method for Molecular Symmetry Groups*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1962.
[12] ——————, *The Theory of Transition-Metal for Molecular Symmetry Groups*, Prentice-Hall Inc., 1962.
[13] Wybourne, B. G., *Classical Groups for Physicists*, Wiley, New York, 1974.
[14] Judd, B. R., *Group Theory in Atomic Spectroscopy* (Ed. Lobel, E. M.), Academic, New York, 1962.
[15] ——————, *Operator Techniques in Atomic Spectroscopy*, McGraw-Hall, New York, 1770.