

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Имени М.В.Ломоносова

ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Кафедра физической химии

Утверждено

учебно-методической комиссией

кафедры физической химии

Б.И.Долженко

МЕТОД НЕПРИБЛИЖИМЫХ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ОПЕРАТОРОВ В МОЛЕКУЛЯРНОЙ  
СПЕКТРОСКОПИИ

Часть 2. Справочные таблицы и формулы.

/Методическая разработка к занятию/

Под общей редакцией  
доцента Н.Ф.Стенанова

Москва - 1981

О Г Л А В Л Е Н И Е

Введение . . . . .	4
§1. Приведенный по симметрии базис для неполярных групп SO(3) > 0 . . . . .	5
§2. ЗСГ-символы для точечных групп O и Td . . . . .	10
§3. 6T-символы для точечных групп O и Td . . . . .	11
§4. Изоскалярные множители для неполярных групп SO(3) > 0 . . . . .	13
§5. Вращательные операторы . . . . .	17
§6. Приведение вращательных операторов к стандартному виду . . . . .	20
§7. Колебательные операторы типа F2 . . . . .	28
§8. Колебательные операторы типа E . . . . .	31
§9. Прямая работа с графиками для точечных групп . . . . .	37
§10. N-форма колебательных операторов . . . . .	40
§11. Вращательные операторы в разноточных системах координат . . . . .	46
§12. Колебательно-вращательный гамма-фактор . . . . .	60
§13. Формулы теории возмущений . . . . .	62
Литература . . . . .	66

Данная методическая разработка предназначена для слушателей курса "Метод негормональных тензорных операторов в молекулярной спектроскопии". Она содержит справку вспомогательных формул и таблиц коэффициентов, необходимых при решении молекулярных колебательно-вращательных задач, в основном, для молекул типа атомно-молекулы.

## ВВЕДЕНИЕ.

Главная методическая разработка предназначена для слушателей спецкурса "Метод неприводимых тензорных операторов в молекулярной спектроскопии", желающих применить тензорные методы при решении конкретных задач. Основная техническая трудность здесь состоит в том, что в литературе отсутствует единое систематическое изложение материала, и формулы, используемые разными авторами, часто отличаются отсюда разным выбором базисов, разными соглашениями о фазах и т.д. Длиннее здесь формулы внутренне согласованы. Часть формул продиктована впервые.

Краткое изложение основ теории дано в части I. Там же даны и ссылки на наиболее важные для дальнейшего изучения учебные пособия и оригинальные работы. Для решения большинства задач и упражнений, предлагаемых в части I, также достаточно справочных сведений, приведенных и настоящих разработок.

Следует подчеркнуть, что поскольку метод неприводимых тензорных операторов является в существенной степени техническим аппаратом, то для его освоения необходимо решить значительное число задач и примеров, зачастую весьма громоздких. В то же время от читателя предполагается знакомство с теоретическими основами квантовой химии и молекулярной спектроскопии, например, в рамках спецкурса "Квантово-механическая теория электронно-колебательно-вращательных состояний молекул", и, кроме того, с элементами теории групп, излагаемыми в общих курсах математики и квантовой механики молекулы.

## §1. ПРИВЛЕЧЕННЫЙ ПО СИММЕТРИИ БАЗИС ДЛЯ ЦЕПочки ГРУПП

$$SO(3) \supset O_3$$

Привлеченный здесь базис совпадает с базисом, используемым в теории колебательно-вращательных спектров молекул типа сферического ротатора  $[2-4]$ , и будет называться базисом Мора-Бейли. Другой выбор базиса может быть связан

с другим выбором матриц представления для точечной подгруппы (см. §1 части I [1]);

с другим выбором базисных множителей;

с тем обстоятельством, что базис Мора-Бейли является суперпривлеченным по симметрии, т.е. базисом диагонализированного оператора  $T_A$  (см. часть I).

В нижеследующей таблице даны алгебраические выражения для коэффициентов разложения привлеченного по симметрии базиса  $|J, M\rangle$  по стандартному сферическому базису  $|J, M\rangle$  для  $J = I + \frac{1}{2}$ . Численные значения коэффициентов для более высоких значений  $J$  даны в работах [3,4]. В [4] подробно описаны свойства симметрии коэффициентов разложения.

$$|1, \tau_1 x\rangle = 1/\sqrt{2}(|1, -1\rangle - |1, 1\rangle)$$

$$|1, \tau_1 y\rangle = -1/\sqrt{2}(|1, -1\rangle + |1, 1\rangle)$$

$$|1, \tau_1 z\rangle = |1, 0\rangle$$

$$|2, \tau_1 1\rangle = |2, 0\rangle$$

$$|2, \tau_1 2\rangle = 1/\sqrt{2}(|2, -2\rangle + |2, 2\rangle)$$

$$|2, \tau_2 x\rangle = -1/\sqrt{2}(|2, -1\rangle + |2, 1\rangle)$$

$$|2, \tau_2 y\rangle = 1/\sqrt{2}(|2, -1\rangle - |2, 1\rangle)$$

$$|2, \tau_2 z\rangle = -1/\sqrt{2}(|2, -2\rangle - |2, 2\rangle)$$

$$|3, \tau_2 1\rangle = -1/\sqrt{2}(|3, -2\rangle - |3, 2\rangle)$$

$$|3, \tau_2 x\rangle = \sqrt{7/4}(|3, -3\rangle - |3, 3\rangle) - \sqrt{3/4}(|3, -1\rangle - |3, 1\rangle)$$

$$|3, \tau_2 y\rangle = 1/\sqrt{4}(|3, -3\rangle + |3, 3\rangle) + 1/\sqrt{4}(|3, -1\rangle + |3, 1\rangle)$$

$$|3, \tau_2 z\rangle = |3, 0\rangle$$

$$|3, P_2x\rangle = -\sqrt{5}/4(|3, -3\rangle - |3, 3\rangle) - \sqrt{5}/4(|3, -1\rangle - |3, 1\rangle)$$

$$|3, P_2y\rangle = \sqrt{5}/4(|3, -3\rangle + |3, 3\rangle) - \sqrt{5}/4(|3, -1\rangle + |3, 1\rangle)$$

$$|3, P_2z\rangle = 1/\sqrt{2}(|3, -2\rangle + |3, 2\rangle)$$

$$|4, A_1\rangle = \sqrt{5}/2\sqrt{6}(|4, -4\rangle + |4, 4\rangle) + \sqrt{7}/2\sqrt{3}|4, 0\rangle$$

$$|4, B_1\rangle = \sqrt{7}/2\sqrt{6}(|4, -4\rangle + |4, 4\rangle) - \sqrt{5}/2\sqrt{3}|4, 0\rangle$$

$$|4, B_2\rangle = 1/\sqrt{2}(|4, -2\rangle + |4, 2\rangle)$$

$$|4, P_1x\rangle = 1/4(|4, -3\rangle + |4, 3\rangle) + \sqrt{7}/4(|4, -1\rangle + |4, 1\rangle)$$

$$|4, P_1y\rangle = -1/4(|4, -3\rangle - |4, 3\rangle) + \sqrt{7}/4(|4, -1\rangle - |4, 1\rangle)$$

$$|4, P_1z\rangle = -1/\sqrt{2}(|4, -2\rangle - |4, 2\rangle)$$

$$|4, P_2x\rangle = -1/\sqrt{7}(|4, -3\rangle + |4, 3\rangle) + 1/4(|4, -1\rangle + |4, 1\rangle)$$

$$|4, P_2y\rangle = -1/\sqrt{7}(|4, -3\rangle - |4, 3\rangle) - 1/4(|4, -1\rangle - |4, 1\rangle)$$

$$|4, P_2z\rangle = -1/\sqrt{2}(|4, -2\rangle - |4, 2\rangle)$$

$$|5, B_1\rangle = -1/\sqrt{2}(|5, -1\rangle - |5, 1\rangle)$$

$$|5, B_2\rangle = 1/\sqrt{2}(|5, -2\rangle - |5, 2\rangle)$$

$$|5, OP_1x\rangle = \frac{(10\sqrt{2} + 2\sqrt{3}\sqrt{2})^{1/2}}{16\sqrt{3}}(|5, -5\rangle - |5, 5\rangle)$$

$$= \frac{(17\sqrt{2} - 3\sqrt{3}\sqrt{2})^{1/2}}{16\sqrt{3}}(|5, -1\rangle - |5, 1\rangle)$$

$$+ \frac{(9 + \sqrt{2})^{1/2}}{8}(|5, -1\rangle - |5, 1\rangle)$$

$$|5, OP_1y\rangle = -\frac{(10\sqrt{2} + 2\sqrt{3}\sqrt{2})^{1/2}}{16\sqrt{3}}(|5, -5\rangle + |5, 5\rangle)$$

$$= -\frac{(17\sqrt{2} - 3\sqrt{3}\sqrt{2})^{1/2}}{16\sqrt{3}}(|5, -1\rangle + |5, 1\rangle)$$

$$- \frac{(9 + \sqrt{2})^{1/2}}{8}(|5, -1\rangle + |5, 1\rangle)$$

$$- \frac{(9 + \sqrt{2})^{1/2}}{8}(|5, -1\rangle + |5, 1\rangle)$$

$$- \frac{(9 + \sqrt{2})^{1/2}}{8}(|5, -1\rangle + |5, 1\rangle)$$

$$- \frac{(9 + \sqrt{2})^{1/2}}{8}(|5, -1\rangle + |5, 1\rangle)$$

$$|5, OP_1x\rangle = \frac{(6 + \sqrt{2})^{1/2}}{2\sqrt{6}}(|5, -4\rangle + |5, 4\rangle) + \frac{(6 + \sqrt{2})^{1/2}}{2\sqrt{3}}(|5, 0\rangle)$$

$$|5, OP_1y\rangle = -\frac{(10\sqrt{2} - 2\sqrt{3}\sqrt{2})^{1/2}}{16\sqrt{3}}(|5, -5\rangle - |5, 5\rangle)$$

$$+ \frac{(17\sqrt{2} + 3\sqrt{3}\sqrt{2})^{1/2}}{16\sqrt{3}}(|5, -3\rangle - |5, 3\rangle)$$

$$+ \frac{(10\sqrt{2} - 2\sqrt{3}\sqrt{2})^{1/2}}{16\sqrt{3}}(|5, -1\rangle - |5, 1\rangle)$$

$$|5, OP_1z\rangle = 1/\sqrt{2} \frac{(10\sqrt{2} - 2\sqrt{3}\sqrt{2})^{1/2}}{16\sqrt{3}}(|5, -5\rangle + |5, 5\rangle)$$

$$+ 1/\sqrt{2} \frac{(17\sqrt{2} + 3\sqrt{3}\sqrt{2})^{1/2}}{16\sqrt{3}}(|5, -3\rangle + |5, 3\rangle)$$

$$- 1/\sqrt{2} \frac{(10\sqrt{2} - 2\sqrt{3}\sqrt{2})^{1/2}}{16\sqrt{3}}(|5, -1\rangle + |5, 1\rangle)$$

$$|5, OP_2x\rangle = \frac{(6 + \sqrt{2})^{1/2}}{2\sqrt{6}}(|5, -4\rangle + |5, 4\rangle) - \frac{(6 + \sqrt{2})^{1/2}}{2\sqrt{3}}(|5, 0\rangle)$$

$$|5, OP_2y\rangle = -\sqrt{5}/8(|5, -5\rangle - |5, 5\rangle) - \sqrt{3}/8(|5, -3\rangle - |5, 3\rangle)$$

$$+ \sqrt{7}/8(|5, -1\rangle - |5, 1\rangle)$$

$$|5, OP_2z\rangle = -1/\sqrt{3}/8(|5, -5\rangle + |5, 5\rangle) + 1/\sqrt{3}/8(|5, -3\rangle + |5, 3\rangle)$$

$$+ 1/\sqrt{3}/8(|5, -1\rangle + |5, 1\rangle)$$

$$|5, P_2x\rangle = 1/\sqrt{2}(|5, -2\rangle + |5, 2\rangle)$$

$$|6, A_1\rangle = \sqrt{7}/4(|6, -6\rangle + |6, 6\rangle) - 1/2\sqrt{2}|6, 0\rangle$$

$$|6, A_2\rangle = \sqrt{5}/4\sqrt{2}(|6, -6\rangle + |6, 6\rangle) - \sqrt{7}/4\sqrt{2}(|6, -4\rangle + |6, 4\rangle)$$

$$|6, B_1\rangle = 1/\sqrt{6}(|6, -6\rangle + |6, 6\rangle) + \sqrt{7}/4|6, 0\rangle$$

$$|6, P_2\rangle = \sqrt{7}/4\sqrt{2}(|6, -6\rangle + |6, 6\rangle) + \sqrt{5}/4\sqrt{2}(|6, -2\rangle + |6, 2\rangle)$$

$$|6, P_1x\rangle = 1/\sqrt{3}/8(|6, -5\rangle + |6, 5\rangle) + 1/\sqrt{3}/8(|6, -3\rangle + |6, 3\rangle)$$

$$- 1/\sqrt{3}/8(|6, -1\rangle + |6, 1\rangle)$$

$$- 1/\sqrt{3}/8(|6, -1\rangle + |6, 1\rangle)$$

$$- 1/\sqrt{3}/8(|6, -1\rangle + |6, 1\rangle)$$

$$- 1/\sqrt{3}/8(|6, -1\rangle + |6, 1\rangle)$$

$$- 1/\sqrt{3}/8(|6, -1\rangle + |6, 1\rangle)$$

$$- 1/\sqrt{3}/8(|6, -1\rangle + |6, 1\rangle)$$

$$|6, \mu_1 x\rangle = -\frac{1}{\sqrt{18}}(|6, -5\rangle - |6, 5\rangle) + \frac{1}{\sqrt{5}}(|6, -3\rangle - |6, 3\rangle) + \frac{1}{\sqrt{8}}(|6, -1\rangle - |6, 1\rangle)$$

$$|6, \mu_2 x\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}(|6, -4\rangle - |6, 4\rangle)$$

$$|6, 0 \mu_2 x\rangle = \frac{1}{16\sqrt{421}} (2947 + 123\sqrt{421})^{1/2} (|6, -5\rangle + |6, 5\rangle)$$

$$- \frac{1}{16\sqrt{421}} (14314 + 314\sqrt{421})^{1/2} (|6, -1\rangle + |6, 3\rangle)$$

$$+ \frac{1}{8\sqrt{421}} (5473 - 263\sqrt{421})^{1/2} (|6, -1\rangle + |6, 1\rangle)$$

$$|6, 0 \mu_2 y\rangle = - \frac{\sqrt{5}}{16\sqrt{421}} (2947 + 123\sqrt{421})^{1/2} (|6, -5\rangle - |6, 5\rangle)$$

$$- \frac{1}{16\sqrt{421}} (14314 + 314\sqrt{421})^{1/2} (|6, -3\rangle - |6, 3\rangle)$$

$$- \frac{1}{8\sqrt{421}} (5473 + 263\sqrt{421})^{1/2} (|6, -1\rangle - |6, 1\rangle)$$

$$|6, 0 \mu_2 z\rangle = -\frac{1}{4\sqrt{421}} \frac{(1684 - 79\sqrt{421})^{1/2}}{4\sqrt{421}} (|6, -6\rangle - |6, 6\rangle)$$

$$+ \frac{1}{4\sqrt{421}} \frac{(1684 + 79\sqrt{421})^{1/2}}{4\sqrt{421}} (|6, -2\rangle - |6, 2\rangle)$$

$$|6, 1 \mu_2 x\rangle = -\frac{1}{16\sqrt{421}} (2947 - 123\sqrt{421})^{1/2} (|6, -5\rangle + |6, 5\rangle)$$

$$- \frac{1}{16\sqrt{421}} (14314 - 314\sqrt{421})^{1/2} (|6, -3\rangle + |6, 3\rangle)$$

$$- \frac{1}{8\sqrt{421}} (9473 + 263\sqrt{421})^{1/2} (|6, -1\rangle + |6, 1\rangle)$$

$$|6, 1 \mu_2 y\rangle = \frac{\sqrt{5}}{16\sqrt{421}} (2947 - 123\sqrt{421})^{1/2} (|6, -5\rangle - |6, 5\rangle)$$

$$- \frac{1}{16\sqrt{421}} (14314 - 314\sqrt{421})^{1/2} (|6, -3\rangle - |6, 3\rangle)$$

- 8 -

$$+ \frac{1}{8\sqrt{421}} (5473 + 263\sqrt{421})^{1/2} (|6, -1\rangle + |6, 1\rangle)$$

$$|6, 1 \mu_2 z\rangle = \frac{1}{4\sqrt{421}} \frac{(1684 + 79\sqrt{421})^{1/2}}{4\sqrt{421}} (|6, -6\rangle - |6, 6\rangle)$$

$$- \frac{1}{4\sqrt{421}} \frac{(1684 - 79\sqrt{421})^{1/2}}{4\sqrt{421}} (|6, -2\rangle - |6, 2\rangle)$$

- 9 -

### §2. ЭГ-СИМВОЛЫ ДЛЯ ТОЧЕЧНЫХ ГРУПП 0 и T4 [4].

Таблица ЭГ-символов соответствует указанному в §1 части I выбору метриц неприводимых представлений. Данная таблица отличается от таблицы ЭГ-символов, используемой в книге [5].

	Г1	Г2	Г3	Г1	Г2	Г3	$\begin{pmatrix} \Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3 \\ \epsilon_1 & \epsilon_2 & \epsilon_3 \end{pmatrix}$
A1	Г	Г		0	α	β	$\sqrt{\Gamma_1} S_{αβ}$
A2	Е	Е		0	1	2	$\frac{1}{\sqrt{2}}$
A2	Г1	Г2		0	α	β	$\frac{1}{\sqrt{3}} S_{αβ}$
Е	Е	Е		1	1	2	$-\frac{1}{2}$
				1	2	2	$\frac{1}{2}$
Е	Г1	Г2		1	1	2	$-\frac{1}{2}$
				1	2	2	$\frac{1}{2}$
Е	Г1	Г2		1	1	2	$\frac{1}{\sqrt{5}}$
				1	2	2	$\frac{1}{\sqrt{5}}$
Е	Г1	Г2		1	1	2	$\frac{1}{\sqrt{3}}$
				1	2	2	$\frac{1}{\sqrt{3}}$
Е	Г1	Г2		1	1	2	$-\frac{1}{\sqrt{5}}$
				1	2	2	$-\frac{1}{\sqrt{5}}$
Е	Г1	Г2		1	1	2	$-\frac{1}{\sqrt{5}}$
				1	2	2	$-\frac{1}{\sqrt{5}}$
Е	Г1	Г2		1	1	2	$-\frac{1}{\sqrt{5}}$
				1	2	2	$-\frac{1}{\sqrt{5}}$
Е	Г1	Г2		1	1	2	$-\frac{1}{\sqrt{5}}$
				1	2	2	$-\frac{1}{\sqrt{5}}$
Е	Г1	Г2		1	1	2	$-\frac{1}{\sqrt{5}}$
				1	2	2	$-\frac{1}{\sqrt{5}}$

- 10 -

### §3. ЕГ-СИМВОЛЫ ДЛЯ ТОЧЕЧНЫХ ГРУПП 0 и T4.

EG-символы не записаны от выбора базиса, поэтому можно пользоваться таблицами EG- и EΓ-символов для кубических групп, приведенными в книге [5]. Таблица EG-символов дана здесь с целью более наглядной иллюстрации свойств симметрий второго рода. Порядок расположения символов следующий. Первоначально даны символы, не содержащие ни A ни B представлений. Далее символы, содержащие E, но не содержащие A представления. Они приведены в порядке уменьшения числа Γ-представлений. Затем символы, содержащие A2 представления, но не содержащие A1, и наконец, символы, содержащие A1 представления.

$$\begin{aligned} \begin{Bmatrix} E & E & E \\ \Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3 \end{Bmatrix} &= 1 && \text{независимо от того } \Gamma_1 \text{ или } \Gamma_2 \\ \begin{Bmatrix} E & E & E \\ E & E & E \end{Bmatrix} &= 0 \\ \begin{Bmatrix} E & E & E \\ \Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3 \end{Bmatrix} &= \begin{Bmatrix} E & E & E \\ \Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3 \end{Bmatrix} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \\ \begin{Bmatrix} E & E & E \\ \Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3 \end{Bmatrix} &= \begin{Bmatrix} E & E & E \\ \Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3 \end{Bmatrix} = -\frac{1}{2\sqrt{3}} \\ \begin{Bmatrix} E & E & E \\ \Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3 \end{Bmatrix} &= \begin{Bmatrix} E & E & E \\ \Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3 \end{Bmatrix} = 0 \\ \begin{Bmatrix} E & E & E \\ \Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3 \end{Bmatrix} &= \begin{Bmatrix} E & E & E \\ \Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} E & E & E \\ \Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3 \end{Bmatrix} = 1 \\ \begin{Bmatrix} E & E & E \\ \Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3 \end{Bmatrix} &= \begin{Bmatrix} E & E & E \\ \Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3 \end{Bmatrix} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \\ \begin{Bmatrix} E & E & E \\ \Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3 \end{Bmatrix} &= \begin{Bmatrix} E & E & E \\ \Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3 \end{Bmatrix} = -\frac{1}{2\sqrt{3}} \end{aligned}$$

- 11 -

$$\begin{aligned} \begin{Bmatrix} B & P_1 & P_1 \\ P_1 & P_1 & P_1 \end{Bmatrix} &= \begin{Bmatrix} B & P_2 & P_2 \\ P_1 & P_2 & P_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} B & P_2 & P_2 \\ P_2 & P_1 & P_1 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} B & P_1 & P_2 \\ P_2 & P_2 & P_1 \end{Bmatrix} = \\ &= \begin{Bmatrix} B & P_1 & P_2 \\ P_2 & P_2 & P_1 \end{Bmatrix} = 1 \\ \begin{Bmatrix} B & P_2 & P_2 \\ P_2 & P_2 & P_2 \end{Bmatrix} &= \begin{Bmatrix} B & P_1 & P_1 \\ P_2 & P_2 & P_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} B & P_2 & P_1 \\ P_1 & P_2 & P_1 \end{Bmatrix} = \\ &= \begin{Bmatrix} B & P_1 & P_2 \\ P_1 & P_2 & P_1 \end{Bmatrix} = -1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \begin{Bmatrix} A_2 & B & B \\ B & B & B \end{Bmatrix} &= 1 \\ \begin{Bmatrix} A_2 & B & B \\ B & B & B \end{Bmatrix} &= 2 \end{aligned}$$

$$\begin{Bmatrix} A_2 & B & B \\ P_1 & P_1 & P_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} A_2 & B & B \\ P_2 & P_1 & P_2 \end{Bmatrix} = -\frac{1}{\sqrt{6}}$$

$$\begin{Bmatrix} A_2 & P_1 & P_2 \\ B & P_1 & P_2 \end{Bmatrix} = 1$$

$$\begin{Bmatrix} A_2 & P_1 & P_2 \\ B & P_2 & P_1 \end{Bmatrix} = -\frac{1}{3}$$

$$\begin{Bmatrix} A_1 & P_2 & P_2 \\ P_3 & P_4 & P_4 \end{Bmatrix} = \frac{(-1)^{P_2+P_3+P_4}}{\sqrt{[P_3][P_4]}}$$

94. ИЗОСКАЛЬНЫЕ МНОЖИТЕЛИ ДЛЯ ЦЕПОЧКИ ГРУПП  $SO(3) \supset O$ .

Ниже приведены точные алгебраические и численные выражения для ряда простейших изоскалярных множителей для цепочки групп  $SO(3) \supset O$  в базе Нора-Файн (см. [1]). Численные значения коэффициентов  $K_{P_1, P_2, P_3}$  для  $J \leq 4$  даны в работе [6]. В литературе имеются также ряд таблиц  $F$  коэффициентов, рассчитанных в том же базисе. Наиболее полная таблица  $F_{A, R, R}^{J, J, J}$  коэффициентов (до  $J = 100$ ) дана в работе [7]. Коэффициенты  $F_{A, R, R}^{J, J, J}$  и  $F_{A, R, R}^{J, J, J}$  твудлированы в [3]. Заметим, что в [3] знаки всех  $F_{A, R, R}^{J, J, J}$  символов должны быть изменены.  $F_{A, R, R}^{J, J, J}$  и  $F_{A, R, R}^{J, J, J}$  твудлированы в [8].  $F_{A, R, R}^{J, J, J}$  в [9], однако в этой работе есть описка в знаках.  $F_{A, R, R}^{J, J, J}$  твудлированы в работе [10]. Метод получения приближенных алгебраических формул для коэффициентов векторного сложения предложен в работе [11]. Существует также ряд таблиц коэффициентов векторного сложения для той же цепочки групп, но они повсюду имеют разные названия / в частности, не сверифицированы по симметрии/. Обзор литературы можно найти в работах [12, 13].

ТАБЛИЦА КОЭФФИЦИЕНТОВ  $K_{P_1, P_2, P_3}^{J_1, J_2, J_3}$

$J_1$	$J_2$	$J_3$	$P_1$	$P_2$	$P_3$		
1	1	1	$F_1$	$F_1$	$F_1$	1.00000	1
1	1	2	$F_1$	$F_1$	$F_2$	-0.63246	$-\sqrt{2}/5$
1	1	2	$F_1$	$F_1$	$F_2$	-0.77460	$-\sqrt{3}/5$
1	2	2	$F_1$	$F_2$	$F_2$	-0.63246	$-\sqrt{2}/5$
1	2	2	$F_1$	$F_2$	$F_2$	0.44721	$1/\sqrt{5}$

1	2	3	F1	F1	0.50709	$3/\sqrt{35}$
1	2	3	F1	F2	0.37796	$1/\sqrt{7}$
1	2	3	F1	F2	-0.37796	$-1/\sqrt{7}$
1	2	3	F1	F2	-0.41404	$-\sqrt{6}/\sqrt{35}$
1	2	3	F1	F2	0.53452	$\sqrt{2}/\sqrt{7}$
1	3	3	F1	F2	0.37796	$1/\sqrt{7}$
1	3	3	F1	F2	-0.40089	$-13/2\sqrt{14}$
1	3	3	F1	F2	-0.51755	$-1/\sqrt{5/2/\sqrt{14}}$
1	3	3	F1	F2	-0.37796	$-1/\sqrt{7}$
1	3	3	F1	F2	0.13363	$1/2\sqrt{14}$
1	3	4	F1	F2	0.37796	$1/\sqrt{7}$
1	3	4	F1	F2	0.33333	$1/3$
1	3	4	F1	F2	0.28172	$\sqrt{5}/3\sqrt{7}$
1	3	4	F1	F2	0.45644	$\sqrt{5}/2\sqrt{6}$
1	3	4	F1	F2	0.17252	$\sqrt{5}/2\sqrt{2}$
1	3	4	F1	F2	0.37796	$1/\sqrt{7}$
1	3	4	F1	F2	0.35355	$1/2\sqrt{2}$
1	3	4	F1	F2	-0.40089	$-3/2\sqrt{14}$
1	4	4	F1	F2	0.33333	$1/3$
1	4	4	F1	F2	-0.39441	$-1/\sqrt{3/5}$
1	4	4	F1	F2	-0.25820	$-1/\sqrt{15}$
1	4	4	F1	F2	-0.33333	$-1/3$
1	4	4	F1	F2	0.39441	$1/\sqrt{3/5}$
1	4	4	F1	F2	-0.09129	$-1/2\sqrt{30}$
1	4	4	F1	F2	0.24152	$1/\sqrt{2/\sqrt{30}}$
1	4	4	F1	F2	-0.25820	$-1/\sqrt{15}$
1	4	4	F1	F2	-0.15644	$-1/5/2\sqrt{6}$
2	2	2	F1	F2	0.47609	$2\sqrt{3}/\sqrt{35}$
2	2	2	F1	F2	-0.41404	$-6/\sqrt{15}$
2	2	2	F1	F2	0.50709	$3/\sqrt{35}$
2	2	3	F1	F2	-0.37796	$-1/\sqrt{7}$
2	2	3	F1	F2	-0.20702	$-1/\sqrt{3/\sqrt{70}}$
2	2	3	F1	F2	-0.46291	$-1/\sqrt{3/\sqrt{14}}$

- 14 -

2	2	3	F1	F2	-0.58554	$-12/\sqrt{35}$
2	2	4	F1	F2	0.25820	$1/\sqrt{15}$
2	2	4	F1	F2	0.30861	$\sqrt{2}/21$
2	2	4	F1	F2	-0.40825	$-1/\sqrt{5}$
2	2	4	F1	F2	-0.26726	$-1/\sqrt{7}$
2	2	4	F1	F2	-0.21082	$-\sqrt{2}/3\sqrt{5}$
2	2	4	F1	F2	0.35635	$2/2/\sqrt{7}$
2	2	4	F1	F2	-0.43644	$-2/\sqrt{21}$
2	3	3	F1	F2	-0.33806	$-2/\sqrt{35}$
2	3	3	F1	F2	-0.37796	$-1/\sqrt{7}$
2	3	3	F1	F2	-0.37796	$-1/\sqrt{7}$
2	3	3	F1	F2	0.10351	$13/2\sqrt{70}$
2	3	3	F1	F2	0.13363	$1/2\sqrt{14}$
2	3	3	F1	F2	0.54755	$\sqrt{5}/2\sqrt{14}$
2	4	4	F1	F2	0.28427	$2/2/3\sqrt{11}$
2	4	4	F1	F2	-0.13291	$-8/3\sqrt{305}$
2	4	4	F1	F2	-0.41194	$-2/\sqrt{11/35}$
2	4	4	F1	F2	0.13484	$1/\sqrt{55}$
2	4	4	F1	F2	0.11770	$4/\sqrt{155}$
2	4	4	F1	F2	0.17408	$1/\sqrt{35}$
2	4	4	F1	F2	0.13484	$1/\sqrt{35}$
2	4	4	F1	F2	0.32367	$1/7/\sqrt{105}$
2	4	4	F1	F2	-0.12613	$-1/7/2\sqrt{170}$
2	4	4	F1	F2	0.33371	$7/2\sqrt{110}$
2	4	4	F1	F2	0.23424	$13/2\sqrt{770}$
3	3	4	F1	F2	0.24618	$\sqrt{2}/\sqrt{33}$
3	3	4	F1	F2	0.08058	$1/11\sqrt{94}$
3	3	4	F1	F2	-0.27524	$-1/5/\sqrt{106}$
3	3	4	F1	F2	-0.21320	$-1/\sqrt{122}$
3	3	4	F1	F2	-0.18019	$-1/5/\sqrt{154}$
3	3	4	F1	F2	0.44137	$1/5/\sqrt{97}$
3	3	4	F1	F2	0.08058	$1/\sqrt{94}$
3	3	4	F1	F2	-0.30151	$-1/\sqrt{11}$

- 15 -



§5. ВРАЩАТЕЛЬНЫЕ ОПЕРАТОРЫ.

Произвольный вращательный тензорный оператор  $R_{\Omega}(K, n^{\Gamma})$ , приведенный по симметрии относительно точечной подгруппы  $\zeta$ , характеризуется степенью  $\Omega$  относительно элементарных вращательных операторов, рангом  $K$  относительно группы вращений, типом неприводимого представления  $\Gamma$  относительно точечной группы и индексом внутренней мультиплицируемости  $n$ . Независимо от выбора приведенного по симметрии базиса, вращательные операторы для группы вращений будут считаться стандартными, если они образованы с помощью следующего способа

$$R_{\Omega}(K) = \left[ \underbrace{(A \cdot A)^0}_{l-k}, \dots, \underbrace{(A \cdot A)^0}_{k}, \underbrace{A \cdot \dots \cdot A}_k \right] (K)$$

где  $A \in R^{(1)}$  — элементарные вращательные операторы, которые в пределах соглашения с обозначениями Морэ-Бейли выбраны следующим образом [2]

$$R_{\alpha}^{(1)} = 2 J_{\alpha}$$

Нижее будут приведены явные выражения для стандартных вращательных тензорных операторов, приведенных по симметрии относительно кубической группы симметрии  $O$  или  $T_d$ . Напомним, что для операторов  $R_{\Omega}^{(l, n^{\Gamma})}$  определеной степени  $\Omega$ , ранг  $K$  может принимать значения  $\Omega, \Omega-2, \dots, 1$  для  $O$ . Типы неприводимых представлений при данном  $K$  определяются таблицей редукции неприводимых представлений группы вращений на точечную подгруппу (см. §8 части I).

Элементарные операторы.

$$R^{(1, l, \Gamma)} = 2 J_{\alpha} \quad (\alpha = x, y, z)$$

Квадратичные операторы.

$$R^{(2, 0, A_1)} = -(4/\sqrt{3})(J_x^2 + J_y^2 + J_z^2)$$

$$R^{(2, 2, E)} = 2\sqrt{2}/\sqrt{3}(2J_x^2 - J_y^2 - J_z^2)$$

-0.22792	-2/177	3	4	$R_2$	$R_2$
0.07107	1/3/22	3	4	$R_2$	$R_2$
0.42044	$\sqrt{5}/3/22$	3	4	$R_2$	$R_2$
0.44712	$\sqrt{5}/\sqrt{31}$	3	4	$R_2$	$R_2$
0.15932	7/2/3/429	4	4	$A_1$	$A_1$
0.03219	2/3/1/29	4	4	$A_1$	$A_1$
0.13797	7/3/2/26	4	4	$A_1$	$A_1$
-0.25624	-17/3/22	4	4	$A_1$	$A_1$
0.30777	16/10/3/3003	4	4	$E$	$E$
0.14661	$\sqrt{35}/3/286$	4	4	$E$	$E$
0.22901	$\sqrt{15}/\sqrt{286}$	4	4	$E$	$E$
0.08329	5/5/3/2002	4	4	$E$	$E$
0.28563	$\sqrt{35}/\sqrt{429}$	4	4	$E$	$E$
0.04080	$\sqrt{5}/\sqrt{3003}$	4	4	$E$	$E$
-0.20114	-9/12/202	3	6	$R_2$	$R_2$
0.14175	5/1/2002	3	6	$R_2$	$R_2$
0.15484	2/6/1/1001	3	6	$R_2$	$R_2$
0.17629	2/10/3/143	3	6	$A_1$	$A_1$
-0.19945	-16/3/175	4	6	$E$	$E$
-0.07527	-1/1/4290	4	6	$R_1$	$R_1$
0.07634	$\sqrt{5}/\sqrt{858}$	4	6	$R_2$	$R_2$
0.12281	$\sqrt{70}/\sqrt{663}$	4	8	$A_1$	$A_1$
0.12158	7/1/3/315	4	8	$E$	$E$
-0.17017	-8/1/2210	4	8	$R_1$	$R_1$
0	0	4	8	$R_2$	$R_2$

$$R^2(2, B) = 2\sqrt{2} (j_x^2 - j_y^2)$$

$$R^2(2, A) = 2\sqrt{2} (j_x j_y + j_y j_x).$$

Здесь и далее индекс  $\alpha, \beta, \gamma$  соответствует циклической перестановке индексов  $x, y, z$ .

Операторы третьей степени.

$$R^3(1, A) = - (8/3) j_x^3$$

$$R^3(3, A) = 4\sqrt{2}/\sqrt{3} (j_x j_y j_z + \text{все возможные перестановки})$$

$$R^3(3, B) = 4\sqrt{2}/\sqrt{3} (2j_x^2 - 3j_y^2 - 3j_z^2 + 1) j_x$$

$$R^3(3, B) = 2\sqrt{6} [j_x (j_y^2 - j_z^2) + (j_y^2 - j_z^2) j_x]$$

Операторы четвертой степени.

$$R^4(0, A) = (16/3) j_x^4$$

$$R^4(2, B) = (8\sqrt{2}/3) j_x^2 (j_x^2 - 3j_y^2)$$

$$R^4(2, B) = (8\sqrt{2}/3) j_x^2 (j_y^2 - j_z^2)$$

$$R^4(2, A) = - (8\sqrt{2}/3) j_x^2 (j_x j_y + j_y j_x)$$

$$R^4(4, A) = (8\sqrt{2}/15) (5j_x^4 + 5j_y^4 + 5j_z^4 - 3j_x^3 + j^2)$$

$$R^4(4, B) = (8\sqrt{2}/15) [j_x^4 + j_y^4 + j_z^4 - 2j_x^3 - 6(j_x^2 j_y^2 + j_y^2 j_x^2)$$

$$+ 3(j_x^2 j_x^2 + j_x^2 j_y^2 + j_y^2 j_x^2 + j_x^2 j_y^2) + 5j_x^2 +$$

$$+ 5j_y^2 - 10j_z^2]$$

$$R^4(4, B) = (8\sqrt{2}/17) [j_y^4 - j_x^4 + 3(j_x^2 j_y^2 + j_y^2 j_x^2)$$

$$- 3(j_y^2 j_x^2 + j_x^2 j_y^2) + 5j_y^2 - 5j_x^2]$$

$$R^4(4, A) = 4\sqrt{2} [2(j_x^3 j_y + j_y j_x^3) - 2(j_y^3 j_x + j_x j_y^3) - 4j_z^4]$$

$$R^4(4, B) = 8\sqrt{2}/17 [3j_x^2 (j_y j_x + j_x j_y) + 3(j_x j_y + j_y j_x) j_x^2 - (j_y^3 j_x + j_x j_y^3) - (j_x^3 j_y + j_y j_x^3) - 4(j_y j_x + j_x j_y)]$$

§6. ПРИВЕДЕНИЕ ВРАЩАТЕЛЬНЫХ ОПЕРАТОРОВ К СТАНДАРТНОМУ ВИДУ.

Тензорное произведение двух стандартных вращательных операторов не является в общем случае оператором, заданным в стандартном виде. Однако, оно всегда, конечно, может быть представлено в виде линейной комбинации стандартных операторов одного ранга, но разных степеней. Запишем формально такое разложение:

$$[R_{\Omega_1(K_1)}, R_{\Omega_2(K_2)}]^{(K_3)} = \sum_{\delta} (K_1, K_2 | \delta, K_3) R_{\Omega_1 + \Omega_2 - \delta}(K_3) \quad (1)$$

Введенные коэффициенты  $(K_1, K_2 | \delta, K_3)$  не зависят от степеней  $\Omega_1$ , при этом подразумевают, что  $\Omega_1 \geq K_1$ ,  $\Omega_2 \geq K_2$ ,  $\Omega_1 + \Omega_2 - \delta \geq K_3$ . По известным коэффициентам  $(K_1, K_2 | \delta, K_3)$  легко рассчитать коммутатор в вращательном операторе двух произвольных стандартных вращательных операторов, причем для расчета главного вклада в антикоммутатор достаточно использовать коэффициенты с  $\delta = 0$ , а для расчета главного вклада в коммутатор — необходимыми коэффициентами с  $\delta = 1$ . Главным вкладом здесь называется оператор максимальной степени. / Коэффициенты с  $\delta = 0$  могут быть также использованы при приведении к стандартному виду не-приводимых относительно группы вращений следовательных операторов с коммутировавшими компонентами, например координатных операторов рождения или уничтожения, импульса или координат для трехмерных неприводимых представлений квантовых групп. Коэффициенты  $(K_1, K_2 | \delta, K_3)$  симметричны относительно перестановки индексов  $K_1$  и  $K_2$ . Все коэффициенты, входящие в соотношение (1) можно выразить с помощью рекуррентной процедуры через простейшие коэффициенты, входящие в три наиболее простые соотношения:

$$[R_{\Omega_1(K_1)}, R_{\Omega_2(K_2)}]^{(K_3)} = (K_1 | 0, K_3) R_{\Omega_1 + \Omega_2}(K_3)$$

$$[R_{\Omega_1(K_1)}, R_{\Omega_2(K_2)}]^{(K_3)} = (K_1 | 1, K_3) R_{\Omega_1 + \Omega_2 - 1}(K_3) + (K_1 | 2, K_3) R_{\Omega_1 + \Omega_2 - 2}(K_3)$$

Значения четырех использованных коэффициентов должны быть получены непосредственным расчетом. Их значения зависят от выбора элементарных вращательных операторов. Если в соответствие с предыдущим параграфом взять в качестве элементарного вращательного оператора  $A_2 \equiv 2J_2$ , то коэффициенты имеют вид:

$$\begin{aligned} (K_1 | 0, K_3) &= 1 \\ (K_1 | 1, K_3) &= -\sqrt{K(K+1)} \\ (K_1 | 0, K-1) &= K \left[ \frac{3}{(2K-1)(2K+1)} \right]^{1/2} \\ (K_1 | 1, 2, K-1) &= (K-1)K(K+1) \left[ \frac{1}{(2K+1)(2K-1)} \right]^{1/2} \end{aligned}$$

В случае выбора  $A_2 = J_2$ , необходимо все используемые здесь коэффициенты умножить на  $(2)^{1/2}$ .

Нале будут даны несколько достаточно общих формул для расчета  $(K_1, K_2 | \delta, K_3)$  коэффициентов, а также ряд формул для наиболее часто встречающихся частных случаев, когда один из индексов  $K_i$  мал.

$$\begin{aligned} (K_1, K_2 | 0, K_1 + K_2) &= 1 \\ (K_1, K_2 | 0, K_1 + K_2 - 2) &= \left[ \frac{3K_1K_2(K_1 + K_2 - 1)}{(2K_1 + 1)(2K_2 - 1)(K_1 + K_2 - 1)} \right]^{1/2} \\ (K_1, K_2 | 1, K_1 + K_2 - 1) &= - \left[ K_1K_2(K_1 + K_2) \right]^{1/2} \end{aligned}$$

$$((k_1, k_2) \} 0, k_1+k_2-2\Delta) = \left[ \frac{3^{\Delta} (2\Delta-1)!! k_1! (2k_1-2\Delta-1)!!}{\Delta! (k_1-\Delta)! (2k_1-1)!!} \right]$$

$$\times \frac{k_2! (2k_2-2\Delta-1)!! (k_1+k_2-\Delta)! (2k_1+2k_2-4\Delta+1)!!}{(k_2-\Delta)! (2k_2-1)!! (k_1+k_2-2\Delta)! (2k_1+2k_2-2\Delta+1)!!} \Bigg]^{1/2}$$

$$((k_1, k_2) \} 1, k_1+k_2-2\Delta) = - \left[ \frac{3^{\Delta} (2\Delta+1)!! k_1! k_2!}{\Delta! (k_1-\Delta-1)! (2k_1-1)!!} \right]$$

$$\times \frac{(2k_1-2\Delta-1)!! (2k_2-2\Delta-1)!! (k_1+k_2-\Delta)! (2k_1+2k_2-4\Delta-1)!!}{(k_2-\Delta-1)! (2k_2-1)!! (k_1+k_2-2\Delta-1)! (2k_1+2k_2-2\Delta-1)!!} \Bigg]^{1/2}$$

$$((k_1, k_2) \} 2, k_1+k_2-2\Delta) = \left[ 2\Delta k_1 k_2 (k_1+k_2) - \Delta(2\Delta-1)(k_1^2+3k_1k_2+k_2^2) + \Delta(2\Delta-1)^2(k_1+k_2) - f(\Delta) \right]$$

$$\times \left[ \frac{3^{\Delta-1} (2\Delta-1)!! k_1! (2k_1-2\Delta-1)!! k_2! (2k_2-2\Delta-1)!!}{\Delta! (k_1-\Delta)! (2k_1-1)!! (k_2-\Delta)! (2k_2-1)!!} \right]$$

$$\times \left[ \frac{(k_1+k_2-\Delta)! (2k_1+2k_2-4\Delta+1)!!}{(k_1+k_2-2\Delta)! (2k_1+2k_2-2\Delta+1)!!} \right]^{1/2}$$

$$f(\Delta) = \Delta + \sum_{k=0}^{\Delta-1} (k+2k^2+8k^3) = \Delta + \Delta(\Delta-1)/2 + \Delta(\Delta-1)(2\Delta-1)/3 + 2\Delta^2(\Delta-1)^2$$

$$((k, k_2) \} 0, k_2)$$

$$1$$

$$- \sqrt{k(k+1)}$$

$$\frac{k\sqrt{3}}{\sqrt{(2k-1)(2k+1)}}$$

$$\frac{(k-1)k(k+1)}{\sqrt{(2k-1)(2k+1)^3}}$$

$$1$$

$$- \sqrt{2k(k+2)}$$

$$\left[ \frac{2k(k+1)}{(2k+3)(2k-1)} \right]^{1/2}$$

$$\left[ \frac{6k(k+1)}{(2k-1)(2k+3)} \right]^{1/2}$$

$$-k \left[ \frac{5(k-1)(k+1)}{(2k-1)(2k+1)} \right]^{1/2}$$

$$-(k-1)k(k+1) \left[ \frac{2(k-1)(k+1)}{(2k-1)(2k+1)} \right]^{1/2}$$

$$\frac{3k(k-1)}{(2k-1)\sqrt{(2k+1)(2k-3)}}$$

$$\frac{\sqrt{3}(k-1)k(2k^2-2k-1)}{(2k-1)\sqrt{(2k+1)(2k-3)}}$$

$$\frac{(k-2)(k-1)^2 k^2 (k+1)}{(2k-1)\sqrt{(2k+1)(2k-3)}}$$

$$1$$

$$- \sqrt{3k(k+3)}$$

$$\begin{aligned}
& 3 \left[ \frac{k(k+2)}{5(2k+5)(2k-1)} \right]^{1/2} \\
& 3 \cdot 2 \cdot k+1 \left[ \frac{(15k^2+30k-24) \left[ \frac{k(k+2)}{15(2k+5)(2k-1)} \right]^{1/2}}{5(2k-1)(2k+3)} \right]^{1/2} \\
& 3 \cdot 1 \cdot k \left[ \frac{6k(k+1)(k+2)(k-1)}{5(2k-1)(2k+3)} \right]^{1/2} \\
& 3 \cdot 3 \cdot k \left[ \frac{-(5k^2+9k-6) \left[ \frac{2k(k+1)(k-1)(k+2)}{5(2k-1)(2k+3)} \right]^{1/2}}{5(2k-1)(2k+3)} \right]^{1/2} \\
& 3 \cdot 0 \cdot k-1 \left[ \frac{3k \left[ \frac{3(k-1)(k+1)}{5(2k-3)(2k-1)(2k+1)(2k+3)} \right]^{1/2}}{5(2k-3)(2k-1)(2k+1)(2k+3)} \right]^{1/2} \\
& 3 \cdot 2 \cdot k-1 \left[ \frac{3k(5k^2-13) \left[ \frac{(k-1)(k+1)}{5(2k-3)(2k-1)(2k+1)(2k+3)} \right]^{1/2}}{5(2k-3)(2k-1)(2k+1)(2k+3)} \right]^{1/2} \\
& 3 \cdot 4 \cdot k-1 \left[ \frac{k(k^2-1)(5k^2-12) \left[ \frac{3(k-1)(k+1)}{5(2k-3)(2k-1)(2k+1)(2k+3)} \right]^{1/2}}{5(2k-3)(2k-1)(2k+1)(2k+3)} \right]^{1/2} \\
& 3 \cdot 1 \cdot k-2 \left[ \frac{-3k(k-1)}{2k-1} \left[ \frac{3(k+1)(k-2)}{(2k-3)(2k+1)} \right]^{1/2}}{2k-1} \right]^{1/2} \\
& 3 \cdot 3 \cdot k-2 \left[ \frac{-3k(k-1)(2k^2-2k-1)}{2k-1} \left[ \frac{(k+1)(k-2)}{(2k+1)(2k-3)} \right]^{1/2}}{2k-1} \right]^{1/2} \\
& 3 \cdot 5 \cdot k-2 \left[ \frac{-(k-2)(k-1)^2 k^2 (k+1) \left[ \frac{3(k+1)(k-2)}{(2k+1)(2k-3)} \right]^{1/2}}{2k-1} \right]^{1/2} \\
& 3 \cdot 0 \cdot k-3 \left[ \frac{2\sqrt{3}k(k-1)(k-2)}{(2k-3)(2k-1)\sqrt{(2k-5)(2k+1)}} \right]^{1/2} \\
& 3 \cdot 2 \cdot k-3 \left[ \frac{3k(k-1)(k-2)(9k^2-6k+2)}{(2k-3)(2k-1)\sqrt{(2k-5)(2k+1)}} \right]^{1/2}
\end{aligned}$$

- 24 -

$$\begin{aligned}
& 3 \cdot 4 \cdot k-3 \left[ \frac{3\sqrt{3}k(k-1)^2(k-2)(k^2-3k^2+k+1)}{(2k-1)(2k-3)\sqrt{(2k-5)(2k+1)}} \right]^{1/2} \\
& 3 \cdot 6 \cdot k-3 \left[ \frac{(k-3)(k-2)^2(k-1)^2 k^2 (k+1)}{(2k-3)(2k-1)\sqrt{(2k-5)(2k+1)}} \right]^{1/2} \\
& 4 \cdot 0 \cdot k+4 \left[ \frac{1}{2\sqrt{k(k+4)}} \right]^{1/2} \\
& 4 \cdot 1 \cdot k+3 \left[ \frac{2 \left[ \frac{3k(k+3)}{7(2k-1)(2k+7)} \right]^{1/2}}{7(2k-1)(2k+7)} \right]^{1/2} \\
& 4 \cdot 0 \cdot k+2 \left[ \frac{2(7k^2+21k-13) \left[ \frac{k(k+3)}{7(2k+7)(2k-1)} \right]^{1/2}}{7(2k-1)(2k+5)} \right]^{1/2} \\
& 4 \cdot 2 \cdot k+2 \left[ \frac{2(7k^2+21k-13) \left[ \frac{k(k+3)}{7(2k+7)(2k-1)} \right]^{1/2}}{7(2k-1)(2k+5)} \right]^{1/2} \\
& 4 \cdot 1 \cdot k+1 \left[ \frac{-6 \left[ \frac{3(k-1)k(k+2)(k+3)}{7(2k-1)(2k+5)} \right]^{1/2}}{7(2k-1)(2k+5)} \right]^{1/2} \\
& 4 \cdot 3 \cdot k+1 \left[ \frac{-2(7k^2+14k-11) \left[ \frac{k(k-1)(k+2)(k+3)}{7(2k-1)(2k+5)} \right]^{1/2}}{7(2k-1)(2k+5)} \right]^{1/2} \\
& 4 \cdot 0 \cdot k \left[ \frac{9 \left[ \frac{2(k-1)k(k+1)(k+2)}{35(2k-3)(2k-1)(2k+3)(2k+5)} \right]^{1/2}}{35(2k-3)(2k-1)(2k+3)(2k+5)} \right]^{1/2} \\
& 4 \cdot 2 \cdot k \left[ \frac{3(10k^2+10k-37) \left[ \frac{6k(k-1)(k+1)(k+2)}{35(2k-1)(2k-3)(2k+3)(2k+5)} \right]^{1/2}}{35(2k-1)(2k-3)(2k+3)(2k+5)} \right]^{1/2} \\
& 4 \cdot 4 \cdot k \left[ \frac{(7k^4+14k^3-29k^2-36k+16) \left[ \frac{10k(k^2-1)(k+2)}{7(2k-3)(2k-1)(2k+3)(2k+5)} \right]^{1/2}}{7(2k-3)(2k-1)(2k+3)(2k+5)} \right]^{1/2} \\
& 4 \cdot 1 \cdot k-1 \left[ \frac{-18k \left[ \frac{(k+1)(k-3)(k-2)(k-2)}{7(2k-3)(2k-1)(2k+1)(2k+3)} \right]^{1/2}}{7(2k-3)(2k-1)(2k+1)(2k+3)} \right]^{1/2} \\
& 0 \cdot 4 \cdot 3 \cdot k-1 \left[ \frac{-2k(10k^2-21) \left[ \frac{3(k-2)(k-1)(k+1)(k+2)}{7(2k-3)(2k-1)(2k+1)(2k+3)} \right]^{1/2}}{7(2k-3)(2k-1)(2k+1)(2k+3)} \right]^{1/2}
\end{aligned}$$

- 24 -

$$\begin{aligned}
4 \quad 5 \quad k-1 & - \frac{2(k-1)k(k+1)(7k^2-18) [(k-2)(k^2-1)(k+2)]^{1/2}}{[7(2k-3)(2k-1)(2k+1)(2k+3)]^{1/2}} \\
4 \quad 0 \quad k-2 & \frac{6k(k-1) \sqrt{3(k-2)(k+1)}}{(2k-1) \sqrt{7(2k-5)(2k-3)(2k+1)(2k+3)}} \\
4 \quad 2 \quad k-2 & \frac{6k(k-1)(9k^2-9k-2) \sqrt{(k-2)(k+1)^2}}{(2k-1) \sqrt{7(2k-5)(2k-3)(2k+1)(2k+3)}} \\
4 \quad 4 \quad k-2 & \frac{6k(k-1)(5k^4-10k^3-16k^2+21k+9) \sqrt{3(k-2)(k+1)^2}}{[ \cdot (-1) \sqrt{7(2k-5)(2k-3)(2k+1)(2k+3)} ] \\
4 \quad 6 \quad k-2 & \frac{2(k-2)(k-1)^2 k^2 (k+1)(7k^2-7k-2) \sqrt{(k-2)(k+1)^2}}{(2k-1) \sqrt{7(2k-5)(2k-3)(2k+1)(2k+3)}} \\
4 \quad 1 \quad k-3 & - \frac{6k(k-1)(k-2) \left[ \frac{3(k+1)(k-3)}{(2k-3)(2k-1)} \right]^{1/2}}{(2k-3)(2k-1)} \\
4 \quad 3 \quad k-3 & - \frac{6k(k-1)(k-2)(3k^2-6k+2) \left[ \frac{(k+1)(k-3)}{(2k-5)(2k+1)} \right]^{1/2}}{(2k-3)(2k-1)} \\
4 \quad 5 \quad k-3 & - \frac{6k(k-1)^2(k-2)(k^3-3k^2+k+1) \sqrt{3(k+1)(k-3)^2}}{(2k-1)(2k-3) \sqrt{(2k-5)(2k+1)^2}} \\
4 \quad 7 \quad k-3 & - \frac{2(k-1)(k-2)^2(k-1)^3 k^2 (k+1) \sqrt{(k+1)(k-3)^2}}{(2k-3)(2k-1) \sqrt{(2k+1)(2k-5)^2}} \\
4 \quad 0 \quad k-4 & \frac{9 k \cdot k \cdot (k-1) (k-2) (k-3)}{(2k-5)(2k-3)(2k-1) \sqrt{(2k-7)(2k+1)}} \\
4 \quad 2 \quad k-4 & \frac{6 \sqrt{3} k(k-1)(k-2)(k-3) (2k^2-6k+5)}{(2k-5)(2k-3)(2k-1) \sqrt{(2k-7)(2k+1)}} \\
4 \quad 4 \quad k-4 & \frac{3k(k-1)(k-2)(k-3) [6k^4-16k^3+77k^2-60k+13]}{(2k-5)(2k-3)(2k-1) \sqrt{(2k-7)(2k+1)}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
4 \quad 6 \quad k-4 & \frac{2 \sqrt{3} (k-1)^3 (k-2)^3 (k-3) (2k^2-6k-3)}{(2k-5)(2k-3)(2k-1) \sqrt{(2k-7)(2k+1)}} \\
4 \quad 8 \quad k-4 & \frac{(k+1)k^2(k-1)^3(k-2)^2(k-3)^2(k-4)}{(2k-5)(2k-3)(2k-1) \sqrt{(2k-7)(2k+1)}}
\end{aligned}$$

§7. КОМПАКТНЫЕ ОПЕРАТОРЫ ТИПА  $F_2$ .

Компактные операторы, преобразующиеся по неприводимому представлению  $F_2$ , можно рассмотреть также как операторы типа  $I_n$  относительно группы трехкратных вращений. Это позволяет ввести стандартные компактные операторы аналогично тому, как это было сделано для компактных операторов. Например, стандартный оператор унитарна матрица  $S_2$  определяется как

$$A_{\Omega}(K, n, \Gamma) = \underbrace{[a \cdot a]^{0, \dots, 0}}_{\Omega-K} \cdot \underbrace{[a \cdot a]^{0, \dots, 0}}_K \cdot \underbrace{[a \cdot a \cdot \dots \cdot a]}_K (K, n, \Gamma)$$

Здесь  $K$  - ранг относительно группы трехкратных вращений,  $\Gamma$  - тип неприводимого представления относительно точечной подгруппы,  $n$  - индекс мультиплетности. Для данного ранга  $K$  встречаются те неприводимые представления, которые входят в разложение представления  $K$ . Группы вращений на не-приводимые представления точечной подгруппы, причем при четном  $K$   $\alpha = \beta$ , а при нечетном  $K$   $\alpha = \beta + 1$ .

Для данного построения соответствующих операторов необходимо учесть переходы от более общих координат

$$K_{\alpha_1 \Gamma_1, \alpha_2 \Gamma_2, \alpha_3 \Gamma_3} \text{ к координатам } K_{\alpha_1 \Gamma_1, \alpha_2 \Gamma_2, \alpha_3 \Gamma_3}, \text{ приве-$$

дениям, в частности, в  $SO_3$ . Общее правило проще сформулировать для  $F$  координатом, с которыми  $K$  координаты могут быть легко связаны. Следуя работе [14] получим

$$F_{\alpha_1 \Gamma_1, \alpha_2 \Gamma_2, \alpha_3 \Gamma_3} = \in F_{\alpha_1 \Gamma_1, \alpha_2 \Gamma_2, \alpha_3 \Gamma_3}$$

причем замена  $\rho_i$  на  $\rho_i'$  соответствует замене  $A_i \leftrightarrow A_i'$ ,  $F_1 \leftrightarrow F_1'$ ,  $F_2 \leftrightarrow F_2'$ ,  $F_3 \leftrightarrow F_3'$ ,  $\alpha \in \pm 1$ , если замена  $F_2 \rightarrow F_2'$  происходит четное число раз,  $\alpha \in \mp 1$ , если замена  $F_2 \rightarrow F_2'$  происходит нечетное число раз. Все остальные замены не влияют знака  $F$  огибающей.

Приведем теперь явные выражения для стандартных компактных операторов, построенных из неприводимых тензорных операторов типа  $F_2$  о коммутативных координатах.

Индекс  $F_2$  у операторов для краткости будем опускать.

$$(a \cdot a)^{0, \Delta_1} = -(1/\sqrt{3}) (a_x^2 + a_y^2 + a_z^2)$$

$$(a \cdot a)^{2, B} = (1/\sqrt{6}) (2a_x^2 - a_y^2 - a_z^2)$$

$$(a \cdot a)^{2, B} = (1/\sqrt{2}) (a_x^2 - a_y^2)$$

$$(a \cdot a)^{2, B} = \sqrt{2} a_x a_y$$

$$((a \cdot a)^{0, \alpha})^{1, B} = -(1/\sqrt{3}) (a_x^2 + a_y^2 + a_z^2) a_x$$

$$(a \cdot a \cdot a)^{3, \Delta_1} = \sqrt{6} a_x a_y a_z$$

$$((a \cdot a)^{2, \alpha})^{3, B} = \sqrt{3/2} a_x (a_x^2 - a_y^2)$$

$$((a \cdot a)^{2, \alpha})^{3, B} = (1/\sqrt{10}) (2a_x^2 - 3a_y^2 - 3a_z^2) a_x$$

$$[(a \cdot a)^{0, \alpha} (a \cdot a)^{0, \beta}]^{0, \Delta_1} = (1/3) (a_x^2 + a_y^2 + a_z^2)^2$$

$$[(a \cdot a)^{0, \alpha} (a \cdot a)^{1, \alpha}]^{2, B} = (1/3\sqrt{2}) [a_x^4 + a_y^4 - 2a_x^2 a_y^2 + 2a_x^2 a_y^2 - a_x^2 a_z^2 - a_y^2 a_z^2]$$

$$[(a \cdot a)^{0, \alpha} (a \cdot a)^{1, \alpha}]^{2, B} = -(1/\sqrt{6}) (a_x^4 - a_y^4 + a_x^2 a_y^2 - a_y^2 a_x^2)$$

$$[(a \cdot a)^{0, \alpha} (a \cdot a)^{1, \alpha}]^{2, B} = -\sqrt{2/3} (a_x^2 + a_y^2 + a_z^2) a_x a_y$$

$$[(a \cdot a)^2 \cdot a]^{4, A_1} = \sqrt{2/15} [a_x^4 + a_y^4 + a_z^4$$

$$- 3(a_x^2 a_y^2 + a_y^2 a_z^2 + a_z^2 a_x^2)]$$

$$[(a \cdot a)^2 \cdot a]^{4, B_1} = (1/\sqrt{42}) (a_x^4 + a_y^4 - 2a_z^4$$

$$- 12a_x^2 a_y^2 + 6a_x^2 a_z^2 + 6a_y^2 a_z^2)$$

$$[(a \cdot a)^2 \cdot a]^{4, B_2} = (1/\sqrt{14}) (a_y^4 - a_x^4$$

$$+ 6a_x^2 a_z^2 - 6a_y^2 a_z^2)$$

$$[(a \cdot a)^2 \cdot a]^{4, F_1} = \sqrt{2} (a_x^2 - a_y^2) a_z a_y$$

$$[(a \cdot a)^2 \cdot a]^{4, F_2} = \sqrt{2/7} (6a_x^2 - a_y^2 - a_z^2) a_y a_z$$

### §8. КОМПЛЕКТНЫЕ ОПЕРАТОРЫ ТИПА E.

Разложение симметризованных степеней неприводимого представления  $\Gamma$  для точечных групп  $O$  или  $T_d$  дано в §9 части I лекции. Для данной степени  $n$  определим набор координатных операторов, построенных из  $n$  элементарных операторов типа  $E$  в помощи двух дополнительных индексов,  $(K, \Gamma)$ . Индекс  $\Gamma$  характеризует неприводимое представление относительно точечной группы, а индекс  $K$  будем условно называть "рангом". Таким образом произвольный неприводимый тензорный оператор, построенный, например, из операторов уничтожения типа  $E$ , записывается как

$$A^{n(K, \Gamma)}$$

Для данного  $n$  -  $K$  принимает значения  $n, n-2, \dots, 1$  или  $0$ . При  $K=0, \Gamma=A_1$ , при  $K=3C+1$  и  $K=3C+2, \Gamma=E$ . В случае, если  $K$  положительное и кратно трем,  $\Gamma$  принимает два значения  $A_1$  и  $A_2$ .

Явный вид операторов задан с помощью вытекающих соотношений. Везде далее вместо  $E$  у элементарных операторов будем опускать  $\cdot$

$$A^{n(K, \Gamma)} = (2)^{-(n-K)/2} (a_1^2 + a_2^2)^{(n-K)/2} A^{n(K, \Gamma)}$$

При этом необходимо формально положить  $A^{0(0, A_1)} = \sqrt{2}$ .

Для операторов  $A^{n(K, \Gamma)}$  имеем явные выражения через компоненты элементарных операторов типа  $E$ :

$$A^{n(K, \Gamma)} = \frac{\alpha(K)}{2^{(n-K)/2}} \sum_{s=0}^{[K/2]} (-1)^s \binom{K}{2s} a_1^{K-2s} a_2^{2s} \quad (1)$$

$$A^{n(K, \Gamma)} = \frac{\beta(K)}{2^{(n-K)/2}} \sum_{s=0}^{[K/2]} (-1)^s \binom{K}{2s+1} a_1^{K-2s-1} a_2^{2s+1} \quad (2)$$



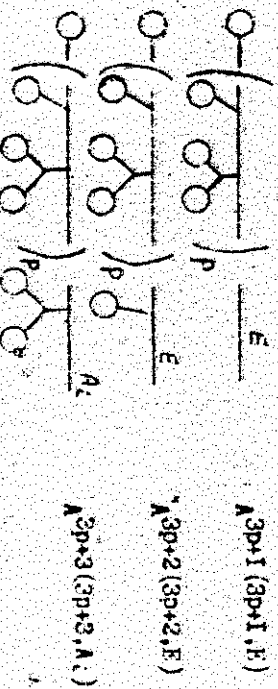
Здесь

$\begin{pmatrix} K \\ \pm \end{pmatrix}$  - факториальные коэффициенты.

$\chi(K) = 1$  при  $K=0 \bmod 6$ ,  $K=1 \bmod 6$ ,  $K=5 \bmod 6$ ,  
 $\chi(K) = -1$  при  $K=2 \bmod 6$ ,  $K=3 \bmod 6$ ,  $K=4 \bmod 6$ ,  
 $\rho(K) = 1$  при  $K=1 \bmod 6$ ,  $K=2 \bmod 6$ ,  $K=3 \bmod 6$ ,  
 $\rho(K) = -1$  при  $K=0 \bmod 6$ ,  $K=4 \bmod 6$ ,  $K=5 \bmod 6$ .  
 $[a]$  - целая часть  $a$ , при  $K=2m$ ,  $[K/2] = m = K/2$ . При  $K=2m+1$ ,  $[K/2] = m = (K-1)/2$ .

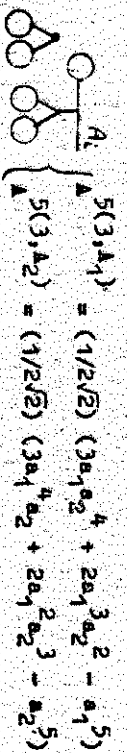
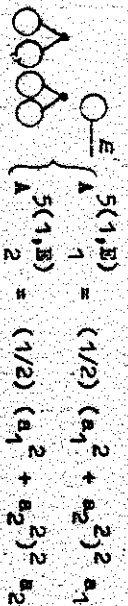
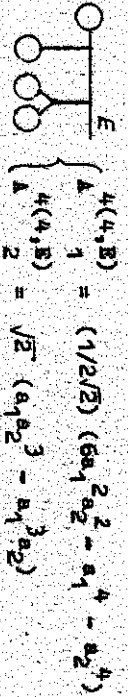
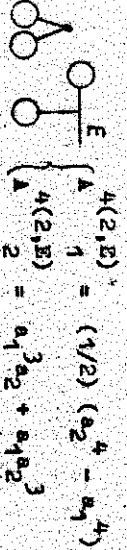
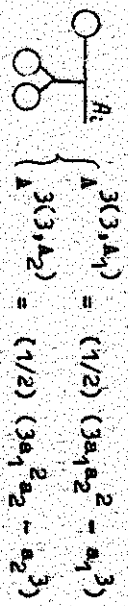
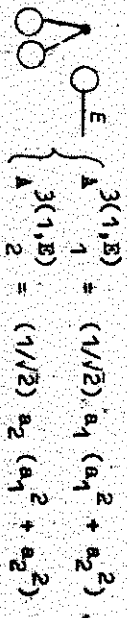
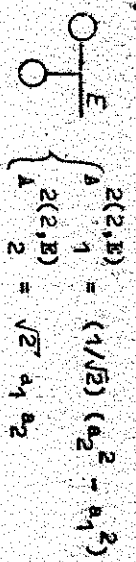
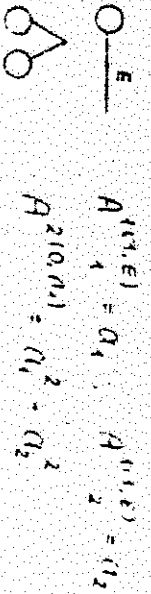
Формула (1) для  $A^{(K, \Gamma)}$  описывает оператор  $A^{(K, \Gamma)}$   
 и  $A^{(K, A_1)}$ , формула (2) для  $A^{(K, \Gamma)}$  описывает  $A^{(K, \Gamma)}$   
 и  $A^{(K, A_1)}$ .

Формулы (1) и (2) соответствуют ожемам связи элементов  
 тарных операторов, представленных на нижеследующих диаграм-  
 мах.



Все внутренние линии на приведенных диаграммах являются  
 линиями типа  $F$ .

Для конкретных приложений условно имеют формулы для  
 простейших операторов  $\rho$ . Они будут приведены ниже вместе с  
 графиками, иллюстрирующими соответствующую схему связи.



$$\left\{ \begin{array}{l} \Lambda_1 \\ \Lambda_2 \end{array} \right. \left\{ \begin{array}{l} 5(5, B) \\ 5(5, B) \end{array} \right. = \begin{pmatrix} 1/4 & (4_1^5 - 10a_1^3 a_2^2 + 5a_1 a_2^4) \\ 1/4 & (10a_1^2 a_2^3 - 5a_1^4 a_2 - a_2^5) \end{pmatrix}$$

$$\Lambda_1 \left\{ \begin{array}{l} 6(0, A_1) \end{array} \right. = (1/2) (a_1^2 + a_2^2)^3$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \Lambda_1 \\ \Lambda_2 \end{array} \right. \left\{ \begin{array}{l} 6(2, B) \\ 6(2, B) \end{array} \right. = \begin{pmatrix} (1/2)(2) (a_2^6 + a_1^2 a_2^4 - a_1^4 a_2^2 - a_1^6) \\ (1/2)(2) (2a_1^5 a_2 + 4a_1^3 a_2^3 + 2a_1 a_2^5) \end{pmatrix}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \Lambda_1 \\ \Lambda_2 \end{array} \right. \left\{ \begin{array}{l} 6(4, B) \\ 6(4, B) \end{array} \right. = \begin{pmatrix} (1/4) (5a_1^4 a_2^2 + 5a_1^2 a_2^4 - a_1^6 - a_2^6) \\ (1/4) (4a_1^4 a_2^5 - 4a_1^5 a_2) \end{pmatrix}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \Lambda_1 \\ \Lambda_2 \end{array} \right. \left\{ \begin{array}{l} 6(6, A_1) \\ 6(6, A_2) \end{array} \right. = \begin{pmatrix} (1/4)(2) (a_1^6 - 15a_1^4 a_2^2 + 15a_1^2 a_2^4 - a_2^6) \\ (1/4)(2) (20a_1^3 a_2^3 - 6a_1^4 a_2^5 - 6a_1^5 a_2) \end{pmatrix}$$

Для введённых операторов необходимо получить далее формулы приведения, аналогичные формулам §6. То есть найти коэффициенты разложения произвольного тензорного произведения двух стандартных операторов по стандартным операторам. Для рассмотренного класса операторов выше оговорённое можно записать в виде

$$\left[ \Lambda_1 \eta_1(K_1, \Gamma_1), \Lambda_2 \eta_2(K_2, \Gamma_2) \right] (1^r) = \sum_K \left[ K_1 \Gamma_1; K_2 \Gamma_2 \right] \left[ K \Gamma \right] \Lambda_1 \eta_2(K, \Gamma)$$

где  $\left[ K_1 \Gamma_1; K_2 \Gamma_2 \right] \left[ K \Gamma \right]$  — коэффциенты приведения.

О поощря непосредственного расчёта можно показать, что коэффициенты отличны от нуля только в том случае, когда  $K = K_1 \pm K_2$ . Будем считать, что  $K_1 \geq K_2$ . Этого всегда можно добиться за счёт изменения порядка слагаемых, поскольку рассматриваемые операторы коммутативны. Все необходимые коэффициенты приведены в следующей таблице.

Таблица. Коэффициенты  $\left[ K_1 \Gamma_1; K_2 \Gamma_2 \right] \left[ K \Gamma \right]$ .

$K_1$	$\Gamma_1$	$K_2$	$\Gamma_2$	$K$	$\Gamma$	$\left[ K_1 \Gamma_1; K_2 \Gamma_2 \right] \left[ K \Gamma \right]$
$\Lambda_1$	$\Gamma$	$\Lambda_1$	$\Gamma$	$\Lambda_1$	$\Gamma$	$2^{1/2}$
$3\Lambda_1$	$\Lambda_1$	$3\Lambda_1$	$\Lambda_1$	$3\Lambda_1$	$\Lambda_1$	$2^{-1/2}$
$3\Lambda_1$	$\Lambda_2$	$3\Lambda_1$	$\Lambda_2$	$3\Lambda_1$	$\Lambda_2$	$2^{-1/2}$
$3\Lambda_1 + 1$	$\Lambda_1$	$3\Lambda_1$	$\Lambda_1$	$3\Lambda_1 + 1$	$\Lambda_1$	$2^{-1/2}$
$3\Lambda_1 + 2$	$\Lambda_1$	$3\Lambda_1$	$\Lambda_1$	$3\Lambda_1 + 2$	$\Lambda_1$	$2^{-1/2}$
$3\Lambda_1 + 2$	$\Lambda_2$	$3\Lambda_1$	$\Lambda_2$	$3\Lambda_1 + 2$	$\Lambda_2$	$2^{-1/2}$
$3\Lambda_1 + 1$	$\Lambda_2$	$3\Lambda_1$	$\Lambda_2$	$3\Lambda_1 + 1$	$\Lambda_2$	$2^{-1/2}$
$3\Lambda_1 + 1$	$\Lambda_1$	$3\Lambda_1$	$\Lambda_1$	$3\Lambda_1 + 1$	$\Lambda_1$	$2^{-1/2}$
$3\Lambda_1 + 2$	$\Lambda_1$	$3\Lambda_1$	$\Lambda_1$	$3\Lambda_1 + 2$	$\Lambda_1$	$2^{-1/2}$
$3\Lambda_1 + 2$	$\Lambda_2$	$3\Lambda_1$	$\Lambda_2$	$3\Lambda_1 + 2$	$\Lambda_2$	$2^{-1/2}$
$3\Lambda_1 + 1$	$\Lambda_1$	$3\Lambda_1$	$\Lambda_1$	$3\Lambda_1 + 1$	$\Lambda_1$	$2^{-1/2}$
$3\Lambda_1 + 1$	$\Lambda_2$	$3\Lambda_1$	$\Lambda_2$	$3\Lambda_1 + 1$	$\Lambda_2$	$2^{-1/2}$
$3\Lambda_1 + 2$	$\Lambda_1$	$3\Lambda_1$	$\Lambda_1$	$3\Lambda_1 + 2$	$\Lambda_1$	$2^{-1/2}$
$3\Lambda_1 + 2$	$\Lambda_2$	$3\Lambda_1$	$\Lambda_2$	$3\Lambda_1 + 2$	$\Lambda_2$	$2^{-1/2}$

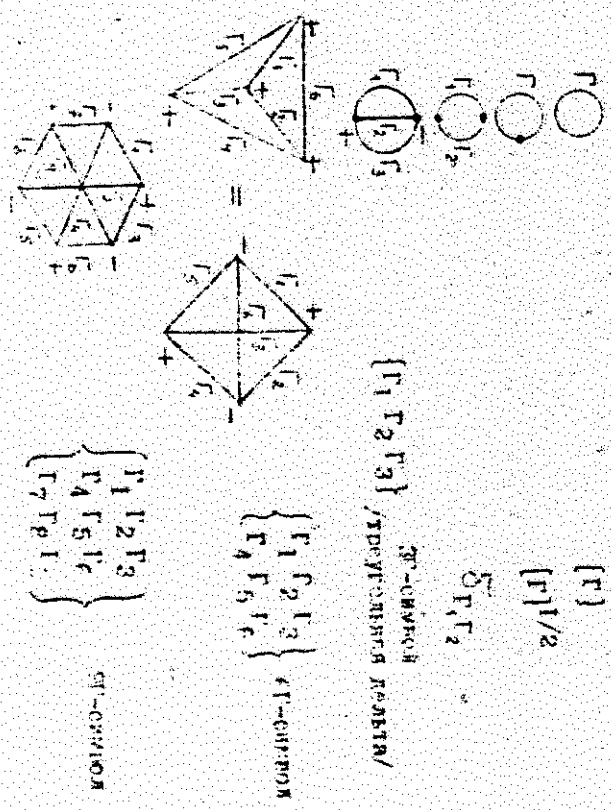
$K_1$	$\Gamma_1$	$K_2$	$\Gamma_2$	$K$	$\Gamma$	$[K\Gamma_1; K\Gamma_2 \} \cap \Gamma]$
$3r+1$	$E$	$3r'$	$A_1$	$3r+3r'+1$	$E$	$2^{-1/2}$
				$3r-3r'+1$	$E$	$2^{-(3r'+1)/2}$
		$3r'$	$A_2$	$3r+3r'+1$	$E$	$2^{-1/2}$
				$3r-3r'+1$	$E$	$2^{-(3r'+1)/2}$
		$3r'+1$	$E$	$3r+3r'+2$	$A_1$	$0$
				$3r-3r'$	$A_1$	$2^{-(3r'+1)/2}$
				$3r+3r'+2$	$E$	$1$
				$3r-3r'$	$E$	$0$
		$3r'+2$	$E$	$3r+3r'+3$	$A_1$	$1$
				$3r-3r'-1$	$A_1$	$0$
				$3r+3r'+3$	$E$	$2^{-(3r'+2)/2}$
				$3r-3r'-1$	$E$	$0$
		$3r+2$	$E$	$3r+3r'+2$	$E$	$2^{-1/2}$
				$3r-3r'+2$	$E$	$2^{-(3r'+1)/2}$
		$3r'$	$A_2$	$3r+3r'+2$	$E$	$-2^{-1/2}$
				$3r-3r'+2$	$E$	$2^{-(3r'+1)/2}$
		$3r'+1$	$E$	$3r+3r'+3$	$A_1$	$1$
				$3r-3r'+1$	$A_1$	$0$
				$3r+3r'+3$	$A_2$	$-1$
				$3r-3r'+1$	$A_2$	$0$
		$3r'+2$	$E$	$3r+3r'+3$	$E$	$0$
				$3r-3r'+1$	$E$	$2^{-(3r'+1)/2}$
				$3r+3r'+4$	$A_1$	$0$
				$3r-3r'$	$A_1$	$2^{-(3r'+2)/2}$
				$3r+3r'+4$	$A_2$	$0$
				$3r-3r'$	$A_2$	$-2^{-(3r'+2)/2}$
				$3r+3r'+4$	$E$	$1$
				$3r-3r'$	$E$	$0$

### §9. ПРАВИЛА РАБОТЫ С ГРАФИКАМИ ДЛЯ ТОЧЕЧНЫХ ГРУПП.

В настоящее время разработаны будут даны правила сопоставления аналитических выражений графикам и правила преобразования графиков. При этом предполагается, что группа является простой группой, а все рассуждениям предположений левые. Указанные условия выполняются, например, при изучении комбинаторно-предельной системы для коммутативной группы симметрии  $O$  или  $T_d$ .

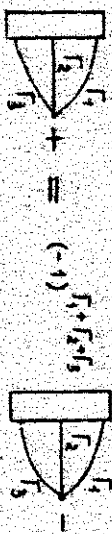
Краткое изложение теории графического метода дано в части I лекции /см. также рукопись [5, I §-17]/. Первоначально здесь сводка формул носит чисто справочный характер и является минимальной необходимой для решения задачи, рассмотренной в данном курсе.

Наглядные функции /матрицы/ графические изображения

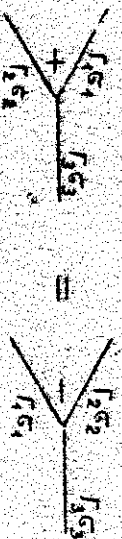


Грещковские операции.

Изменение знака узла.



Изменение ориентации узла.



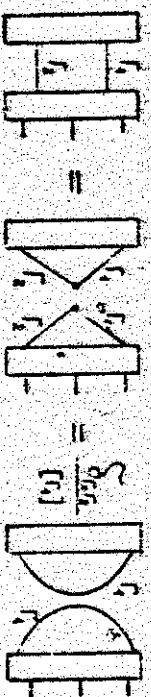
Отрицание гофри в дуге.



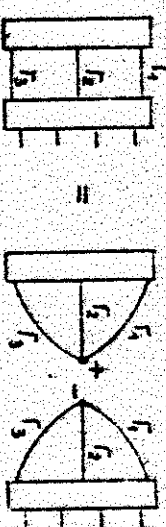
Сжатие дуги в точку A1.



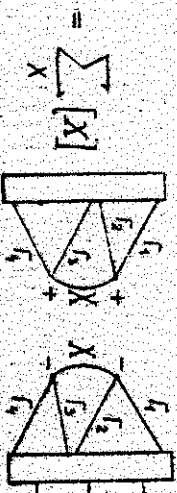
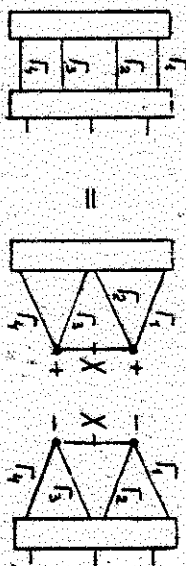
Разрезание по двум дугам.



Разрезание по трем дугам.

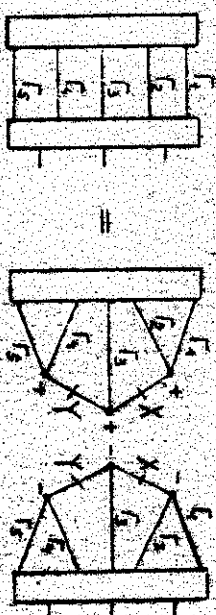


Разрезание по четырем дугам.



Перевернутая дуга на гребенке соответствует оумингованию по неподвижному представлению с жесом, равным радиусности преобразователя.

Разрезание по пяти дугам.



### §10. N-ФОРМА КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ ОПЕРАТОРОВ.

В данном параграфе будет рассмотрена процедура приведения к N-форме произведений колебательных операторов. Сначала мы сформируем рецит приращений для операторов типа F, а затем на более частном примере решим аналогичную задачу для операторов типа G. Для операторов A типа переход к тензорной записи не приводит ни к каким усложнениям, поэтому этот случай рассматриваться не будет.

Пусть задано произведение колебательных операторов вида

$$[A^{(n_j)} \cdot B^{(m_k)}]_{L_p} \quad (1)$$

где

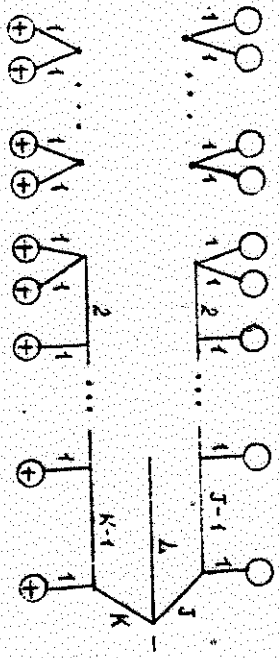
$$A^{(n_j)} = \underbrace{[a \cdot a]_0 \dots [a \cdot a]_0}_{(n-j)/2 \text{ пар}} \cdot \underbrace{[a \cdot a \dots a]_j}_j$$

$$B^{(m_k)} = \underbrace{[a^+ \cdot a^+]_0 \dots [a^+ \cdot a^+]_0}_{(m-k)/2 \text{ пар}} \cdot \underbrace{[a^+ \dots a^+]_k}_k$$

Операторы  $a$  и  $a^+$  имеют тип симметрии  $I_{11}$  и  $F_2$  относительно группы  $O(3)$  и  $T_d$ .

Тензорное произведение (1) может быть изображено следующим графикам

$$[5 \cdot 7 \dots (2j+1) \cdot 5 \cdot 7 \dots (2k+1)]^{1/2} (-1)^L [2L+1]^{1/2}$$



Напомним, что для нестандартного базиса соединенные контуры на графиках соответствует суммированию вида  $\sum_p (-1)^L (\dots)$

Общая формула для представления оператора в N-форме /тензорная теорема Яка/ имеет вид:

$$[A^{(n_j)} \cdot B^{(m_k)}]_{L_p} =$$

$$= N[A^{(n_j)} \cdot B^{(m_k)}]_{L_p} + N[A^{(n_j)} \cdot B^{(m_k)}]_{L_p} + \dots$$

$$+ \dots + N[A^{(n_j)} \cdot B^{(m_k)}]_{L_p} + \dots$$

Здесь  $N[A^{(n_j)} \cdot B^{(m_k)}]_{L_p}$  - есть сумма всех возможных N-произведений с  $\pm$ -сигнатурами. Под знаком N-произведения операторы считаются коммутирующими.

Примеры графического изображения стандартных:

- a/ срезать один пустой круг,  $\bigcirc$ , и один кругок с крестом,  $\oplus$ ;
- б/ соединить образующиеся свободные концы;
- в/ умножить подугловой график на  $(-1)^L$ .

Примеры перемещения контуров.

В операторе  $A^{(j,j)}$  можно произвольно переставлять концы и менять ориентацию узлов без изменения сигнатуры.

Приведем пример расчета на простом примере.

N-форма произведения без сдвигов:

$$N[A^{(n_j)} \cdot B^{(m_k)}]_{L_p} = (-1)^L [B^{(m_k)} \cdot A^{(n_j)}]_{L_p}$$

N-форма произведения с одним сдвигом:

$$N[A^{(n_j)} \cdot B^{(m_k)}]_{L_p} =$$

$$\begin{aligned}
&= KJ \left\{ -\sqrt{(2J+1)(2K+1)} \begin{pmatrix} L & K & J \\ 1 & J-1 & K-1 \end{pmatrix} (-)^L \sqrt{2L+1} \right. \\
&\quad \left. + (n-J)K \left\{ -\sqrt{2K+1} \begin{pmatrix} L & K & J \\ 1 & J-1 & K-1 \end{pmatrix} (-)^L \sqrt{2L+1} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + (m-K)J \left\{ -\sqrt{2J+1} \begin{pmatrix} L & K & J \\ 1 & J-1 & K-1 \end{pmatrix} (-)^L \sqrt{2L+1} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + (n-J)(m-K) \left\{ (-)^L \sqrt{2L+1} \begin{pmatrix} L & K & J \\ 1 & J-1 & K-1 \end{pmatrix} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - KJ \sqrt{(2J+1)(2K+1)} \begin{pmatrix} L & K & J \\ 1 & J-1 & K-1 \end{pmatrix} \left( B_{\sigma_0}^{(m-1, K+1)} \cdot A^{(n-1, J+1)} \right)_p^L \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - (n-J)K \frac{\sqrt{2K+1}}{\sqrt{5}} \sum_X \sqrt{2X+1} \begin{pmatrix} L & K & J \\ 1 & J-1 & K-1 \end{pmatrix} \left\{ (J, 1) \right\} X D \cdot \right. \\
&\quad \left. \left. \cdot \left( B_{\sigma_0}^{(m-1, K+1)} \cdot A^{(n-1, J+1)} \right)_p^L \cdot \theta(n-J) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - (m-K)J \frac{\sqrt{2J+1}}{\sqrt{5}} \sum_X \sqrt{2X+1} \begin{pmatrix} L & K & J \\ 1 & J-1 & K-1 \end{pmatrix} \left\{ (K, 1) \right\} X D \cdot \right. \\
&\quad \left. \left. \cdot \left( B_{\sigma_0}^{(m-1, K+1)} \cdot A^{(n-1, J+1)} \right)_p^L \cdot \theta(m-K) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - (n-J)(m-K) \frac{1}{5} \sum_{X, Y} \sqrt{(2X+1)(2Y+1)} \begin{pmatrix} L & K & J \\ 1 & X & Y \end{pmatrix} \left\{ (K, 1) \right\} Y D \cdot \right. \\
&\quad \left. \left. \cdot \left\{ (J, 1) \right\} X D \left( B_{\sigma_0}^{(m-1, K+1)} \cdot A^{(n-1, J+1)} \right)_p^L \cdot \theta(n-J) \cdot \theta(m-K) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - 42 \right. \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -JK \sqrt{(2J+1)(2K+1)} \begin{pmatrix} L & K & J \\ 1 & J-1 & K-1 \end{pmatrix} \left[ 1 + \frac{n-J}{2J+1} \theta(n-J) + \frac{m-K}{2K+1} \theta(m-K) \right] \\
&\quad + \frac{(n-J)(m-K)}{(2J+1)(2K+1)} \theta(n-J) \theta(m-K) \left[ B_{\sigma_0}^{(m-1, K+1)} \cdot A^{(n-1, J+1)} \right]_p^L \\
&\quad - (n-J)K \frac{\sqrt{(2J+1)(2K+1)}}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} L & K & J \\ 1 & J-1 & K-1 \end{pmatrix} \left[ 1 + \frac{m-K}{2K+1} \theta(m-K) \right] \cdot \\
&\quad \cdot \theta(n-J) \left( B_{\sigma_0}^{(m-1, K+1)} \cdot A^{(n-1, J+1)} \right)_p^L \\
&\quad - (m-K)J \frac{\sqrt{(2K+1)(2J+1)}}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} L & K & J \\ 1 & J-1 & K-1 \end{pmatrix} \left[ 1 + \frac{n-J}{2J+1} \theta(n-J) \right] \cdot \\
&\quad \cdot \theta(m-K) \left( B_{\sigma_0}^{(m-1, K+1)} \cdot A^{(n-1, J+1)} \right)_p^L \\
&\quad - (n-J)(m-K) \frac{\sqrt{(2J+1)(2K+1)}}{5} \begin{pmatrix} L & K & J \\ 1 & J-1 & K-1 \end{pmatrix} \theta(n-J) \theta(m-K) \cdot \\
&\quad \cdot \left( B_{\sigma_0}^{(m-1, K+1)} \cdot A^{(n-1, J+1)} \right)_p^L
\end{aligned}$$

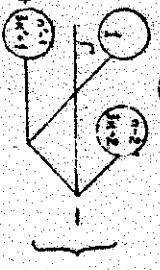
Введенная функция

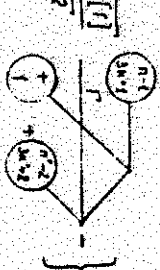
$$\theta(d) = \begin{cases} 1 & \text{при } d > 0 \\ 0 & \text{при } d \leq 0 \end{cases}$$

При приведении к  $N$ -члену операторов типа  $F$  предиссоединение изображений спириальной матрицы из-за того, что связанные операторов типа  $E$  происходят только относительно той же группы, но не относительно группы вращений. Поэтому в отличие от операторов типа  $F$  после соединения концов графика, соответствующих спириальной, учитывать граф на  $(-1)$  не нужно. В качестве примера мы проведем расчет всех одночленных спириальных для одного случая.

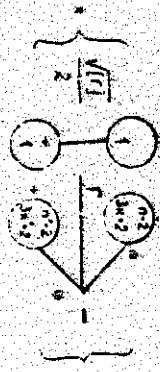
$$[A^{n(3k+2, \epsilon)} \times A^{n(3k^2+2, \epsilon)}] \Gamma^{\epsilon} =$$

$$= (3k+2)(3k^2+2) \left\{ 2[\Gamma]^{1/2} \right\}$$


$$+ \theta(n-3k-2)[n-(3k+2)](3k+2) \left\{ \frac{\sqrt{2}[\Gamma]}{\sqrt{2}} \right\}$$


$$+ \theta(n-3k-2)(3k+2)[n-(3k+2)] \left\{ \frac{\sqrt{2}[\Gamma]}{\sqrt{2}} \right\}$$


$$+ \theta(n-3k-2)\theta(n^2-3k^2) [n-(3k+2)] [n^2-(3k^2+2)] \cdot$$



$$= (3k+2)(3k^2+2) \left\{ (1-\delta_{\epsilon, \Gamma}) [A^{n^2(n^2-3k^2, \epsilon)} \cdot A^{n^2(n^2-3k^2, \epsilon)}] \Gamma^{\epsilon} \right\}$$

$$+ (n-3k-2)(3k^2+2) \left\{ \sum_X \sqrt{|X|} (-)^X \begin{Bmatrix} \epsilon & \epsilon & \epsilon \\ X & \Gamma & \epsilon \end{Bmatrix} \theta(n-3k-2) \cdot \right.$$

$$\left. [A^{n^2(n^2-3k^2, \epsilon)} \cdot (A^{n^2(3k^2+2, \epsilon)} \cdot A^{n^2(3k^2, \epsilon)})^X] \Gamma^{\epsilon} \right\}$$

$$+ (n-3k-2)(3k+2) \left\{ \sum_X \sqrt{|X|} (-)^X \begin{Bmatrix} \epsilon & \epsilon & \epsilon \\ X & \Gamma & \epsilon \end{Bmatrix} \theta(n^2-3k^2-2) \cdot \right.$$

$$\left. [A^{n^2(3k^2+2, \epsilon)} \cdot A^{n^2(1, \epsilon)}]^X \cdot A^{n^2(3k^2, \epsilon)} \right] \Gamma^{\epsilon} \left. \right\}$$

$$+ (n-3k-2)(n-3k-2) \left\{ \sum_{X, Y} \frac{\sqrt{|X||Y|}}{2} (-)^X \begin{Bmatrix} X & \epsilon & \epsilon \\ \epsilon & \Gamma & Y \end{Bmatrix} \theta(n-3k-2) \theta(n^2-3k^2-2) \cdot \right.$$

$$\left. [A^{n^2(3k^2+2, \epsilon)} \cdot A^{n^2(1, \epsilon)}]^X \cdot (A^{n^2(3k^2, \epsilon)} \cdot A^{n^2(1, \epsilon)})^Y \cdot A^{n^2(1, \epsilon)} \right] \Gamma^{\epsilon} \left. \right\}$$

Полученное выражение можно преобразовать дальше. Для этого необходимо выразить тензорные произведения операторов через стандартные операторы, воспользовавшись соответствующим приведением, выданным в 38.

# §11. ПРАВИТЕЛЬНЫЕ ОПЕРАТОРЫ В РАЗЛИЧНЫХ СИСТЕМАХ КООРДИНАТ.

Для расчета квантовой структуры в спектрах правильных операторов необходимо преобразовывать непрямые тензорные операторы из одной системы координат в другую, связанную с исходной посредством ортогонального преобразования.

Укажем прежде всего явный вид тензорных операторов, под-носиметричных относительно октаэдрической группы, в систе-мах координат, для которых ось Z совпадает с одной из осей симметрии.

$$T_{A_1}^{(4)}(z=c_4) = (\sqrt{21}/6) T_0^{(4)} + (\sqrt{30}/12) ( T_4^{(4)} + T_{-4}^{(4)} )$$

$$T_{A_1}^{(6)}(z=c_4) = -(\sqrt{2}/4) T_0^{(6)} + (\sqrt{7}/4) ( T_4^{(6)} + T_{-4}^{(6)} )$$

$$T_{A_1}^{(8)}(z=c_4) = (\sqrt{33}/8) T_0^{(8)} + (\sqrt{42}/24) ( T_4^{(8)} + T_{-4}^{(8)} ) + (\sqrt{390}/48) ( T_8^{(8)} + T_{-8}^{(8)} )$$

$$T_{A_1}^{(10)}(z=c_4) = (\sqrt{390}/48) T_0^{(10)} + (\sqrt{11}/8) ( T_4^{(10)} + T_{-4}^{(10)} ) - (\sqrt{561}/48) ( T_8^{(10)} + T_{-8}^{(10)} )$$

$$T_{B_1}^{(4)}(z=c_3) = -(\sqrt{21}/9) T_0^{(4)} + (\sqrt{30}/9) ( T_3^{(4)} - T_{-3}^{(4)} )$$

$$T_{B_1}^{(6)}(z=c_3) = -(\sqrt{42}/9) T_0^{(6)} - (\sqrt{105}/27) ( T_3^{(6)} + T_{-3}^{(6)} ) - (\sqrt{462}/54) ( T_6^{(6)} + T_{-6}^{(6)} )$$

$$T_{B_1}^{(8)}(z=c_3) = (\sqrt{33}/21) T_0^{(8)} - (2\sqrt{35}/27) ( T_3^{(8)} - T_{-3}^{(8)} ) + (4\sqrt{13}/27) ( T_6^{(8)} + T_{-6}^{(8)} )$$

$$T_{A_1}^{(10)}(z=c_3) = -(67\sqrt{390}/2592) T_0^{(10)} + \dots$$

$$T_{A_1}^{(4)}(z=c_2) = -(\sqrt{21}/24) T_0^{(4)} + (\sqrt{210}/24) ( T_2^{(4)} + T_{-2}^{(4)} ) + (\sqrt{30}/16) ( T_4^{(4)} + T_{-4}^{(4)} )$$

$$T_{A_1}^{(6)}(z=c_2) = (13\sqrt{2}/32) T_0^{(6)} + (\sqrt{210}/64) ( T_2^{(6)} + T_{-2}^{(6)} ) - (5\sqrt{7}/32) ( T_4^{(6)} + T_{-4}^{(6)} ) + (\sqrt{462}/64) ( T_6^{(6)} + T_{-6}^{(6)} )$$

$$T_{A_1}^{(8)}(z=c_2) = (9\sqrt{33}/128) T_0^{(8)} - (\sqrt{1155}/192) ( T_2^{(8)} + T_{-2}^{(8)} ) + (25\sqrt{42}/384) ( T_4^{(8)} + T_{-4}^{(8)} ) + (7\sqrt{13}/64) ( T_6^{(8)} + T_{-6}^{(8)} ) + (3\sqrt{330}/256) ( T_8^{(8)} + T_{-8}^{(8)} )$$

$$T_{A_1}^{(10)}(z=c_2) = -(\sqrt{390}/1536) T_0^{(10)} + \dots$$

Обширный закон преобразования компонент тензорных операторов, заданных в стандартном базисе хорошо известен:

$$T_m^\ell(J) = \sum_{m'=\ell}^{\ell} D_{m'm}^{(\ell)}(\alpha, \beta, \gamma) T_{m'}^\ell(J') \quad (11-1)$$

Здесь  $\alpha, \beta, \gamma$  — углы Эйлера. Однако в большинстве случаев оказывается достаточным преобразовать оператор к новой системе осей с фиксированным направлением вдоль оси Z, характеризуемой двумя сферическими углами  $\theta, \varphi$ . В этом случае соответствующие углы Эйлера определяются соотношениями  $\alpha = \varphi, \beta = \theta, \gamma = 0$ . При этом формулу (11-1) можно переписать в виде

$$T_{im}^\ell(J) = e^{im\varphi} \sum_{m'=\ell}^{\ell} T_{m'}^\ell(J') (-)^{m-m'} d_{m'm}^{\ell}(\theta) \quad (11-2)$$

Явные выражения этой формулы при значениях  $\ell$  от 1 до 7 были даны в работе [18]. В данном параграфе приведены аналогичные формулы для  $\ell = 8$ . Таблица 2/



В общем случае для более простого расчета функций удобно использовать следующую общую формулу

$$d_{(\ell-k) \pm 1m}^{(\ell)}(\theta) = \frac{(-1)^{\ell \pm 1m}}{2^\ell} \frac{\sqrt{(\ell-k)!}}{\sqrt{(\ell-m)! (\ell-m)!}} (d_{\ell n} \theta)^{\ell-k-1m} \quad (11-3)$$

$$\cdot (1 \pm \cos \theta)^{1m} \sum_{n=0}^k C_{(\ell-k), n}(\ell \pm 1m) \cos^n \theta$$

Коэффициенты  $C_{(\ell-k), n}(\ell \pm 1m)$  сведены в таблицу I, где

$$B_5 = (\ell-4+1m)_5 - 5(\ell-4+1m)_4 (\ell-1m)_1 + 10(\ell-4+1m)_3 (\ell-1m)_2 - 10(\ell-4+1m)_2 (\ell-1m)_3 + 5(\ell-4+1m)_1 (\ell-1m)_4 - (\ell-1m)_5;$$

в общем случае

$$B_k = \sum_{s=0}^k (-1)^s \frac{k! s!}{k! s!} (\ell+1m-k+s)_{k-s} (\ell-1m)_s;$$

$$Q_n = a(a+1) \dots (a+n-1); \quad a_0 = 1$$

Таблица I легко обобщается. Достаточно заметить, что коэффициенты  $C_{(\ell-k), n}(\ell \pm 1m)$  закономерно связаны вдоль каждой диагонали таблицы I,

$$C_{(\ell-k+n), n} = (-1)^n B_k \frac{(k+n)!}{k! n!} (2\ell-k+s)_n$$

$1-k$	$0$	$1$	$2$	$3$
1	+1			
1-1	$\pm 2 m $	-21		
1-2	$\pm 2(2m^2-1)$	$\pm 4 m (21-1)_2$	$+(21-1)_2$	
1-3	$\pm 4 m (2m^2-31+1)$	$-6(2m^2-1)(21-2)$	$\pm 6 m (21-2)_2$	$-(21-2)_3$
1-4	$\pm 4[4m^2(m^2-31+2) + 31(1-1)]$	$\pm 16 m (2m^2-31+1) \cdot (21-3)$	$\pm 12(2m^2-1)(21-3)_2$	$\pm 8 m (21-3)_3$
1-5	$\pm B_5$	$-20[4m^2(m^2-31+2) + 31(1-1)](21-4)$	$\pm 40 m (2m^2-31+1) \cdot (21-4)_2$	$-20(2m^2-1)(21-4)_3$
1-6	$\pm B_6$	$\pm B_5(21-5)$	$\pm 60[4m^2(m^2-31+2) + 31(1-1)](21-5)_2$	$\pm 80 m (2m^2-31+1) (21-5)_3$
1-7	$\pm B_7$	$-7B_6(21-6)$	$\pm 21B_5(21-6)_2$	$-140[4m^2(m^2-31+2) + 31(1-1)](21-6)_3$
1-8	$\pm B_8$	$\pm 8B_7(21-7)$	$\pm 28B_6(21-7)_2$	$\pm 56B_5(21-7)_3$

$l-k$	4	5	6	7	8
1-4	$+(21-3)_4$				
1-5	$\pm 10  m  (21-4)_4$	$-(21-4)_5$			
1-6	$+30(2m^2-1)(21-5)_4$	$-12  m  (21-5)_5$	$+(21-5)_6$		
1-7	$\pm 140  m  (2m^2-31+1) \cdot (21-6)_4$	$\pm 2(2m^2-1)(21-6)_5$	$\pm 14  m  (21-6)_6$	$-(21-6)_7$	
1-8	$+280 [4m^2(m^2-31+2) + 31(1-1)] (21-7)_4$	$\mp 224  m  (2m^2-31+1) \cdot (21-7)_5$	$+56(2m^2-1)(21-7)_6$	$\mp 16  m  (21-7)_7$	$+(21-7)_8$

Таблица I. Коэффициенты  $C_{(l,k),n}(l, \pm im)$ , определяемые выражением (11-3).  
 (продолжение предыдущей странице)

Таблица II. Преобразование операторов ринга 8.

$$\begin{aligned}
 T_{\theta}^8(J) = & \left\{ + \frac{1}{12c} (+6435 \cos^8 \theta - 12012 \cos^6 \theta + 6930 \cos^4 \theta - 1260 \cos^2 \theta + 35) T_0^8(J') + \right. \\
 & + \frac{2\sqrt{3}}{64} \sin \theta \cos \theta (+715 \cos^6 \theta - 1201 \cos^4 \theta + 385 \cos^2 \theta - 35) [T_{+1}^8(J') - T_{-1}^8(J')] + \\
 & + \frac{2\sqrt{15}}{64} \sin^2 \theta (+143 \cos^6 \theta - 143 \cos^4 \theta + 33 \cos^2 \theta - 1) [T_{+2}^8(J') + T_{-2}^8(J')] + \\
 & + \frac{\sqrt{2310}}{64} \sin^3 \theta \cos \theta (+39 \cos^4 \theta - 26 \cos^2 \theta + 3) [T_{+3}^8(J') - T_{-3}^8(J')] + \\
 & + \frac{2\sqrt{154}}{128} \sin^4 \theta (+65 \cos^4 \theta - 26 \cos^2 \theta + 1) [T_{+4}^8(J') + T_{-4}^8(J')] + \\
 & + \frac{2\sqrt{2002}}{64} \sin^5 \theta \cos \theta (+5 \cos^2 \theta - 1) [T_{+5}^8(J') - T_{-5}^8(J')] + \\
 & + \frac{\sqrt{429}}{64} \sin^6 \theta (+15 \cos^2 \theta - 1) [T_{+6}^8(J') + T_{-6}^8(J')] + \\
 & + \frac{3\sqrt{1430}}{64} \sin^7 \theta \cos \theta [T_{+7}^8(J') - T_{-7}^8(J')] + \\
 & \left. + \frac{3\sqrt{1430}}{236} \sin^8 \theta [T_{+8}^8(J') + T_{-8}^8(J')] \right\} .
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T_{\pm 1}^8(J) = e^{\pm i\phi} \left\{ & \mp \frac{3\sqrt{2}}{64} \sin^6 \cos \theta (+715 \cos^6 \theta - 1001 \cos^4 \theta + 385 \cos^2 \theta - 35) T_0^8(J') + \right. \\
& + \frac{1}{128} [(1 \pm \cos \theta)(5720 \cos^7 \theta \mp 5005 \cos^6 \theta - 6006 \cos^5 \theta + 5005 \cos^4 \theta + 1540 \cos^3 \theta \mp 1155 \cos^2 \theta - 70 \cos \theta + 35) T_1^8 \\
& \quad + (1 \mp \cos \theta)(5720 \cos^7 \theta + 5005 \cos^6 \theta - 6006 \cos^5 \theta + 5005 \cos^4 \theta + 1540 \cos^3 \theta + 1155 \cos^2 \theta - 70 \cos \theta + 35) T_{-1}^8 \\
& + \frac{\sqrt{70}}{128} \sin \theta [(1 \pm \cos \theta)(+572 \cos^6 \theta \mp 429 \cos^5 \theta - 429 \cos^4 \theta + 286 \cos^3 \theta + 66 \cos^2 \theta \mp 33 \cos \theta - 1) T_{+2}^8(J') \\
& \quad - (1 \mp \cos \theta)(+572 \cos^6 \theta + 429 \cos^5 \theta - 429 \cos^4 \theta + 286 \cos^3 \theta + 66 \cos^2 \theta + 33 \cos \theta - 1) T_{-2}^8(J')] \\
& + \frac{\sqrt{1155}}{128} \sin^2 \theta [(1 \pm \cos \theta)(+104 \cos^5 \theta \mp 65 \cos^4 \theta - 52 \cos^3 \theta + 26 \cos^2 \theta + 4 \cos \theta - 1) T_{+3}^8(J') \\
& \quad + (1 \mp \cos \theta)(+104 \cos^5 \theta + 65 \cos^4 \theta - 52 \cos^3 \theta + 26 \cos^2 \theta + 4 \cos \theta + 1) T_{-3}^8(J')] \\
& + \frac{\sqrt{77}}{64} \sin^3 \theta [(1 \pm \cos \theta)(+130 \cos^4 \theta \mp 65 \cos^3 \theta - 39 \cos^2 \theta + 13 \cos \theta + 1) T_{+4}^8(J') \\
& \quad - (1 \mp \cos \theta)(+130 \cos^4 \theta + 65 \cos^3 \theta - 39 \cos^2 \theta + 13 \cos \theta + 1) T_{-4}^8(J')] \\
& + \frac{\sqrt{1001}}{128} \sin^4 \theta [(1 \pm \cos \theta)(+40 \cos^3 \theta \mp 15 \cos^2 \theta - 6 \cos \theta + 1) T_{+5}^8(J') \\
& \quad + (1 \mp \cos \theta)(+40 \cos^3 \theta + 15 \cos^2 \theta - 6 \cos \theta - 1) T_{-5}^8(J')] \\
& + \frac{\sqrt{358}}{128} \sin^5 \theta [(1 \pm \cos \theta)(+20 \cos^2 \theta \mp 5 \cos \theta - 1) T_{+6}^8(J') - (1 \mp \cos \theta)(+20 \cos^2 \theta + 5 \cos \theta - 1) T_{-6}^8(J')] \\
& + \frac{\sqrt{715}}{128} \sin^6 \theta [(1 \pm \cos \theta)(+6 \cos \theta - 1) T_{+7}^8(J') + (1 \mp \cos \theta)(+8 \cos \theta + 1) T_{-7}^8(J')] \\
& + \frac{\sqrt{715}}{128} \sin^7 \theta [(1 \pm \cos \theta) T_{+8}^8(J') - (1 \mp \cos \theta) T_{-8}^8(J')] \left. \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T_{\pm 2}^8(J) = e^{\pm 2i\phi} \left\{ & + \frac{3\sqrt{5}}{64} \sin^2 \theta (+143 \cos^6 \theta - 143 \cos^4 \theta + 33 \cos^2 \theta - 1) T_0^8(J') \right. \\
& + \frac{\sqrt{70}}{128} \sin \theta [(1 \pm \cos \theta)(+572 \cos^6 \theta \mp 429 \cos^5 \theta - 429 \cos^4 \theta + 286 \cos^3 \theta + 66 \cos^2 \theta \mp 33 \cos \theta - 1) T_{+1}^8(J') \\
& \quad + (1 \mp \cos \theta)(+572 \cos^6 \theta + 429 \cos^5 \theta - 429 \cos^4 \theta + 286 \cos^3 \theta + 66 \cos^2 \theta + 33 \cos \theta - 1) T_{-1}^8(J')] \\
& + \frac{1}{64} [(1 \pm \cos \theta)^2 (+2002 \cos^6 \theta \mp 3003 \cos^5 \theta + 1430 \cos^3 \theta - 330 \cos^2 \theta \mp 99 \cos \theta + 16) T_{+2}^8(J') \\
& \quad + (1 \mp \cos \theta)^2 (+2002 \cos^6 \theta + 3003 \cos^5 \theta + 1430 \cos^3 \theta - 330 \cos^2 \theta + 99 \cos \theta + 16) T_{-2}^8(J')] \\
& + \frac{\sqrt{66}}{128} \sin \theta [(1 \pm \cos \theta)^2 (+364 \cos^5 \theta \mp 455 \cos^4 \theta + 130 \cos^2 \theta - 20 \cos \theta - 3) T_{+3}^8(J') \\
& \quad - (1 \mp \cos \theta)^2 (+364 \cos^5 \theta + 455 \cos^4 \theta - 130 \cos^2 \theta - 20 \cos \theta + 3) T_{-3}^8(J')] \\
& + \frac{\sqrt{110}}{64} \sin^2 \theta [(1 \pm \cos \theta)^2 (+91 \cos^4 \theta \mp 91 \cos^3 \theta + 13 \cos \theta - 1) T_{+4}^8(J') \\
& \quad + (1 \mp \cos \theta)^2 (+91 \cos^4 \theta + 91 \cos^3 \theta - 13 \cos \theta - 1) T_{-4}^8(J')] \\
& + \frac{\sqrt{1430}}{128} \sin^3 \theta [(1 \pm \cos \theta)^2 (+28 \cos^3 \theta \mp 21 \cos^2 \theta + 1) T_{+5}^8(J') \\
& \quad - (1 \mp \cos \theta)^2 (+28 \cos^3 \theta + 21 \cos^2 \theta - 1) T_{-5}^8(J')] \\
& + \frac{\sqrt{1501}}{64} \sin^4 \theta \cos \theta [(1 \pm \cos \theta)^2 (+2 \cos \theta - 1) T_{+6}^8(J') + (1 \mp \cos \theta)^2 (+2 \cos \theta + 1) T_{-6}^8(J')] \\
& + \frac{\sqrt{2002}}{128} \sin^5 \theta [(1 \pm \cos \theta)^2 (+4 \cos \theta - 1) T_{+7}^8(J') - (1 \mp \cos \theta)^2 (+4 \cos \theta + 1) T_{-7}^8(J')] \\
& + \frac{\sqrt{2002}}{128} \sin^6 \theta [(1 \pm \cos \theta)^2 T_{+8}^8(J') + (1 \mp \cos \theta)^2 T_{-8}^8(J')] \left. \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T_{+3}^8(J) = e^{\pm 3i\phi} & \left\{ \mp \frac{\sqrt{2310}}{64} \sin^3 \theta \cos \theta (+39 \cos^4 \theta - 26 \cos^2 \theta + 3) T_0^8(J') \right. \\
& + \frac{\sqrt{1155}}{128} \sin^2 \theta \left[ (+1 + \cos \theta)(+104 \cos^5 \theta - 65 \cos^4 \theta - 52 \cos^3 \theta + 26 \cos^2 \theta + 4 \cos \theta + 1) T_{+1}^8(J') \right. \\
& \quad \left. + (1 - \cos \theta)(+104 \cos^5 \theta + 65 \cos^4 \theta - 52 \cos^3 \theta - 26 \cos^2 \theta + 4 \cos \theta + 1) T_{-1}^8(J') \right] \\
& + \frac{\sqrt{66}}{128} \sin \theta \left[ (+1 + \cos \theta)^2 (+364 \cos^5 \theta - 455 \cos^4 \theta + 130 \cos^3 \theta - 20 \cos \theta + 3) T_{+2}^8(J') \right. \\
& \quad \left. + (1 - \cos \theta)^2 (+364 \cos^5 \theta + 455 \cos^4 \theta - 130 \cos^3 \theta - 20 \cos \theta + 3) T_{-2}^8(J') \right] \\
& + \frac{1}{128} \left[ (+1 + \cos \theta)^3 (+2184 \cos^5 \theta - 4095 \cos^4 \theta + 1820 \cos^3 \theta + 390 \cos^2 \theta - 300 \cos \theta + 17) T_{+3}^8(J') \right. \\
& \quad \left. + (1 - \cos \theta)^3 (+2184 \cos^5 \theta + 4095 \cos^4 \theta + 1820 \cos^3 \theta - 390 \cos^2 \theta - 300 \cos \theta + 17) T_{-3}^8(J') \right] \\
& + \frac{\sqrt{45}}{64} \sin \theta \left[ (+1 + \cos \theta)^3 (+182 \cos^4 \theta - 273 \cos^3 \theta + 91 \cos^2 \theta + 13 \cos \theta - 5) T_{+4}^8(J') \right. \\
& \quad \left. - (1 - \cos \theta)^3 (+182 \cos^4 \theta + 273 \cos^3 \theta + 91 \cos^2 \theta + 13 \cos \theta - 5) T_{-4}^8(J') \right] \\
& + \frac{\sqrt{195}}{128} \sin^2 \theta \left[ (+1 + \cos \theta)^3 (+56 \cos^3 \theta + 63 \cos^2 \theta + 14 \cos \theta + 1) T_{+5}^8(J') \right. \\
& \quad \left. + (1 - \cos \theta)^3 (+56 \cos^3 \theta + 63 \cos^2 \theta + 14 \cos \theta + 1) T_{-5}^8(J') \right] \\
& + \frac{\sqrt{910}}{128} \sin^3 \theta \left[ (+1 + \cos \theta)^3 (+12 \cos^2 \theta + 9 \cos \theta + 1) T_{+6}^8(J') \right. \\
& \quad \left. - (1 - \cos \theta)^3 (+12 \cos^2 \theta + 9 \cos \theta + 1) T_{-6}^8(J') \right] \\
& + \frac{\sqrt{273}}{128} \sin^4 \theta \left[ (+1 + \cos \theta)^3 (+8 \cos \theta + 3) T_{+7}^8(J') + (1 - \cos \theta)^3 (+8 \cos \theta + 3) T_{-7}^8(J') \right] \\
& \left. + \frac{\sqrt{273}}{64} \sin^5 \theta \left[ (+1 + \cos \theta)^3 T_{+8}^8(J') - (1 - \cos \theta)^3 T_{-8}^8(J') \right] \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T_{+4}^8(J) = e^{\pm 4i\phi} & \left\{ + \frac{3\sqrt{154}}{128} \sin^4 \theta (+65 \cos^4 \theta - 26 \cos^2 \theta + 1) T_0^8(J') \right. \\
& + \frac{\sqrt{77}}{64} \sin^3 \theta \left[ (+1 + \cos \theta)(+130 \cos^4 \theta - 65 \cos^3 \theta - 39 \cos^2 \theta + 13 \cos \theta + 1) T_{+1}^8(J') \right. \\
& \quad \left. + (1 - \cos \theta)(+130 \cos^4 \theta + 65 \cos^3 \theta - 39 \cos^2 \theta + 13 \cos \theta + 1) T_{-1}^8(J') \right] \\
& + \frac{\sqrt{110}}{64} \sin^2 \theta \left[ (+1 + \cos \theta)^2 (91 \cos^4 \theta - 91 \cos^3 \theta + 13 \cos \theta - 1) T_{+2}^8(J') \right. \\
& \quad \left. + (1 - \cos \theta)^2 (+91 \cos^4 \theta + 91 \cos^3 \theta - 13 \cos \theta - 1) T_{-2}^8(J') \right] \\
& + \frac{\sqrt{15}}{64} \sin \theta \left[ (+1 + \cos \theta)^3 (+182 \cos^4 \theta - 273 \cos^3 \theta + 91 \cos^2 \theta + 13 \cos \theta - 5) T_{+3}^8(J') \right. \\
& \quad \left. + (1 - \cos \theta)^3 (+182 \cos^4 \theta + 273 \cos^3 \theta + 91 \cos^2 \theta - 13 \cos \theta - 5) T_{-3}^8(J') \right] \\
& + \frac{1}{64} \left[ (+1 + \cos \theta)^4 (+455 \cos^4 \theta - 910 \cos^3 \theta + 546 \cos^2 \theta - 78 \cos \theta - 9) T_{+4}^8(J') \right. \\
& \quad \left. + (1 - \cos \theta)^4 (+455 \cos^4 \theta + 910 \cos^3 \theta + 546 \cos^2 \theta + 78 \cos \theta - 9) T_{-4}^8(J') \right] \\
& + \frac{\sqrt{11}}{64} \sin^2 \theta \left[ (+1 + \cos \theta)^4 (+70 \cos^3 \theta - 105 \cos^2 \theta + 42 \cos \theta + 3) T_{+5}^8(J') \right. \\
& \quad \left. - (1 - \cos \theta)^4 (+70 \cos^3 \theta + 105 \cos^2 \theta + 42 \cos \theta + 3) T_{-5}^8(J') \right] \\
& + \frac{\sqrt{546}}{64} \sin^3 \theta \left[ (+1 + \cos \theta)^4 (+5 \cos^2 \theta - 5 \cos \theta + 1) T_{+6}^8(J') \right. \\
& \quad \left. + (1 - \cos \theta)^4 (+5 \cos^2 \theta + 5 \cos \theta + 1) T_{-6}^8(J') \right] \\
& + \frac{\sqrt{452}}{64} \sin^3 \theta \left[ (+1 + \cos \theta)^4 (+2 \cos \theta + 1) T_{+7}^8(J') - (1 - \cos \theta)^4 (+2 \cos \theta + 1) T_{-7}^8(J') \right] \\
& \left. + \frac{\sqrt{455}}{128} \sin^4 \theta \left[ (+1 + \cos \theta)^4 T_{+8}^8(J') + (1 - \cos \theta)^4 T_{-8}^8(J') \right] \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T_{\pm 5}^8(J) &= e^{\pm 5i\theta} \left\{ \mp \frac{3\sqrt{2002}}{64} \sin^3 \theta \cos \theta (+5 \cos^2 \theta - 1) T_0^8(J') \right. \\
&+ \frac{\sqrt{1001}}{128} \sin^4 \theta \left[ +(1 \pm \cos \theta)(+20 \cos^2 \theta \mp 15 \cos^2 \theta - 6 \cos \theta \pm 1) T_{+1}^8(J') \right. \\
&\quad \left. \left. + (1 \mp \cos \theta)(+20 \cos^2 \theta \mp 15 \cos^2 \theta - 6 \cos \theta \mp 1) T_{-1}^8(J') \right] \right. \\
&\mp \frac{\sqrt{1430}}{128} \sin^3 \theta \left[ +(1 \pm \cos \theta)^2 (+28 \cos^2 \theta \mp 21 \cos^2 \theta \pm 1) T_{+2}^8(J') \right. \\
&\quad \left. + (1 \mp \cos \theta)^2 (+28 \cos^2 \theta \mp 21 \cos^2 \theta \mp 1) T_{-2}^8(J') \right] \\
&+ \frac{\sqrt{195}}{128} \sin^2 \theta \left[ +(1 \pm \cos \theta)^3 (+56 \cos^2 \theta \mp 63 \cos^2 \theta + 14 \cos \theta \pm 1) T_{+3}^8(J') \right. \\
&\quad \left. + (1 \mp \cos \theta)^3 (+56 \cos^2 \theta \mp 63 \cos^2 \theta + 14 \cos \theta \mp 1) T_{-3}^8(J') \right] \\
&\mp \frac{\sqrt{43}}{64} \sin \theta \left[ +(1 \pm \cos \theta)^4 (+70 \cos^2 \theta \mp 105 \cos^2 \theta + 42 \cos \theta \mp 3) T_{+4}^8(J') \right. \\
&\quad \left. + (1 \mp \cos \theta)^4 (+70 \cos^2 \theta \mp 105 \cos^2 \theta + 42 \cos \theta \pm 3) T_{-4}^8(J') \right] \\
&+ \frac{1}{128} \left[ +(1 \pm \cos \theta)^5 (+280 \cos^2 \theta \mp 525 \cos^2 \theta + 294 \cos \theta \mp 45) T_{+5}^8(J') \right. \\
&\quad \left. + (1 \mp \cos \theta)^5 (+280 \cos^2 \theta \mp 525 \cos^2 \theta + 294 \cos \theta \pm 45) T_{-5}^8(J') \right] \\
&+ \frac{\sqrt{42}}{128} \sin \theta \left[ +(1 \pm \cos \theta)^5 (+20 \cos^2 \theta \mp 25 \cos \theta + 7) T_{+6}^8(J') - (1 \mp \cos \theta)^5 (+20 \cos^2 \theta \mp 25 \cos \theta + 7) T_{-6}^8(J') \right] \\
&+ \frac{\sqrt{35}}{128} \sin^2 \theta \left[ +(1 \pm \cos \theta)^5 (+\cos \theta \mp 5) T_{+7}^8(J') + (1 \mp \cos \theta)^5 (+8 \cos \theta \mp 5) T_{-7}^8(J') \right] \\
&+ \frac{\sqrt{35}}{64} \sin^3 \theta \left[ +(1 \pm \cos \theta)^5 T_{+8}^8(J') - (1 \mp \cos \theta)^5 T_{-8}^8(J') \right] \left. \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T_{\pm 6}^8(J) &= e^{\pm 6i\theta} \left\{ + \frac{429}{64} \sin^6 \theta (+15 \cos^2 \theta - 1) T_0^8(J') \right. \\
&\mp \frac{\sqrt{858}}{128} \sin^5 \theta \left[ (1 \pm \cos \theta)(+20 \cos^2 \theta \mp 15 \cos \theta - 1) T_{+1}^8(J') + (1 \mp \cos \theta)(+20 \cos^2 \theta \mp 15 \cos \theta - 1) T_{-1}^8(J') \right] \\
&+ \frac{\sqrt{15015}}{64} \sin^4 \theta \cos \theta \left[ +(1 \pm \cos \theta)^2 (+2 \cos \theta \mp 1) T_{+2}^8(J') + (1 \mp \cos \theta)^2 (+2 \cos \theta \mp 1) T_{-2}^8(J') \right] \\
&\mp \frac{\sqrt{910}}{128} \sin^3 \theta \left[ (1 \pm \cos \theta)^3 (+12 \cos^2 \theta \mp 9 \cos \theta + 1) T_{+3}^8(J') + (1 \mp \cos \theta)^3 (+12 \cos^2 \theta \mp 9 \cos \theta + 1) T_{-3}^8(J') \right] \\
&+ \frac{\sqrt{546}}{64} \sin^2 \theta \left[ +(1 \pm \cos \theta)^4 (+5 \cos^2 \theta \mp 5 \cos \theta + 1) T_{+4}^8(J') + (1 \mp \cos \theta)^4 (+5 \cos^2 \theta \mp 5 \cos \theta + 1) T_{-4}^8(J') \right] \\
&\mp \frac{\sqrt{42}}{128} \sin \theta \left[ +(1 \pm \cos \theta)^5 (+20 \cos^2 \theta \mp 25 \cos \theta + 7) T_{+5}^8(J') + (1 \mp \cos \theta)^5 (+20 \cos^2 \theta \mp 25 \cos \theta + 7) T_{-5}^8(J') \right] \\
&+ \frac{1}{64} \left[ +(1 \pm \cos \theta)^6 (+30 \cos^2 \theta \mp 45 \cos \theta + 16) T_{+6}^8(J') + (1 \mp \cos \theta)^6 (+30 \cos^2 \theta \mp 45 \cos \theta + 16) T_{-6}^8(J') \right] \\
&+ \frac{\sqrt{30}}{128} \sin \theta \left[ +(1 \pm \cos \theta)^6 (+4 \cos \theta \mp 3) T_{+7}^8(J') - (1 \mp \cos \theta)^6 (+4 \cos \theta \mp 3) T_{-7}^8(J') \right] \\
&+ \frac{\sqrt{30}}{128} \sin^2 \theta \left[ +(1 \pm \cos \theta)^6 T_{+8}^8(J') + (1 \mp \cos \theta)^6 T_{-8}^8(J') \right] \left. \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T_{\frac{7}{2}}^B(J) = & e^{\frac{+7i\theta}{2}} \left\{ + \frac{3\sqrt{1430}}{64} \sin^7 \theta \cos \theta T_0^B(J') \right. \\
& + \frac{\sqrt{715}}{128} \sin^6 \theta \left[ +(1+\cos \theta)(+8\cos \theta - 1) T_{+1}^B(J') + (1-\cos \theta)(+8\cos \theta + 1) T_{-1}^B(J') \right] \\
& + \frac{\sqrt{2002}}{128} \sin^5 \theta \left[ +(1+\cos \theta)^2(+4\cos \theta - 1) T_{+2}^B(J') + (1-\cos \theta)^2(+4\cos \theta + 1) T_{-2}^B(J') \right] \\
& + \frac{\sqrt{273}}{128} \sin^4 \theta \left[ +(1+\cos \theta)^3(+8\cos \theta - 3) T_{+3}^B(J') + (1-\cos \theta)^3(+8\cos \theta + 3) T_{-3}^B(J') \right] \\
& + \frac{\sqrt{455}}{64} \sin^3 \theta \left[ +(1+\cos \theta)^4(+2\cos \theta - 1) T_{+4}^B(J') + (1-\cos \theta)^4(+2\cos \theta + 1) T_{-4}^B(J') \right] \\
& + \frac{\sqrt{15}}{128} \sin^2 \theta \left[ +(1+\cos \theta)^5(+8\cos \theta - 5) T_{+5}^B(J') + (1-\cos \theta)^5(+8\cos \theta + 5) T_{-5}^B(J') \right] \\
& + \frac{\sqrt{30}}{128} \sin \theta \left[ +(1+\cos \theta)^6(+4\cos \theta - 3) T_{+6}^B(J') + (1-\cos \theta)^6(+4\cos \theta + 3) T_{-6}^B(J') \right] \\
& + \frac{1}{128} \left[ +(1+\cos \theta)^7(+8\cos \theta - 7) T_{+7}^B(J') + (1-\cos \theta)^7(+8\cos \theta + 7) T_{-7}^B(J') \right] \\
& \left. + \frac{1}{64} \sin \theta \left[ +(1+\cos \theta)^7 T_{+8}^B(J') - (1-\cos \theta)^7 T_{-8}^B(J') \right] \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T_{\frac{8}{2}}(J) = & e^{\frac{+8i\theta}{2}} \left\{ + \frac{3\sqrt{1430}}{256} \sin^8 \theta T_0^B(J') \right. \\
& + \frac{\sqrt{715}}{64} \sin^7 \theta \left[ +(1+\cos \theta) T_{+1}^B(J') + (1-\cos \theta) T_{-1}^B(J') \right] \\
& + \frac{\sqrt{2002}}{128} \sin^6 \theta \left[ +(1+\cos \theta)^2 T_{+2}^B(J') + (1-\cos \theta)^2 T_{-2}^B(J') \right] \\
& + \frac{\sqrt{273}}{64} \sin^5 \theta \left[ +(1+\cos \theta)^3 T_{+3}^B(J') + (1-\cos \theta)^3 T_{-3}^B(J') \right] \\
& + \frac{\sqrt{455}}{128} \sin^4 \theta \left[ +(1+\cos \theta)^4 T_{+4}^B(J') + (1-\cos \theta)^4 T_{-4}^B(J') \right] \\
& + \frac{\sqrt{15}}{64} \sin^3 \theta \left[ +(1+\cos \theta)^5 T_{+5}^B(J') + (1-\cos \theta)^5 T_{-5}^B(J') \right] \\
& + \frac{\sqrt{30}}{128} \sin^2 \theta \left[ +(1+\cos \theta)^6 T_{+6}^B(J') + (1-\cos \theta)^6 T_{-6}^B(J') \right] \\
& + \frac{1}{64} \sin \theta \left[ +(1+\cos \theta)^7 T_{+7}^B(J') + (1-\cos \theta)^7 T_{-7}^B(J') \right] \\
& \left. + \frac{1}{256} \left[ +(1+\cos \theta)^8 T_{+8}^B(J') + (1-\cos \theta)^8 T_{-8}^B(J') \right] \right\}
\end{aligned}$$

§12. КОМПАКТНО-БРАУЭРТЕЛЬНЫЙ ГАМИЛЬТОНИАН.

В данном параграфе будут выписаны члены, входящие в координаты - матричные гамильтоны тетраэдрической молекулы  $AB_4$ . При этом на отрезке чисел  $\tau$  между первого порядка.

Первоначально в качестве канонических операторов будем использовать операторы формирования и испускае. Число связей выписан будем проводить только относительно точечной группы  $T_d$ . В соответствии с обозначениями обозначим:

- $P_1 \cdot q_1$  - оператор типа  $A_1$ .
- $P_2 \cdot q_2$  - оператор типа  $E$ .
- $P_3 \cdot q_3$  ( $\tau = 3, 4$ ) - оператор типа  $F_2$ .

Оператор типа гермоновский осциллятор и жесткий ротатор

$$\frac{1}{2} \{ (P_1 \cdot P_1)^{A_1} + (q_1 \cdot q_1)^{A_1} \}, (\tau = 1, 2, 3, 4);$$

$$R^{2(A_1, A_1)} = -\frac{2}{\sqrt{5}} J^2$$

Операторы пентродского исчисления / типа  $q_j^2$  /

$$\begin{aligned} & (q_1 \cdot R^{2(A_1, A_1)})^{A_1}, \\ & (q_2 \cdot R^{2(E, E)})^{A_1}, \\ & (q_3 \cdot R^{2(F_2, F_2)})^{A_1}, (\tau = 3, 4). \end{aligned}$$

Операторы нормального взаимодействия / типа  $qP_j$  /

$$\begin{aligned} & \{ [(q_2 \cdot P_2)^{E_2} \pm (q_1 \cdot P_2)^{E_2}] \cdot R^{(E_1, E_2)} \}^{A_1}, (\tau = 3, 4), \\ & \{ [(q_3 \cdot P_3)^{F_2} \pm (q_1 \cdot P_3)^{F_2}] \cdot R^{(E_1, F_2)} \}^{A_1}, \\ & \{ (q_2 \cdot P_2)^{E_2} \cdot R^{(E_1, E_2)} \}^{A_1}, (\tau = 3, 4) \\ & \{ (q_3 \cdot P_3)^{F_2} \cdot R^{(E_1, F_2)} \}^{A_1}, (\tau = 3, 4). \end{aligned}$$

Операторы ангармоничности / типа  $q^3$  /

$$\{ q_1 \cdot (q_2 \cdot q_3)^{A_1} \}^{A_1}, (\tau = 1, 2, 3, 4).$$

$$\begin{aligned} & \{ q_1 \cdot (q_2 \cdot q_3)^{A_1} \}^{A_1}, \\ & \{ q_2 \cdot (q_1 \cdot q_3)^{E_1} \}^{A_1}, \\ & \{ q_2 \cdot (q_1 \cdot q_3)^{E_1} \}^{A_1}, (\tau = 3, 4), \\ & \{ q_2 \cdot (q_3 \cdot q_1)^{E_1} \}^{A_1}, \\ & \{ q_1 \cdot (q_2 \cdot q_3)^{E_2} \}^{A_1}, (\tau = 3, 4), \\ & \{ q_2 \cdot (q_1 \cdot q_3)^{E_2} \}^{A_1}, \\ & \{ q_1 \cdot (q_2 \cdot q_3)^{E_2} \}^{A_1}. \end{aligned}$$

Операторы, зависящие через  $P$  и  $q$  тензора могут быть выписаны через операторы  $A$  и  $q^2$  в качестве примера укажем преобразование операторов из матрицы  $q_1$  -  $q_3$ . При этом тензорное взаимодействие операторов  $A$  и  $q^2$  будем проводить не только относительно точечной группы  $T_d$ , но и относительно группы вращения  $O_h$  и  $U_3$  (вспомогательная часть). Вспомогательная группа -  $U_3$ ,  $O_h$ ,  $T_d$ ,  $T_d$  (вспомогательная группа) -  $U_3$  по части I раздела.

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \{ (P_2 \cdot P_2)^{A_1} + (q_2 \cdot q_2)^{A_1} \} = \frac{1}{2} \{ (P_2 \cdot P_2)^{A_1} + (q_2 \cdot q_2)^{A_1} \} + \frac{1}{2} \{ (P_2 \cdot P_2)^{E_2} + (q_2 \cdot q_2)^{E_2} \} + \frac{1}{2} \{ (P_2 \cdot P_2)^{F_2} + (q_2 \cdot q_2)^{F_2} \} \\ & \{ q_1 \cdot R^{2(A_1, E_1)} \}^{A_1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ [q_1 \cdot q_1] \cdot R^{(A_1, E_1)} \}^{A_1}, \\ & \{ (q_3 \cdot P_3)^{F_2} \cdot R^{(E_1, F_2)} \}^{A_1} = \{ (q_3 \cdot q_3)^{F_2} \cdot R^{(E_1, F_2)} \}^{A_1}, \\ & \{ q_1 \cdot (q_2 \cdot q_3)^{A_1} \}^{A_1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ [q_1 \cdot (q_2 \cdot q_3)]^{A_1} \}^{A_1} - \\ & - \frac{1}{\sqrt{2}} \{ [q_1 \cdot (q_2 \cdot q_3)]^{E_1} \}^{A_1} - 2 \{ [q_1 \cdot (q_2 \cdot q_3)]^{E_2} \}^{A_1} + \sqrt{5} \{ [q_1 \cdot q_1] \}^{A_1} \end{aligned}$$

§13. ФОРМУЛЫ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ.

В части I данных лекций было рассмотрено применение теории возмущений к построению неформальных представлений операторов. Явно была рассмотрена проблема второго порядка по теории возмущений. В настоящее время будет дано краткое изложение формул, необходимых при расчете поправок третьего и четвертого порядков, при этом основное внимание будет уделено, конечно, при выводе результатов к стандартной канонической трансформации. Осьмы формулы теории возмущений сформулированы во многих рукописных /см. например, книгу [9]/.

Попробуем третьею нормаль теории возмущений для безродового Ленинского безродного взаимодействия в виде:

$$\sum_{k_1 k_2} \frac{\langle 0 | V | k_1 k_2 \rangle \langle k_1 k_2 | V | 0 \rangle \langle 0 | V | 0 \rangle}{(E_0 - E_{k_1})(E_0 - E_{k_2})} + \dots$$

Нормы по образцам во второй порядок теории возмущений /см. часть I/ являются здесь расчет производных трех ватричных элементов от возмущения-препятствия оператора

$$\sum_{k_1 k_2} \langle 0 | A | V_{k_1} R_{k_1} V_{k_2} | 0 \rangle \langle 0 | V_{k_1} V_{k_2} \rangle + \dots$$

Нормальная операция в данном случае имеет следующий вид: отдельные части колдовского-препятствия оператора

$$\{V^0 V^0 V^0\}, \{V^0 V^0 V^0 V^0\}, \{V^0 V^0 V^0 V^0 V^0\}, \dots$$

$$\{V^0 V^0 V^0 V^0\}, \{V^0 V^0 V^0 V^0 V^0\}, \dots$$

Члены, содержащие три одинаковые оператора, преобразуются следующим образом:

$$\sum_{\sigma_1 \sigma_2} \langle 0 | A | V^{\sigma_1} R_{\sigma_1} V^{\sigma_2} | 0 \rangle \langle 0 | V^{\sigma_1} V^{\sigma_2} | 0 \rangle =$$

$$= \frac{1}{[1]_{3/2}} \langle 0 | A | V^{\sigma_1} V^{\sigma_2} \rangle \langle 0 | V^{\sigma_1} V^{\sigma_2} | 0 \rangle =$$

$$= \sum_{\sigma_1 \sigma_2} F_{\sigma_1 \sigma_2} R_{\sigma_1} R_{\sigma_2} =$$

$$= \frac{(1+1)(1+1)(1+1)}{[1]_{3/2}} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} (-1)^{\sigma_1 \sigma_2} \sqrt{(2J_{\sigma_1} + 1)(2J_{\sigma_2} + 1)} \dots$$

$$= \dots$$

$$= \dots$$

В результате, например, отдельный член  $V^{\sigma_1} V^{\sigma_2} V^{\sigma_3}$  может быть приведен к виду:

$$\sum_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3} \frac{\langle 0 | V^{\sigma_1} V^{\sigma_2} V^{\sigma_3} | 0 \rangle \langle 0 | V^{\sigma_1} V^{\sigma_2} V^{\sigma_3} | 0 \rangle}{(E_0 - E_{\sigma_1})(E_0 - E_{\sigma_2})(E_0 - E_{\sigma_3})} \{ \text{бронч элемент} \}$$

$$\{ \text{бронч элемент} \} = \frac{3}{4\sqrt{5}} R^{(1,1,1)} + \frac{6\sqrt{5}}{7\sqrt{5}} R^{(1,1,1)} + \frac{2}{35} R^{(1,1,1)} + \dots$$

Аналогичным образом мы преобразуем члены третьего порядка, содержащие четырежды элементы двух различных операторов.



$$\sum_{\xi_1, \xi_2} \langle 0, n | [V^{\xi_1} R^{\Omega_2(\xi_1, \xi_2)}]^{A_1} | \xi_1 \xi_2 \rangle \langle \xi_1 \xi_2 | [V^{\xi_2} R^{\Omega_1(\xi_1, \xi_2)}]^{A_1} | \xi_1' \xi_2' \rangle \cdot \langle \xi_1' \xi_2' | [V^{\xi_1} R^{\Omega_2(\xi_1, \xi_2)}]^{A_1} | 0, n \rangle =$$

$$= \frac{(0, n | V^{\xi_1} | \xi_1 \xi_2 \rangle \langle \xi_1 \xi_2 | V^{\xi_2} | 0, n \rangle (V^{\xi_1} R^{\Omega_2(\xi_1, \xi_2)})^{A_1} (V^{\xi_2} R^{\Omega_1(\xi_1, \xi_2)})^{A_1}}{[r_1]^{1/2} [r_2]^{1/2}} \cdot \{ [R^{\Omega_2(\xi_1, \xi_2)}]^{A_1} R^{\Omega_2(\xi_1, \xi_2)} \}^{A_1}$$

$$= \frac{(n, n) (n, n) (n, n)}{[r_1]^{1/2} [r_2]^{1/2}} \sum_{J_1, J_2} (-1)^{J_1+J_2} \sqrt{(2J_1+1)(2J_2+1)} \cdot K_{r_1}^{k_1 k_2 J_1} K_{r_2}^{k_3 k_4 J_2} \{ [R^{\Omega_2(\xi_1, \xi_2)}]^{A_1} R^{\Omega_2(\xi_1, \xi_2)} \}^{A_1}$$

Найдем несколько операторов возмущения в одном ядре приводит к необходимости одновременного рассмотрения некольких отдельных ячеек, раздвинутого порядка следования координатных операторов. Так например, для ядра

$$\{ V^{\xi} V^{\xi'} V^{\xi''} \} \text{ имеем: } \{ \langle V^{\xi} V^{\xi'} V^{\xi''} \rangle - \langle V^{\xi'} V^{\xi} V^{\xi''} \rangle \} \{ \text{брось, застк} \}$$

$$\{ \text{брось, застк} \} = \frac{1}{3\sqrt{7}} R^{6(6, n_1)} + \frac{2g}{462\sqrt{5}} R^{6(4, n_1)} - \frac{2\sqrt{2}}{105} R^{6(0, n_1)} - \frac{5\sqrt{5}}{33} R^{4(4, n_1)} - \frac{4\sqrt{6}}{35} R^{4(0, n_1)} - \frac{10\sqrt{2}}{35} R^{2(0, n_1)}$$

Все остальные члены третьего порядка преобразуются аналогичным образом, причем члены, содержащие операторы типа  $A_1$  и по координатным и по вращательным переменным преобразуются наиболее просто.

В заключение данного параграфа укажем, как можно преобразовать найденное общее ядро, показавшимся в четвертом порядке

- Теория возмущения.

$$\sum_{\xi_1, \xi_2} \langle 0, n | [V^{\xi_1} R^{\Omega_2(\xi_1, \xi_2)}]^{A_1} | \xi_1 \xi_2 \rangle \cdot \langle \xi_1 \xi_2 | [V^{\xi_2} R^{\Omega_2(\xi_1, \xi_2)}]^{A_1} | \xi_1' \xi_2' \rangle \cdot \langle \xi_1' \xi_2' | [V^{\xi_1} R^{\Omega_2(\xi_1, \xi_2)}]^{A_1} | 0, n \rangle =$$

$$= \frac{(0, n | V^{\xi_1} | \xi_1 \xi_2 \rangle \langle \xi_1 \xi_2 | V^{\xi_2} | 0, n \rangle (V^{\xi_1} R^{\Omega_2(\xi_1, \xi_2)})^{A_1} (V^{\xi_2} R^{\Omega_2(\xi_1, \xi_2)})^{A_1}}{[r_1]^{1/2} [r_2]^{1/2}} \cdot \{ [R^{\Omega_2(\xi_1, \xi_2)}]^{A_1} \}^{A_1}$$

$$= \frac{(n, n) (n, n) (n, n)}{[r_1]^{1/2} [r_2]^{1/2}} \sum_{J_1, J_2} (-1)^{J_1+J_2} \cdot \{ [R^{\Omega_2(\xi_1, \xi_2)}]^{A_1} R^{\Omega_2(\xi_1, \xi_2)} \}^{A_1} =$$

$$= \frac{(n, n) (n, n) (n, n)}{[r_1]^{1/2} [r_2]^{1/2}} \sum_{J_1, J_2} (-1)^{J_1+J_2} \cdot K_{r_1}^{k_1 k_2 J_1} K_{r_2}^{k_3 k_4 J_2} \{ [R^{\Omega_2(\xi_1, \xi_2)}]^{A_1} \}^{A_1}$$

$$= \frac{(2J_1+1)(2J_2+1)(2J_3+1)}{[r_1]^{1/2} [r_2]^{1/2}} K_{r_1}^{k_1 k_2 J_1} K_{r_2}^{k_3 k_4 J_2} K_{r_3}^{k_5 k_6 J_3} \{ [R^{\Omega_2(\xi_1, \xi_2)}]^{A_1} R^{\Omega_2(\xi_1, \xi_2)} \}^{A_1}$$

## ЛИТЕРАТУРА.

1. Б.И.Клидинский. Метод неприводимых тензорных операторов в молекулярной спектроскопии. Часть I. Основы теории. Уимический ф-т МГУ. 1981.
2. J. Moret-Vallée, *Can. Phys.* **12**, 237 (1961).
3. J. Moret-Vallée, L. Gautier, J. Monteauvillat, *J. Mol. Spectrosc.* **12**, 355 (1965).
4. J. P. Champiron, G. Pierre, F. Michelot, J. Moret-Vallée, *Can. J. Phys.* **52**, 512 (1977).
5. И.Т.Свиридов, О.Ф.Смирнов. Теория оптических спектров ионов переходных металлов. Наука, М., 1977.
6. J. P. Champiron, *Can. J. Phys.* **52**, 1802 (1977).
7. В.Д.Кришн. Diagonal  $f(4)$  and  $f(6)$  coefficients for spherical top molecules in angular momentum states up to  $J = 100$ , *IA-6554-MS*, October 1976.
8. J. C. Hillco, M. Dang Nhu, *J. Phys. (Paris)* **35**, 527 (1974).
9. В.Волн, J. C. Hillco, *J. Phys. (Paris)* **35**, 225 (1975).
10. J. C. Hillco, J. P. Champiron, G. Pierre, *J. Mol. Spectrosc.* **50**, 422 (1976).
11. F. Michelot, J. Moret-Vallée, *J. Phys. (Paris)* **35**, 451 (1975).
12. М.Н.Киблер, *J. Mol. Spectrosc.* **52**, 247 (1976).
13. М.Н.Киблер. Finite symmetry adaptation in spectroscopy. Lecture Notes, NATO Advanced Study Institute, Antigonish, Nova Scotia, Canada, 1978.
14. F. Michelot, *J. Mol. Spectrosc.* **53**, 227 (1976).
15. А.П.Димо, И.Б.Лейнсон, В.В.Вайльас. Математический аппарат теории момента количества движения. Уильямс, 1980.
16. Э.Эль-Баз, В.Кестель. Традиционные методы алгебры спинков. Мир, М., 1974.
17. Д.А.Вершадомич, А.Н.Москалев, В.К.Херсонский. Квантовая теория углового момента. Наука, д., 1975.
18. Н.А.Вичкмастер, R. Chatterjee, Y. H. Shing, *Phys. Stat. Sol. (a)* **13**, 9 (1972).
19. В.В.Толмачев. Теория ферми газа. МГУ, 1973.