

Тензор хэмжигдэхүүний гурван хэмжээст огторгуй дахь дундаж утгыг тооцоолох нь

Бэгзжавын Төгөлдөр*

Монгол улсын их сургууль, Шинжлэх ухааны сургууль, Физикийн тэнхим

Тензор хэмжигдэхүүний гурван хэмжээст огторгуйд дундажлах бодлого оптикийн спектроскопийн онолд нэлээд тааралддаг. Ялангуяа огторгуйн өнцгөөр жигд түгэж байрласан молекулуудаас тогтох хийн (зарим тохиолдолд шингэн) төлөвт буй бодисоос сарних гэрлийн эрчмийг тооцоолоход чухал ач холбогдолтой байдаг. Уг бодлогын бодолтыг хэд хэдэн аргаар үзүүлж, математикийн хувьд дэлгэрэнгүй тайлбарлахыг хичээлээ. Харин томъёоны гаргалгаа хийхийг, математикийн теорем батлахыг зорилгоо болгосонгүй үүний оронд тэдгээрийг үзэж болох эх сурвалжийг эшлэлээ. Түүнчлэн Раманы сарнилын цацаргалтын эрчмийг бодоход хэрхэн ашиглагдаж байгааг жишээ болгон үзүүлээ. Энэхүү тойм өгүүлэл нь оптикийн спектроскопийн чиглэлээр мэргэшиж байгаа судлаач оюутнуудад зориулагдав.

I. Удиртгал

Аливаа бодис молекулуудаас тогтоно. Тэдгээр молекулуудын физик шинж чанарыг судлах түгээмэл аргуудын нэг бол оптикийн спектроскопи юм. Хэдийгээр сүүлийн үеийн оптикийн спектроскопийн зарим арга бүр нэг молекулын түвшинд судлах боломжийг бидэнд олгож байгаа боловч олон молекулаас тогтох дээжийг гэрлээр шарж сарнисан гэрлийг судлах оптикийн спектроскопийн арга нь өдөр тутам ашиглагдсан хэвээр байна. Хий болон шингэн төлөвт буй бодис гадны ямар нэгэн нөлөөгүй бол (гадны цахилгаан болон соронзон орон, хатуу гадаргуу гэх мэт) молекулууд нь хугацааны нэг эгшинд эмх замбараагүй огторгуйн бүх өнцгөөр жигд түгэн байрлана. Энэ тохиолдолд тухайн бодисоос сарних гэрэл нь молекул бүрээс сарних гэрлийн нийлбэр байх бөгөөд нэг молекулын тухай мэдээллийг туршлагаар судлах тохиолдолд сарнисан нийлбэр гэрлийн эрчмийг молекулын тоонд хуваах хэрэгтэй. Тэгвэл онолын тооцоонд энэ физикийн процессыг судлахдаа нэг молекул авч тооцоолох гэж буй физик хэмжигдэхүүнээ огторгуйн бүх өнцгөөр эргүүлсэн молекулын хувьд тооцоолоод дундажладаг. Молекулын тоо хангалттай олон, мөн шарж буй гэрлийн үргэлжлэх хугацаа нь молекулын хөдөлгөөний санамсаргүй флуктуацийг тооцолгүй орхиж болохоор хангалттай их үед дээрх нэг молекулын огторгуйн өнцгөөр дундажлах арга хүчин төгөлдөр байна. Энэхүү арга нь шингээлтийн спектроскопи [1–3], флуоресценци [4], Раманы сарнил [5], гипер Раманы сарнил [6, 7], гармоник үүсгүүр [8], оптикийн идэвхит материалын спектроскопи [9, 10] гэх мэт олон төрлийн оптикийн спектроскопийн онолд өргөн ашиглагддаг.

II. Тензор хэмжигдэхүүний гурван хэмжээст огторгуй дахь дундаж утга

Юуны өмнө ямар учраас тензор хэмжигдэхүүний дундаж утгыг бодох шаардлага үүсдэгийг товч үзье. Үүний тулд хийн төлөвт буй дээж авъя. Уг дээжийг аяндаа цацрах Раманы сарнилын аргаар судлах зорилго тавьсан гэж бодъё. Тэгвэл уг дээжийг тодорхой тэнхлэгийн дагуу шугаман эсвэл тойрог туйлшралтай ω_l давтамжтай лазерын гэрлээр шарж $\omega_l - \omega_v$ давтамжтай Раманы сарнилын гэрлийг бүртгэж авна. Энд ω_v - ээр молекулын хэлбэлзлийн давтамжийг илэрхийлэв. Энэ үед туссан гэрлийн цахилгаан орны нөлөөгөөр үүсэх туйлшралын вектор дараах байдлаар илэрхийлэгдэнэ [5]

$$P_k(t) = \frac{1}{2} \alpha_{kj} E_j \exp(-i(\omega_l - \omega_v)t) + \text{комплекс хосмог.} \quad (1)$$

Энд α_{kj} - ээр туйлшралын тензорын k ба j дугаар элементийг, E_j - ээр туссан гэрлийн цахилгаан орны j байгуулагчийг, t - ээр хугацааг тус тус тэмдэглэв. Энд бид нэмэхдээ Эйнштейний тэмдэглэгээг ашиглав. Өөрөөр хэлбэл давтагдсан индекс бүрээр нь нэмж байна гэсэн үг. Тэгшитгэл (1) нь лабораторид бэхлэгдсэн тооллын системд бичигдсэн. Илүү ойлгомжтой болгох зорилгоор x тэнхлэгийн дагуу туйлшралтай гэрлээр молекулыг шарах үед үүсэх туйлшралын векторын x байгуулагчийг сонирхъё. Тэгвэл (1) дүгээр тэгшитгэл

$$P_x(t) = \frac{1}{2} \alpha_{xx} E_x \exp(-i(\omega_l - \omega_v)t) + \text{комплекс хосмог} \quad (2)$$

хэлбэртэй болно. Тэгвэл энэ тэгшитгэлийн баруун гар талын илэрхийлэл гурван хэмжээст бодит огторгуйд байрлах молекулын чиглэлээс яаж хамаарах вэ? Ажиглавал уг тэгшитгэлийн баруун гар талд зөвхөн туйлшралын тензор α_{xx} л молекул огторгуйд хэрхэн байршихаас хамаарна. Хэрвээ бид хийн төлөвт буй огторгуйд санамсаргүй байрласан олон тооны молекул авч үзвэл $P_x(t)$ -

*tuguldurb@num.edu.mn

ийн модулийн квадратын дундаж утга

$$\begin{aligned} \langle P_x(t)P_x^*(t) \rangle &= \frac{1}{2} \langle \alpha_{xx} \alpha_{xx}^* \rangle |E_x|^2 + \frac{1}{4} \langle \alpha_{xx}^2 \rangle E_x^2 \exp(-2i(\omega_l - \omega_v)t) \\ &+ \frac{1}{4} \langle (\alpha_{xx}^*)^2 \rangle (E_x^*)^2 \exp(2i(\omega_l - \omega_v)t) \end{aligned} \quad (3)$$

хэлбэртэй бичигдэнэ. Энд өнцөгтэй хаалтаар дундаж утгыг, * - оор комплекс хосмогийг тус тус тэмдэглэв. Тэгшитгэл (3) - д гадны цахилгаан орны хүчлэг E_x нь молекулын чиглэлтэй ямар ч хамааралгүй хэмжигдэхүүн учраас түүнийг дундажлах шаардлагагүй юм. Илэрхийлэл (3) - д зөвхөн эхний гишүүн нь аяндаа цацрах Раманы сарнилыг тодорхойлно. Тэгэхлээр бидний тооцоолох шаардлагатай зүйл бол туйлшралын тензор α_{kj} - ийн тензор үржвэрийн гурван хэмжээст огторгуйн дундаж утга $\langle \alpha_{xx} \alpha_{xx}^* \rangle$ юм. Энд бид ямар учраас тензор хэмжигдэхүүний дундаж утга хэрэгтэй болохыг Раманы сарнилын жишээн дээр тайлбарлалаа. Үүнээс улбаалаад бусад өндөр эрэмбийн шугаман бус спектроскопийн аргуудад өндөр эрэмбийн тензорын дундаж утга бодох шаардлагатай болохыг хялбархан харж болно.

Одоо тензор хэмжигдэхүүний гурван хэмжээст огторгуй дахь дундаж утгын математик илэрхийллийг тайлбарлая. Бид квант химийн тооцоолол ашиглан туйлшралын тензор бодохдоо тооллын системээ молекул дээрээ бэхэлдэг. Жишээлбэл усны молекул дээр бэхлэгдсэн координатын системийг зураг 1(А) - д үзүүлэв. Ингэж молекул дээр бэхлэгдсэн тооллын системд n эрэмбийн тензорыг $T_{\lambda_1 \dots \lambda_n}$ гэж тэмдэглэе. Энд $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ нь молекул дээр бэхлэгдсэн тооллын систем дэх тензорын индексүүд. Тэгвэл лабораторийн тооллын системд уг тензор дараах байдлаар илэрхийлэгдэнэ

$$T_{i_1 \dots i_n} = l_{i_1 \lambda_1} \dots l_{i_n \lambda_n} T_{\lambda_1 \dots \lambda_n} \quad (4)$$

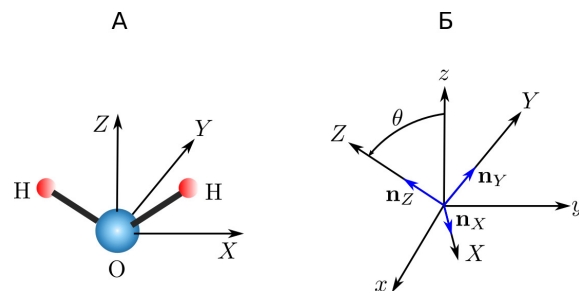
Энд $i_1, \dots, i_n$ нь лабораторийн тооллын систем дэх тензорын индексүүд, $l_{i_1 \lambda_1} \dots l_{i_n \lambda_n}$ нь чиглэл тодорхойлох косинус функцууд [11]. Тэгшитгэл (4) - ийн хоёр талыг дундажлавал

$$\langle T_{i_1 \dots i_n} \rangle = \langle l_{i_1 \lambda_1} \dots l_{i_n \lambda_n} \rangle T_{\lambda_1 \dots \lambda_n} \quad (5)$$

болно. Энд $T_{\lambda_1 \dots \lambda_n}$ нь молекулын гурван хэмжээст огторгуй дахь чиглэлээс хамаарахгүй учир бүх молекулын хувьд ижил бөгөөд дундажлахад оролцохгүй. Тэгшитгэл (5) - аас үзвэл тензорын дундаж утга олох бодлого нь чиглэл тодорхойлох косинус функцуудын дундаж утга $\langle l_{i_1 \lambda_1} \dots l_{i_n \lambda_n} \rangle$ - ийг олох бодлогод шилжиж байна.

III. Бага эрэмбийн тензорын дундаж утга

Хамгийн хялбар олдох дундаж утга бол n ширхэг чиглэл тодорхойлох косинус функцийг үрж-



Зураг 1: (А) Усны молекул дээр бэхлэгдсэн тооллын систем X, Y, Z . (Б) Лабораторийн тооллын систем x, y, z болон молекул дээр бэхлэгдсэн тооллын систем X, Y, Z - ийн харилцан байршлыг үзүүлэв. $\mathbf{n}_X$, $\mathbf{n}_Y$, $\mathbf{n}_Z$ нь молекул дээр бэхлэгдсэн тооллын системийн тэнхлэгүүдийн дагуу нэгж векторууд.

вэр $\langle l_{zZ} \dots l_{zZ} \rangle$ юм. Энд бид лабораторийн тооллын системийн байгуулагчуудыг жижиг x, y, z - ээр харин молекул дээр бэхлэгдсэн тооллын системийн байгуулагчуудыг том X, Y, Z - ээр тус тус тэмдэглэв. Тэгвэл $l_{zZ} = \cos \theta$ учир (зураг 1(Б) - г үз) дундаж утга

$$\langle l_{zZ} \dots l_{zZ} \rangle = \frac{\int_0^\pi d\theta \cos^n \theta \sin \theta}{\int_0^\pi d\theta \sin \theta} \quad (6)$$

гэж илэрхийлэгдэх бөгөөд бид θ өнцгийг бөмбөрцөг тооллын систем дэх векторын z тэнхлэгтэй үүсгэх өнцөг гэж тооцов. Үүний нэгэн адил $\langle l_{zX} \dots l_{zX} \rangle$, $\langle l_{zY} \dots l_{zY} \rangle$, $\langle l_{xY} \dots l_{xY} \rangle$ гэх мэт есөн дундаж утга мөн ижил (6) дугаар томъёогоор тодорхойлогдоно. Үүнээс гадна чиглэл тодорхойлох косинус функцийг хувьд

$$l_{i_1 \lambda_1} l_{i_1 \lambda_2} = \delta_{\lambda_1 \lambda_2}, \quad (7a)$$

$$l_{i_1 \lambda_1} l_{i_2 \lambda_1} = \delta_{i_1 i_2} \quad (7b)$$

шинж чанарууд биелдэг. Энд хоёрдугаар эрэмбийн $\delta_{\lambda_1 \lambda_2}$ тензорыг Кронекерийн тензор гэж нэрлэдэг бөгөөд $\lambda_1 = \lambda_2$ үед $\delta_{\lambda_1 \lambda_2} = 1$, бусад үед $\delta_{\lambda_1 \lambda_2} = 0$ байдаг. Илэрхийлэл (7) - гийн геометр утгыг зураг 1 - ээс хялбархан ойлгож болно. Тодруулбал молекул дээр бэхлэгдсэн тооллын системийн тэнхлэгүүд X, Y, Z - ийн дагуух нэгж векторууд $\mathbf{n}_X, \mathbf{n}_Y, \mathbf{n}_Z$ нь чиглэл тодорхойлох косинус функцээр дараах байдлаар

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_X &= \{l_{xX}, l_{yX}, l_{zX}\}, & \mathbf{n}_Y &= \{l_{xY}, l_{yY}, l_{zY}\}, \\ \mathbf{n}_Z &= \{l_{xZ}, l_{yZ}, l_{zZ}\} \end{aligned} \quad (8)$$

гэж илэрхийлэгдэнэ. Тэгвэл дээрх нэгж векторуудын орто-нормаль шинж чанараас тэгшитгэл (7a) шууд урган гарна. Мөн үүний адил тэгшитгэл (7b) нь лабораторийн тооллын системийн тэнхлэгүүд x, y, z - ийн дагуух нэгж векторуудын орто-нормаль шинж чанарын илэрхийлэл юм.

Томъёо (6) ба (7) - г ашиглан чиглэл тодорхойлох косинус функцийн дундаж утгыг бага эрэмбийн тензорын хувьд олж болно [12, 13]. Тухайлбал

1. Нэгдүгээр эрэмбийн тензор. Энэ тохиолдолд (6) дугаар томъёо ёсоор бүх i ба λ - ийн утганд дундаж утга $\langle l_{i\lambda} \rangle = 0$ байна.
2. Хоёрдугаар эрэмбийн тензорын тохиолдолд (7а) дугаар илэрхийллийн хоёр талыг дундажлавал

$$\langle l_{i_1 X} l_{i_1 X} \rangle = 1, \quad \langle l_{i_1 Y} l_{i_1 Y} \rangle = 1, \quad \langle l_{i_1 Z} l_{i_1 Z} \rangle = 1 \quad (9)$$

болно. Эхний тэгшитгэлийг задалж бичвэл $\langle l_{xX} l_{xX} \rangle + \langle l_{yX} l_{yX} \rangle + \langle l_{zX} l_{zX} \rangle = 1$ бөгөөд x, y, z тооллын системийн тэнхлэгүүд ижил чанартайг санавал тэнцүүгийн тэмдгийн өмнөх гурван гишүүн хоорондоо тэнцүү байх ёстой. Эндээс бид $\langle l_{xX} l_{xX} \rangle = \langle l_{yX} l_{yX} \rangle = \langle l_{zX} l_{zX} \rangle = 1/3$ гэж олно. Үүнтэй адил (9) дүгээр илэрхийллийн сүүлийн хоёр тэгшитгэлд харгалзах бусад зургаан дундаж утга бүгд $1/3$ - тэй тэнцүү байна. Түүнчлэн (7а) илэрхийлэлд байх Кронекерийн тензор тэг байх тохиолдлыг сонирхвол

$$\langle l_{i_1 X} l_{i_1 Y} \rangle = 0, \quad \langle l_{i_1 X} l_{i_1 Z} \rangle = 0, \quad \langle l_{i_1 Y} l_{i_1 Z} \rangle = 0 \quad (10)$$

болно. Дахин тооллын системийн тэнхлэгүүдийн ижил чанартай байхыг тооцвол нийлбэрт байх гишүүд тус бүрдээ тэгтэй тэнцэх ёстой. Тиймээс λ_1 ба λ_2 ялгаатай утга авбал дундаж утга бүгд тэг байна. Энэ хүртэл бид зөвхөн (7а) тэгшитгэлийг ашигласан. Харин тэгшитгэл (7б) - ийн хувьд бүх зүйл өмнөхтэй ижил байна. Тиймээс хоёрдугаар эрэмбийн тензорын дундаж утгыг нэгтгэн дүгнэвэл хоёр хос (i_1, i_2) , (λ_1, λ_2) индексүүд тус бүрдээ хоорондоо тэнцүү байвал дундаж утга $1/3$ байна харин аль нэг хос индекс нь ялгаатай бол 0 байна. Товчхондоо

$$\langle l_{i_1 \lambda_1} l_{i_2 \lambda_2} \rangle = \frac{1}{3} \delta_{i_1 i_2} \delta_{\lambda_1 \lambda_2} \quad (11)$$

болно.

3. Гуравдугаар эрэмбийн тензорын хувьд $(\mathbf{n}_X \times \mathbf{n}_Y) \cdot \mathbf{n}_Z = 1$ гэсэн чухал адилтгалыг ашиглан

$$\epsilon_{i_1 i_2 i_3} \langle l_{i_1 X} l_{i_2 Y} l_{i_3 Z} \rangle = 1 \quad (12)$$

гэж бичиж болно. Энд гуравдугаар эрэмбийн тензор $\epsilon_{i_1 i_2 i_3}$ - ийг Леви-Чевитагийн тензор¹ гэж нэрлэдэг. Энэ илэрхийлэлд тэн-

цүүгийн тэмдгийн урд талд зургаан гишүүний нийлбэр байх бөгөөд x, y, z тэнхлэгүүдийн ижил чанартай гэдгээс уг зургаан гишүүн бүгд тэнцүү байна. Тэгэхээр

$$\begin{aligned} \langle l_{xX} l_{yY} l_{zZ} \rangle &= \langle l_{yX} l_{zY} l_{xZ} \rangle = \langle l_{zX} l_{xY} l_{yZ} \rangle = \frac{1}{6}, \\ \langle l_{xX} l_{zY} l_{yZ} \rangle &= \langle l_{yX} l_{xY} l_{zZ} \rangle = \langle l_{zX} l_{yY} l_{xZ} \rangle = -\frac{1}{6} \end{aligned} \quad (13)$$

гэж дүгнэж болно. Тэгшитгэл (12) - т буй X, Y, Z тэнхлэгүүдийг сэлгэн бичиж өөр таван адилтгал тодорхойлж болно. Тэнхлэгүүдийн сондгой тооны сэлгэлт бүрд тэнцүүгийн тэмдгийн арын тоо тэмдэгээ өөрчлөх бол тэгш тооны сэлгэлт бүрд өөрчлөгдөхгүй. Жишээ татвал $\epsilon_{i_1 i_2 i_3} \langle l_{i_1 X} l_{i_2 Z} l_{i_3 Y} \rangle = -1$ гэх мэт. Хэрэв X, Y, Z тэнхлэгүүдийн дурын хоёр нь ижил бол тэгтэй тэнцэнэ. Жишээлбэл $\epsilon_{i_1 i_2 i_3} \langle l_{i_1 X} l_{i_2 Y} l_{i_3 Y} \rangle = 0$ байх учраас тэнцүүгийн тэмдгийн өмнөх зургаан гишүүн (дундаж утга) тус бүрдээ тэг болно. Гуравдугаар эрэмбийн тензорын хувьд хийсэн энэ бүгдийг багцалбал

$$\langle l_{i_1 \lambda_1} l_{i_2 \lambda_2} l_{i_3 \lambda_3} \rangle = \frac{1}{6} \epsilon_{i_1 i_2 i_3} \epsilon_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} \quad (14)$$

гэж ерөнхий томъёо бичигдэнэ.

Дээрх аргаар дөрөв ба тавдугаар эрэмбийн тензорын дундаж утгыг (6) дугаар томъёо болон $(\mathbf{n}_X \cdot \mathbf{n}_X)(\mathbf{n}_Y \cdot \mathbf{n}_Y) = 1$, $(\mathbf{n}_X \times \mathbf{n}_Y) \cdot \mathbf{n}_Z (\mathbf{n}_X \cdot \mathbf{n}_X) = 1$ гэх мэт илэрхийллүүдийг ашиглан тодорхойлж болно. Гэвч тооцоолох тохиолдлуудын тоо олон мөн тооцоо нь ярвигтай байдаг.

IV. Интегралчлах арга

Интегралчлах арга нь бидний сайн мэдэх стандарт болсон дундаж утга олох нэмэх арга юм. Тухайлбал (a, b) гэсэн мужид тодорхойлогдсон $f(x)$ функцийн дундаж утгыг олохдоо уг функцийг өгөгдсөн мужид интегралчлаад уг мужийн урт $(b - a)$ - д хуваадаг. Томъёо нь

$$\langle f(x) \rangle = \frac{1}{b - a} \int_a^b dx f(x) \quad (15)$$

болно. Энэ аргыг шууд ерөнхийлөн хэрэглэвэл чиглэл тодорхойлох косинус функцуудын дундаж

¹ Леви-Чевитагийн тензорын элемент $\epsilon_{xyz} = 1$ байх бө-

гөөд xyz дарааллаас эхлээд индексүүдийн сондгой тооны сэлгэлт бүрд элементийн утга -1 харин тэгш тооны сэлгэлт бүрд элементийн утга $+1$ байна. Жишээлбэл x ба y - г сэлгэвэл $\epsilon_{yxz} = -1$ үргэлжлүүлэн x ба z - г сэлгэвэл $\epsilon_{yzx} = +1$ гэх мэт.

утга $\langle l_{i_1 \lambda_1} \dots l_{i_n \lambda_n} \rangle$ нь дараах байдлаар тодорхойлогдоно

$$\langle l_{i_1 \lambda_1} \dots l_{i_n \lambda_n} \rangle = \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta l_{i_1 \lambda_1} \dots l_{i_n \lambda_n}. \quad (16)$$

Энд ψ , ϕ , θ өнцгүүд нь Эйлерийн өнцөг гэж нэрлэгддэг ба энэ тухай дэлгэрэнгүйг хавсралт А - д оруулав. Тэгшитгэл (16) - ийн интеграл доорх чиглэл тодорхойлох косинус функцууд нь Эйлерийн гурван өнцгөөс хамаарах бөгөөд энэ хамаарлын ил хэлбэр нь

$$l = \begin{pmatrix} \cos \phi \cos \psi - \sin \phi \cos \theta \sin \psi & \sin \phi \cos \psi + \cos \phi \cos \theta \sin \psi & \sin \theta \sin \psi \\ -\cos \phi \sin \psi - \sin \phi \cos \theta \cos \psi & -\sin \phi \sin \psi + \cos \phi \cos \theta \cos \psi & \sin \theta \cos \psi \\ \sin \phi \sin \theta & -\cos \phi \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (17)$$

гэж тодорхойлогдоно. Жишээлбэл дундаж утга $\langle l_{xX} l_{xX} \rangle$ - ийг тооцоолбол

$$\begin{aligned} \langle l_{xX} l_{xX} \rangle &= \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta (\cos \phi \cos \psi - \sin \phi \cos \theta \sin \psi)^2 \\ &= \frac{1}{3} \end{aligned} \quad (18)$$

болно. Тензорын эрэмбэ өсөх тусам интеграл нэлээд адармаатай болох боловч аналитик бодогддог. Ерөнхий тохиолдолд бодохын тулд зарим нэг тохиромжтой тэмдэглэгээг оруулъя. Чиглэл тодорхойлох косинус функцуудийн дундаж утгыг

$$\langle l_{i_1 \lambda_1} \dots l_{i_n \lambda_n} \rangle = I_{i_1 \dots i_n; \lambda_1 \dots \lambda_n}^{(n)} = I^{(n)} \quad (19)$$

гэж тэмдэглэе. Мөн түүнчлэн ижил индекстэй косинус функцуудыг цуглуулж зэрэг хэлбэртэй бич-

вэл

$$I^{(n)} = \langle l_{xX}^Q l_{xY}^R l_{xZ}^S l_{yX}^T l_{yY}^U l_{yZ}^V l_{zX}^W l_{zY}^X l_{zZ}^Y \rangle \quad (20)$$

хэлбэртэй байж болно. Тэгшитгэл (18) - ыг ажиглавал интеграл (16) - гийн ерөнхий хэлбэр нь косинус синус функцуудын үржвэрээс авсан бие бие-нээсээ үл хамаарах гурван интегралын үржвэрүүдийн нийлбэр хэлбэртэй болно. Тиймээс бидэнд дараах [14]

$$\int_0^\pi dx \sin^i x \cos^j x = \begin{cases} \pi \frac{(i-1)!!(j-1)!!}{(i+j)!!}, & i \text{ ба } j \text{ хоёулаа тэгш} \\ 2 \frac{(i-1)!!(j-1)!!}{(i+j)!!}, & i \text{ сондгой харин } j \text{ тэгш} \\ 0, & j \text{ сондгой,} \end{cases} \quad (21)$$

$$\int_0^{2\pi} dx \sin^i x \cos^j x = \begin{cases} 2\pi \frac{(i-1)!!(j-1)!!}{(i+j)!!}, & i \text{ ба } j \text{ хоёулаа тэгш} \\ 0, & \text{бусад тохиолдолд} \end{cases} \quad (22)$$

ерөнхий томъёонууд хэрэглэгдэнэ. Томъёо (22) - оос үзвэл косинус ба синусын зэргүүд зөвхөн тэгш байхад интеграл тэгээс ялгаатай. Тиймээс нийлбэрчлэхдээ зөвхөн тэгш зэрэгтэй функцээс авсан ψ ба ϕ интегралуудыг тооцоонд оруулна. Бусад нь тэг. Харин томъёо (21) - ийн хувьд интеграл тэгээс ялгаатай байхын тулд зөвхөн косинусын зэрэг л тэгш байх ёстой. Синус функцийн зэрэг ямар ч байж болно. Тэгэхлээр бид синус функ-

цийн зэргийн тэгш үү сондгой юу гэдгээс хамаараад интегралын хариу хоёр өөр хэлбэртэй илэрхийлэгдэнэ. Иймд хоёр өөр хэлбэртэй илэрхийллийг нэмэх шаардлагатай болно. Нэлээд төвөгтэй сонсогдож байна. Гэхдээ уг нийлбэрт зөвхөн сондгой зэрэгтэй $\sin \theta$ функцууд оролцоно гэвэл тооцоо маш хялбар болох бөгөөд яагаад зөвхөн сондгой зэрэгтэй $\sin \theta$ функцууд нийлбэрт байгааг тайлбарлая.

Лабораторийн болон молекул дээр бэхлэгдсэн тооллын системүүдийг зэрэг нэг тэнхлэгийг тойруулан нэг чиглэлд ижил өнцгөөр эргүүлбэл чиглэл тодорхойлох косинус функцуудын дундаж утга $I^{(n)}$ нь өөрчлөгдөхгүй. Энэ санааг ашиглан нэгэн чухал дүгнэлт хийж болно. Тухайлбал z тэнхлэгийг тойруулан 180° эргүүлэх эргүүлэлтийн матриц

$$R = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (23)$$

авч үзье. Энэ эргүүлэх үйлдлийг лабораторид бэх-

лэгдсэн болон молекулд бэхлэгдсэн хоёр тооллын системд $l_{i_1 \lambda_1}$ дээр зэрэг гүйцэтгэвэл

$$R_{\text{лаб}} l_{i_1 \lambda_1} R_{\text{мол}}^T = R_{\text{лаб}} l_{i_1 \lambda_1} R_{\text{мол}} \quad (24)$$

болно. Энд $R_{\text{лаб}}$ нь зөвхөн i_1 индексэд харин $R_{\text{мол}}$ нь зөвхөн λ_1 индексэд үйлчилнэ. λ_1 индекс нь $l_{i_1 \lambda_1}$ матрицын баганыг дугаарлах учир молекул дээр бэхлэгдсэн тооллын системийн эргүүлэлт нь $l_{i_1 \lambda_1}$ -ийн баруун гар талаас нь хөрвөсөн матриц $R_{\text{мол}}^T$ - р үржих үйлдлээр тодорхойлогдоно. Дээрх үйлдэл $I^{(n)}$ - ийг өөрчлөхгүй тул

$$\begin{aligned} \langle l_{xX}^Q l_{xY}^R l_{xZ}^S l_{yX}^T l_{yY}^U l_{yZ}^V l_{zX}^W l_{zY}^X l_{zZ}^Y \rangle &= \langle (R_{\text{лаб}} l_{xX} R_{\text{мол}})^Q (R_{\text{лаб}} l_{xY} R_{\text{мол}})^R (R_{\text{лаб}} l_{xZ} R_{\text{мол}})^S \\ &\quad (R_{\text{лаб}} l_{yX} R_{\text{мол}})^T (R_{\text{лаб}} l_{yY} R_{\text{мол}})^U (R_{\text{лаб}} l_{yZ} R_{\text{мол}})^V \\ &\quad (R_{\text{лаб}} l_{zX} R_{\text{мол}})^W (R_{\text{лаб}} l_{zY} R_{\text{мол}})^X (R_{\text{лаб}} l_{zZ} R_{\text{мол}})^Y \rangle \\ &= (-1)^{S+V+W+X} \langle l_{xX}^Q l_{xY}^R l_{xZ}^S l_{yX}^T l_{yY}^U l_{yZ}^V l_{zX}^W l_{zY}^X l_{zZ}^Y \rangle \end{aligned} \quad (25)$$

гэж тодорхойлогдоно. Эндээс бидний хийх дүгнэлт бол $S + V + W + X$ сондгой бол $I^{(n)} = 0$ байх ёстой. Энэ нөхцөл нь зайлшгүй нөхцөл боловч хүрэлцээтэй нөхцөл биш юм. Өөрөөр хэлбэл $I^{(n)} = 0$ байхын тулд $S + V + W + X$ нь сондгой байх албагүй юм.

Энэхүү дүгнэлт нь хэрхэн синус функцийг зэрэгтэй холбогдох вэ гэсэн асуулт урган гарна. Чиглэл тодорхойлох косинус функцуудын ил хэлбэр (17) - г илэрхийлэл (20) - д орлуулж зэрэгт функцийг биномын задаргаагаар задалбал $\sin \theta$ функцийг зэрэг $S + V + W + X + 1$ хэлбэртэй илэр-

хийлэгдэх бөгөөд өмнө хийсэн дүгнэлтийг ашиглавал $S + V + W + X + 1$ нь тэгш бол $I^{(n)} = 0$ болно. Тиймээс бидэнд тэгш зэрэгтэй $\sin \theta$ - ийн интегралыг бодох шаардлага байхгүй болно. Эсрэгээс нь хэлбэл $I^{(n)} \neq 0$ байх үед нийлбэрт зөвхөн сондгой зэрэгтэй $\sin \theta$ функцууд байна.

Дээр хэлсэнчлэн чиглэл тодорхойлох косинус функцууд (17) - г илэрхийлэл (20) - д орлуулж зэрэгт функцийг биномын задаргаагаар задалж интеграл томъёо (21) ба (22) - ыг ашиглавал дундаж утга нь [15, 16]

$$\begin{aligned} I^{(n)} &= \sum_{q=0}^Q \sum_{r=0}^R \sum_{t=0}^T \sum_{u=0}^U \binom{Q}{q} \binom{R}{r} \binom{T}{t} \binom{U}{u} (-1)^{Q+T+X-q+u} \\ &\quad \times \frac{(i_\psi - 1)!!(j_\psi - 1)!!}{(i_\psi + j_\psi)!!} \frac{(i_\phi - 1)!!(j_\phi - 1)!!}{(i_\phi + j_\phi)!!} \frac{(i_\theta - 1)!!(j_\theta - 1)!!}{(i_\theta + j_\theta)!!} \end{aligned} \quad (26)$$

хэлбэртэй илэрхийлэгдэнэ. Энд косинус, синус функцуудын зэрэг

$$\begin{aligned} i_\psi &= Q - q + R - r + t + u + S, \\ j_\psi &= q + r + T - t + U - u + V, \\ i_\phi &= Q - q + r + T - t + u + W, \\ j_\phi &= q + R - r + t + U - u + X, \\ i_\theta &= S + V + W + X + 1, \end{aligned}$$

$$j_\theta = Q - q + R - r + T - t + U - u + Y \quad (27)$$

болно. Дээрх нийлбэрт зөвхөн $i_\psi, j_\psi, i_\phi, j_\phi, i_\theta$ тэгш тоо харин j_θ сондгой тоо байх гишүүд оролцоно гэдгийг мартаж болохгүй. Дээрх томъёо (26) нь ямар ч эрэмбийн тензорын хувьд хүчинтэй ерөнхий томъёо юм. Жишээ болгож $\langle l_{xX} l_{xX} l_{xX} l_{xX} \rangle$ -

ийг (26) томъёог ашиглан бодоход

$$\langle l_{xX} l_{xX} l_{xX} l_{xX} \rangle = \frac{1}{5} \quad (28)$$

гэсэн хариу өгч байна.

Ерөнхий томъёо (26) - г тооцоонд хэрэглэхэд хэд хэдэн дутагдал байдаг. Нэгдүгээрт уг томъёо нь $I^{(n)}$ - ийн 3^{2n} гишүүдийн зөвхөн нэгийг өгнө. Тензорын дундаж утгыг олохын тулд $I^{(n)}$ дундаж утгын маш олон тооны гишүүдийг бодож томъёо (5) - ын дагуу нэмнэ. Тиймээс тензорын дундаж утгыг ялангуяа өндөр эрэмбийн тензорын хувьд гараар хийхэд нүсэр учир компьютерээр тооцоолохоос өөр арга байхгүй. Хоёрдугаарт уг арга нь зөвхөн тоон утга өгөх бөгөөд томъёо шийд гаргахад маш төвөгтэй юм.

Хэдийгээр дээр дурдсан учир дутагдалтай боловч (26) дугаар томъёог хэдхэн мөр компьютерийн кодоод багтааж болох бөгөөд уг кодыг ашиглан бусад аргаар хийсэн тооцооны үр дүн, томъёог маш хялбархан шалгаж болох давуу талтай юм.

V. Изотроп тензороор задлах арга

Чиглэл тодорхойлох косинусын дундаж утга олох дараагийн арга бол тэгш хэмийн онолд суурилсан арга юм [17, 18]. Энэ арга нь тэгш хэмийн онолын гүнзгий математик ойлголтуудад үндэслэгдсэн учраас математикийн гүнзгий мэдлэг шаарддаг. Тиймээс цаг хугацаа мөн цаас хэмнэх үүднээс зарим теорем, ухагдахуунуудыг тайлбарлахыг энд хичээсэнгүй. Гэхдээ яаж хэрэглэх тухай дэлгэрэнгүй тайлбарлахыг хичээлээ.

Бид өмнөх хэсэгт $I^{(n)}$ эргэлтэд өөрчлөгдөхгүй гэж үзсэн билээ. Тэгвэл $I^{(n)}$ нь n ширхэг i индексстэй (лабораторид бэхлэгдсэн тооллын системийн) мөн n ширхэг λ индексстэй (молекулд бэхлэгдсэн тооллын системийн) изотроп тензоруудын шугаман нийлбэр хэлбэртэй илэрхийлэгдэж болох юм. Изотроп тензор гэдэг нь тооллын системийг ямар ч өнцгөөр эргүүлсэн түүний элементүүд нь өөрчлөгддөггүй тензорыг хэлдэг. Жишээлбэл тэг дүгээр эрэмбийн тензор нь эргэлтээс хамаарахгүй тогтмол учир үргэлж изотроп тензор болдог. Харин бүх нэгдүгээр эрэмбийн тензорууд изотроп биш юм. Хоёрдугаар эрэмбийн тензорын хувьд зөвхөн Кронекерийн тензор δ_{ij} мөн гуравдугаар эрэмбийн тензорын хувьд зөвхөн Леви-Чивитагийн тензор ϵ_{ijk} нь изотроп тензорууд юм. Харин дөрвөөс дээш эрэмбийн тензоруудын хувьд дурын изотроп тензор нь Кронекерийн тензор δ_{ij} ба Леви-Чивитагийн тензор ϵ_{ijk} хоёрын тензор үржвэр хэлбэртэй бичигдэнэ. Үүнийг Вейлийн теором гэнэ [17, 19]. Жишээлбэл $\epsilon_{i_1 i_2 i_3} \delta_{i_4 i_5}$ нь лабораторид бэхлэгдсэн тооллын систем дэх тавдугаар эрэмбийн изотроп тензорийн жишээ юм. Дурын n эрэмбийн тензорын

хувьд хэдэн изотроп тензорыг Кронекерийн болон Леви-Чивитагийн тензор ашиглан бичиж болохыг хэсэглэл ашиглан тооцоолбол

$$N^{(n)} = \begin{cases} \frac{n!}{2^{n/2}(n/2)!}, & n \text{ тэгш үед} \\ \frac{n!}{3!((n-3)/2)!2^{(n-3)/2}}, & n \text{ сондгой үед} \end{cases} \quad (29)$$

болно. Эцсийн үр дүнд дундаж утга $I^{(n)}$ - гийн илэрхийлэл нь

$$I^{(n)} = \sum_{q,r} M_{qr}^{(n)} f_q^{(n)} g_r^{(n)} \quad (30)$$

хэлбэртэй болно. Үүнд $f_q^{(n)}$, $g_r^{(n)}$ нь харгалзан лабораторид болон молекулд бэхлэгдсэн тооллын систем дэх n эрэмбийн изотроп тензорууд, $M_{qr}^{(n)}$ бол квадрат матриц хэлбэрээр илэрхийлэгдэх коэффициентууд. Харин q ба r индексүүд нь лабораторид болон молекулд бэхлэгдсэн изотроп тензор $f_q^{(n)}$, $g_r^{(n)}$ - ийн дугаарлалт. Томъёо (30) - аас үзвэл бид изотроп тензорууд болон задаргааны коэффициентуудыг олох шаардлагатай болж байна.

Задаргааны коэффициентууд $M_{qr}^{(n)}$ - ийг олохын тулд Кронекерын ба Леви-Чивитагийн тензоруудын изотроп шинж чанар болох дараах томъёонуудыг ашиглая.

$$\begin{aligned} \delta_{i_1 i_2} l_{i_1 \lambda_1} l_{i_2 \lambda_2} &= \delta_{\lambda_1 \lambda_2}, \\ \epsilon_{i_1 i_2 i_3} l_{i_1 \lambda_1} l_{i_2 \lambda_2} l_{i_3 \lambda_3} &= \epsilon_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}. \end{aligned} \quad (31)$$

Тэгшитгэлийн хоёр талыг дундажлавал зөвхөн косинус функцууд дундажлагдана. Тиймээс бид ерөнхий тохиолдолд

$$f_s^{(n)} I^{(n)} = g_s^{(n)} \quad (32)$$

гэж бичиж болох бөгөөд энэ илэрхийлэлд тэгшитгэл (30) - ыг орлуулж баруун гар талаас нь $g_t^{(n)}$ изотроп тензороор үржүүлбэл

$$\sum_{q,r} f_s^{(n)} f_q^{(n)} M_{qr}^{(n)} g_r^{(n)} g_t^{(n)} = g_s^{(n)} g_t^{(n)} \quad (33)$$

болно. Одоо бид $S_{sq}^{(n)} = f_s^{(n)} f_q^{(n)}$, $S_{rt}^{(n)} = g_r^{(n)} g_t^{(n)}$ гэсэн $n \times n$ хэмжээс бүхий квадрат матриц тодорхойлъя. Тэгвэл тэгшитгэл (33) нь $\mathbf{S}^{(n)} \mathbf{M}^{(n)} = \mathbf{1}$ болох буюу задаргааны коэффициентууд M_{qr} нь

$$\mathbf{M}^{(n)} = (\mathbf{S}^{(n)})^{-1} \quad (34)$$

гэж олдоно. Энэ бол бидний ашиглах гол томъёо юм. Энд нэг анхаарах зүйл нь $\mathbf{S}^{(n)}$ матрицын урвуутай байх нөхцөл юм. Энэ нөхцөл нь $f_q^{(n)}$ изотроп тензорууд нь шугаман үл хамаарах явдал юм. Гэвч ерөнхий тохиолдолд $N^{(n)}$ ширхэг изотроп тензорууд нь бүгд үл хамаарах байж чаддаггүй. Шугаман үл хамаарах изотроп тензорын

тоо $Q^{(n)}$ - ийг хүснэгт 2 - т үзүүлэв. Хүснэгтээс үзвэл жишээлбэл $n = 5, 7, 8$ байх үед $N^{(n)}$ ба $Q^{(n)}$ тэнцүү биш байна. Тиймээс бид $N^{(n)}$ ширхэг изотроп тензороос яаж үл хамаарах тензоруудыг сонгож авах вэ гэсэн өөр бодлоготой нүүр тулж байна. Үүнийг Смидт [20] стандарт Юнгийн хүснэгт² ашиглан шийдсэн. Тэрээр өгөгдсөн нөхцөлийг хангах стандарт Юнгийн хүснэгт ба шугаман үл хамаарах изотроп тензор хоёрын хоорондын харилцан хамаарлыг тодорхойлсон байдаг. Тодруулбал доор бидний үзэх нөхцөлийг хангах ялгаатай стандарт Юнгийн хүснэгтэд шугаман үл хамаарах изотроп тензор оноож болохыг үзүүлсэн. Уг оноолт нь тензорын эрэмбийн тэгш ба сондгой чанараас хамаарах учраас стандарт Юнгийн хүснэгтэд тавигдах нөхцөл болон стандарт Юнгийн хүснэгтэд изотроп тензор оноох дүрмийг тэгш ба сондгой эрэмбийн тензорын хувьд тус тусад нь авч үзье.

V.1. Тэгш эрэмбийн тензор

Тэгш эрэмбийн тензорын хувьд Юнгийн диаграмд хоёр нөхцөл тавигдана.

1. Юнгийн диаграм хамгийн ихдээ гурван мөртэй байна. Энэ нөхцөл нь огторгуйн гурван хэмжээсээс урган гарна.
2. Юнгийн диаграмын багануудын тоо нь тэгш байх бөгөөд хос хосоороо ижил урттай байна.

Дээрх нөхцөлийг хангасан Юнгийн диаграмыг хүснэгт 1 - д үзүүлэв. Уг Юнгийн диаграммаар үүсгэгдсэн стандарт Юнгийн хүснэгтийн хос багана бүрд ерөнхий Кронекерын тензор [23] харгалзуулна. Шугаман үл хамаарах изотроп тензор нь хос багана бүрд харгалзах ерөнхий Кронекерийн тензоруудын тензор үржвэр хэлбэртэй тодорхойлогдоно. Ерөнхий Кронекерийн тензор нь

$$\delta_{j_1 \dots j_\alpha}^{i_1 \dots i_\alpha} = \begin{vmatrix} \delta_{i_1 j_1} & \dots & \delta_{i_1 j_\alpha} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \delta_{i_\alpha j_1} & \dots & \delta_{i_\alpha j_\alpha} \end{vmatrix} \quad (35)$$

гэж тодорхойлогдоно. Харгалзуулахдаа ерөнхий Кронекерийн тензорын дээд ба доод индексүүд тус бүрдээ нэг нэг багананд харгалзана. Хэрвээ баганын урт нэг нүд байвал $\begin{bmatrix} i_1 & j_1 \end{bmatrix}$ стандарт Юнгийн хүснэгтэд харгалзах ерөнхий Кронекерийн тензор ердийн Кронекерийн тензор $\delta_{j_1}^{i_1} = \delta_{i_1 j_1}$ болно. Харин хоёр нүд байвал $\begin{bmatrix} i_1 & j_1 \\ i_2 & j_2 \end{bmatrix}$ стандарт Юнгийн

хүснэгтэд $\delta_{j_1 j_2}^{i_1 i_2} = \delta_{i_1 j_1} \delta_{i_2 j_2} - \delta_{i_1 j_2} \delta_{i_2 j_1}$ гэсэн ерөнхий Кронекерийн тензор харгалзана. Энэ мэтчилэн үргэлжлүүлбэл гурван нүдний урттай хос ба-

ганын хувьд стандарт Юнгийн хүснэгт $\begin{bmatrix} i_1 & j_1 \\ i_2 & j_2 \\ i_3 & j_3 \end{bmatrix}$ болох бөгөөд ерөнхий Кронекерийн тензорыг

$$\delta_{j_1 j_2 j_3}^{i_1 i_2 i_3} = \begin{vmatrix} \delta_{i_1 j_1} & \delta_{i_1 j_2} & \delta_{i_1 j_3} \\ \delta_{i_2 j_1} & \delta_{i_2 j_2} & \delta_{i_2 j_3} \\ \delta_{i_3 j_1} & \delta_{i_3 j_2} & \delta_{i_3 j_3} \end{vmatrix} \quad (36)$$

хэлбэртэйгээр байгуулна. Жишээлбэл $\begin{bmatrix} i_1 & i_2 & i_3 \\ i_5 & i_7 & \\ i_6 & i_8 & \end{bmatrix}$

гэсэн стандарт Юнгийн хүснэгтэд $\delta_{i_2 i_7 i_8}^{i_1 i_5 i_6} \delta_{i_4}^{i_3}$ гэсэн изотроп тензор харгалзуулна. Стандарт Юнгийн хүснэгт болгон нь шугаман үл хамаарах изотроп тензор өгөх учраас n эрэмбийн хувьд ялгаатай стандарт Юнгийн хүснэгтийн тоо $Q^{(n)}$ нь шугаман үл хамаарах изотроп тензорын тоог өгөх ба энэ тоог Гукийн томъёо ашиглан тооцоолж болно (хавсралт C - г үзнэ үү). Тооцооны үр дүнг хүснэгт 2 - т үзүүлэв.

1. Хоёрдугаар эрэмбийн тензор.

Энэ тохиолдолд хүснэгт 1 - д үзүүлсэн Юнгийн хүснэгтэд харгалзах тензор нь Кронекерийн тензор $\delta_{i_1 i_2}$ болно. Матриц $\mathbf{S}^{(2)}$ ганц тоо бөгөөд $\mathbf{S}^{(2)} = \delta_{i_1 i_2} \delta_{i_1 i_2} = 3$ болно. Тэгшитгэл (34) ёсоор $\mathbf{M}^{(2)} = 1/3$ буюу чиглэл тодорхойлох косинус функций дундаж утга

$$I^{(2)} = \frac{1}{3} \delta_{i_1 i_2} \delta_{\lambda_1 \lambda_2} \quad (37)$$

гэж олдоно. Жишээлбэл $\langle l_{xX} l_{xX} \rangle = I_{xx;XX}^{(2)} = (1/3) \delta_{xx} \delta_{XX} = 1/3$ нь бидний өмнө олсон утга (18) - тай тохирч байна.

2. Дөрөвдүгээр эрэмбийн тензор.

Хүснэгт 2 - оос үзвэл $N^{(4)}$ тооны изотроп тензорууд нь бүгд шугаман үл хамаарах байна. Тиймээс бид шугаман үл хамаарах изотроп тензоруудыг заавал Смидтийн аргаар сонгох шаардлагагүй. Гэвч Смидтийн аргын жишээ болгох үүднээс Юнгийн хүснэгтийг яаж ашиглахыг харуулъя. Хүснэгт 1 - ээс үзвэл (4), (2, 2) гэсэн хоёр өөр Юнгийн диаграм байгуулж болох бөгөөд эхний диаграмд нэг дараагийн диаграмд хоёр стандарт Юнгийн хүснэгт харгалзана. Тодруулбал

$$\begin{bmatrix} i_1 & i_2 & i_3 & i_4 \\ i_3 & i_4 & & \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} i_1 & i_2 \\ i_3 & i_4 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} i_1 & i_3 \\ i_2 & i_4 \end{bmatrix}$$

² Юнгийн хүснэгтийн талаар дэлгэрэнгүйг хавсралт - B - ээс үзнэ үү.

Тензорын эрэмбэ	Юнгийн диаграм	Изотроп тензор
1	байхгүй	байхгүй
2		$\delta_{i_1 i_2}$
3		$\epsilon_{i_1 i_2 i_3}$
4		Илэрхийлэл (39)
5		Илэрхийлэл (46)
6		Хүснэгт 3 - д үзүүлэв
7		Хүснэгт 5 - д үзүүлэв
8		эх сурвалж [18, 21]
9		эх сурвалж [22]

Хүснэгт 1: Үл хамаарах изотроп тензорт харгалзах Юнгийн диаграмыг нэгээс есдүгээр эрэмбийн тензорын хувьд үзүүлэв. Харгалзах изотроп тензор, түүнийг хаанаас үзэж болохыг сүүлийн багананд бичлээ.

n	1	2	3	4	5	6	7	8
$N^{(n)}$	-	1	1	3	10	15	105	105
$Q^{(n)}$	-	1	1	3	6	15	36	91

Хүснэгт 2: Шугаман хамаарах ба шугаман үл хамаарах изотроп тензорын тоо $N^{(n)}$ ба $Q^{(n)}$.

болно. Эдгээр стандарт Юнгийн хүснэгтэд харгалзах үл хамаарах изотроп тензорууд нь

$$\begin{aligned} &\delta_{i_1 i_2} \delta_{i_3 i_4}, \\ &\delta_{i_1 i_2} \delta_{i_3 i_4} - \delta_{i_1 i_4} \delta_{i_2 i_3}, \\ &\delta_{i_1 i_3} \delta_{i_2 i_4} - \delta_{i_1 i_4} \delta_{i_2 i_3} \end{aligned} \quad (38)$$

гэж олдоно. Эндээс изотроп тензор (38) - ыг хялбараар бид

$$\begin{aligned} f_1^{(4)} &= \delta_{i_1 i_2} \delta_{i_3 i_4}, \\ f_2^{(4)} &= \delta_{i_1 i_3} \delta_{i_2 i_4}, \\ f_3^{(4)} &= \delta_{i_1 i_4} \delta_{i_2 i_3} \end{aligned} \quad (39)$$

гэж сонгож болно. Изотроп тензор $g_t^{(4)}$ нь (39) - тэй хэлбэрийн хувьд ижил бөгөөд лабораторид бэхлэгдсэн тооллын системийн i индекс молекулд бэхлэгдсэн тооллын системийн λ индексээр солиг-

доно. Цаашилбал $\mathbf{S}^{(4)}$ матриц

$$\mathbf{S}^{(4)} = \begin{pmatrix} 9 & 3 & 3 \\ 3 & 9 & 3 \\ 3 & 3 & 9 \end{pmatrix} \quad (40)$$

хэлбэртэй олдоно. Улмаар $I^{(4)}$ нь

$$I^{(4)} = \frac{1}{30} \begin{pmatrix} \delta_{i_1 i_2} \delta_{i_3 i_4} \\ \delta_{i_1 i_3} \delta_{i_2 i_4} \\ \delta_{i_1 i_4} \delta_{i_2 i_3} \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} 4 & -1 & -1 \\ -1 & 4 & -1 \\ -1 & -1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta_{\lambda_1 \lambda_2} \delta_{\lambda_3 \lambda_4} \\ \delta_{\lambda_1 \lambda_3} \delta_{\lambda_2 \lambda_4} \\ \delta_{\lambda_1 \lambda_4} \delta_{\lambda_2 \lambda_3} \end{pmatrix} \quad (41)$$

хэлбэртэй илэрхийлэгдэнэ. Жишээлбэл

$$\begin{aligned} \langle l_{xX} l_{xX} l_{xX} l_{xX} \rangle &= I_{xxxx;XXXX}^{(4)} \\ &= \frac{1}{30} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 & -1 & -1 \\ -1 & 4 & -1 \\ -1 & -1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{5} \end{aligned} \quad (42)$$

утга нь өмнөх аргын өгсөн хариу (28) - тай тохирч байна.

3. Зургадугаар эрэмбийн тензор.

$N^{(6)}$ нь шугаман үл хамаарах тензорын тоо $Q^{(6)}$ - тай тэнцүү байна. Тиймээс бид Юнгийн хүснэгт

ашиглах шаардлагагүй. Гурван Кронекерийн тензорын бүх боломжит хоорондоо ялгаатай тензор үржвэрээр тодорхойлогдох тензорууд нь шугаман

үл хамаарах байна. Эдгээр шугаман үл хамаарах изотроп тензорыг хүснэгт 3 - д үзүүлэв. Хялбархан матриц үйлдэл хийж $\mathbf{M}^{(6)}$ - г тооцоолбол

$$\mathbf{M}^{(6)} = \frac{1}{210} \begin{pmatrix} 16 & -5 & -5 & -5 & 2 & 2 & -5 & 2 & 2 & 2 & 2 & -5 & 2 & 2 & -5 \\ -5 & 16 & -5 & 2 & -5 & 2 & 2 & 2 & -5 & -5 & 2 & 2 & 2 & -5 & 2 \\ -5 & -5 & 16 & 2 & 2 & -5 & 2 & -5 & 2 & 2 & -5 & 2 & -5 & 2 & 2 \\ -5 & 2 & 2 & 16 & -5 & -5 & -5 & 2 & 2 & 2 & -5 & 2 & 2 & -5 & 2 \\ 2 & -5 & 2 & -5 & 16 & -5 & 2 & -5 & 2 & -5 & 2 & 2 & 2 & 2 & -5 \\ 2 & 2 & -5 & -5 & -5 & 16 & 2 & 2 & -5 & 2 & 2 & -5 & -5 & 2 & 2 \\ -5 & 2 & 2 & -5 & 2 & 2 & 16 & -5 & -5 & -5 & 2 & 2 & -5 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & -5 & 2 & -5 & 2 & -5 & 16 & -5 & 2 & -5 & 2 & 2 & 2 & -5 \\ 2 & -5 & 2 & 2 & 2 & -5 & -5 & -5 & 16 & 2 & 2 & -5 & 2 & -5 & 2 \\ 2 & -5 & 2 & 2 & -5 & 2 & -5 & 2 & 2 & 16 & -5 & -5 & -5 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & -5 & -5 & 2 & 2 & 2 & -5 & 2 & -5 & 16 & -5 & 2 & -5 & 2 \\ -5 & 2 & 2 & 2 & 2 & -5 & 2 & 2 & -5 & -5 & -5 & 16 & 2 & 2 & -5 \\ 2 & 2 & -5 & 2 & 2 & -5 & -5 & 2 & 2 & -5 & 2 & 2 & 16 & -5 & -5 \\ 2 & -5 & 2 & -5 & 2 & 2 & 2 & 2 & -5 & 2 & -5 & 2 & -5 & 16 & -5 \\ -5 & 2 & 2 & 2 & -5 & 2 & 2 & -5 & 2 & 2 & 2 & -5 & -5 & -5 & 16 \end{pmatrix} \quad (43)$$

гэж илэрхийлэгдэнэ. Дараагийн тэгш эрэмбэ болох наймдугаар эрэмбийн тензорын дундаж утгыг эх сурвалж [18] - д тооцоолсон байна.

V.2. Сондгой эрэмбийн тензор

Сондгой эрэмбийн тензорын хувьд Юнгийн диаграмд тавигдах зөвхөн ганц нөхцөл байна. Үүнд

1. Юнгийн диаграмын эхний багана гурван нүдтэй байна. Үлдсэн $n - 3$ нүд нь тэгш $n - 3$ эрэмбийн тензорт харгалзах Юнгийн диаграмтай адил байна.

Жишээлбэл есдүгээр эрэмбийн хувьд гурван ялгаатай Юнгийн диаграм байх ба хүснэгт 1 - д үзүүлсэн ёсоор эдгээр гурван Юнгийн диаграмыг зургадугаар эрэмбийн гурван Юнгийн диаграмын урд босоо гурван нүдтэй багана нэмж үүсгэнэ. Дээр дурдсан ёсоор Юнгийн диаграмд харгалзах ялгаатай стандарт Юнгийн хүснэгт бүрд бие биенээсээ шугаман үл хамаарах изотроп тензор оноож болно. Уг оноолт тун энгийн. Эхний баганад Леви-Чивитагийн тензор онооно. Харин үлдсэн хэсэг нь $n - 3$ тэгш эрэмбийн тензорын оноолттой ижил байна. Жишээ татвал долдугаар эрэмбийн

$\begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline i_1 & i_2 & i_3 & i_4 & i_5 \\ \hline i_6 & & & & \\ \hline i_7 & & & & \\ \hline \end{array}$ гэсэн Юнгийн хүснэгтэд $\epsilon_{i_1 i_6 i_7} \delta_{i_2 i_3} \delta_{i_4 i_5}$ гэсэн изотроп тензор харгалзана.

4. Нэгдүгээр эрэмбийн тензор.

Нэгдүгээр эрэмбийн хувьд цор ганц Юнгийн диаграм болох $\square$ нь бидний дээр тодорхойлсон нөхцөлийг хангахгүй. Тиймээс энэ тохиолдолд ямар ч изотроп тензор оршин байхгүй. Мөн нэгдүгээр эрэмбийн тензорын хувьд дундаж утга үргэлж тэг байна.

5. Гуравдугаар эрэмбийн тензор.

Гуравдугаар эрэмбийн тензорын хувьд хүснэгт 1 - д үзүүлсэн ёсоор зөвхөн нэг Юнгийн диаграм ба стандарт Юнгийн хүснэгт тодорхойлогддоно. Үүнд харгалзах изотроп тензор нь $\epsilon_{i_1 i_2 i_3}$ байх нь ойлгомжтой. Тиймээс

$$\mathbf{S}^{(3)} = \epsilon_{i_1 i_2 i_3} \epsilon_{i_1 i_2 i_3} = 6 \quad (44)$$

бөгөөд

$$\mathbf{M}^{(3)} = \frac{1}{6}, \quad \text{буюу} \quad I^{(3)} = \frac{1}{6} \epsilon_{i_1 i_2 i_3} \epsilon_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} \quad (45)$$

болохыг хялбархан тооцоолж болно.

6. Тавдугаар эрэмбийн тензор.

Тавдугаар эрэмбэ бол хамгийн эхний $N^{(n)} \neq Q^{(n)}$ байх эрэмбэ юм. Тиймээс бид стандарт Юнгийн хүснэгт ашиглан үл хамаарах изотроп тензор олох шаардлагатай. Леви-Чивитагийн болон

q	$f_q^{(6)}$	q	$f_q^{(6)}$	q	$f_q^{(6)}$	q	$f_q^{(6)}$	q	$f_q^{(6)}$
1	$\delta_{i_1 i_2} \delta_{i_3 i_4} \delta_{i_5 i_6}$	4	$\delta_{i_1 i_3} \delta_{i_2 i_4} \delta_{i_5 i_6}$	7	$\delta_{i_1 i_4} \delta_{i_2 i_3} \delta_{i_5 i_6}$	10	$\delta_{i_1 i_5} \delta_{i_2 i_3} \delta_{i_4 i_6}$	13	$\delta_{i_1 i_6} \delta_{i_2 i_3} \delta_{i_4 i_5}$
2	$\delta_{i_1 i_2} \delta_{i_3 i_5} \delta_{i_4 i_6}$	5	$\delta_{i_1 i_3} \delta_{i_2 i_5} \delta_{i_4 i_6}$	8	$\delta_{i_1 i_4} \delta_{i_2 i_5} \delta_{i_3 i_6}$	11	$\delta_{i_1 i_5} \delta_{i_2 i_4} \delta_{i_3 i_6}$	14	$\delta_{i_1 i_6} \delta_{i_2 i_4} \delta_{i_3 i_5}$
3	$\delta_{i_1 i_2} \delta_{i_3 i_6} \delta_{i_4 i_5}$	6	$\delta_{i_1 i_3} \delta_{i_2 i_6} \delta_{i_4 i_5}$	9	$\delta_{i_1 i_4} \delta_{i_2 i_6} \delta_{i_3 i_5}$	12	$\delta_{i_1 i_5} \delta_{i_2 i_6} \delta_{i_3 i_4}$	15	$\delta_{i_1 i_6} \delta_{i_2 i_5} \delta_{i_3 i_4}$

Хүснэгт 3: Зургадугаар эрэмбийн үл хамаарах изотроп тензорууд

Кронекерийн индексүүдийг хооронд нь сэлгэх аргаар бүх боломжит изотроп тензоруудыг байгуулбал хүснэгт 4 - д үзүүлсэн арван изотроп тензор бичигдэнэ. Энэхүү арван тензор нь бие биенээсээ шугаман хамааралтай юм. Үүнээс шугаман үл хамаарах зургаан изотроп тензор сонгохын тулд хүснэгт 1 - д үзүүлсэн тавдугаар эрэмбэд харгалзах Юнгийн диаграмаас зургаан ширхэг стандарт Юнгийн хүснэгтийг дараах байдлаар байгуулъя.

i_1	i_4	i_5
i_2		
i_3		
i_1	i_2	i_5
i_3		
i_4		

i_1	i_3	i_5
i_2		
i_4		
i_1	i_2	i_4
i_3		
i_5		

i_1	i_3	i_4
i_2		
i_5		
i_1	i_2	i_3
i_4		
i_5		

Эдгээр стандарт Юнгийн хүснэгтэд харгалзах изотроп тензорууд нь

$$\begin{aligned} f_1^{(5)} &= \epsilon_{i_1 i_2 i_3} \delta_{i_4 i_5}, & f_2^{(5)} &= \epsilon_{i_1 i_2 i_4} \delta_{i_3 i_5}, \\ f_3^{(5)} &= \epsilon_{i_1 i_2 i_5} \delta_{i_3 i_4}, & f_4^{(5)} &= \epsilon_{i_1 i_3 i_4} \delta_{i_2 i_5}, \\ f_5^{(5)} &= \epsilon_{i_1 i_3 i_5} \delta_{i_2 i_4}, & f_6^{(5)} &= \epsilon_{i_1 i_4 i_5} \delta_{i_2 i_3} \end{aligned} \quad (46)$$

хэлбэртэй илэрхийлэгдэж байна. Тэгвэл дундаж утга [24]

$$I^{(n)} = \frac{1}{30} \begin{pmatrix} \epsilon_{i_1 i_2 i_3} \delta_{i_4 i_5} \\ \epsilon_{i_1 i_2 i_4} \delta_{i_3 i_5} \\ \epsilon_{i_1 i_2 i_5} \delta_{i_3 i_4} \\ \epsilon_{i_1 i_3 i_4} \delta_{i_2 i_5} \\ \epsilon_{i_1 i_3 i_5} \delta_{i_2 i_4} \\ \epsilon_{i_1 i_4 i_5} \delta_{i_2 i_3} \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} 3 & -1 & -1 & 1 & 1 & 0 \\ -1 & 3 & -1 & -1 & 0 & 1 \\ -1 & -1 & 3 & 0 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 0 & 3 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & -1 & 3 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} \delta_{\lambda_4 \lambda_5} \\ \epsilon_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_4} \delta_{\lambda_3 \lambda_5} \\ \epsilon_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_5} \delta_{\lambda_3 \lambda_4} \\ \epsilon_{\lambda_1 \lambda_3 \lambda_4} \delta_{\lambda_2 \lambda_5} \\ \epsilon_{\lambda_1 \lambda_3 \lambda_5} \delta_{\lambda_2 \lambda_4} \\ \epsilon_{\lambda_1 \lambda_4 \lambda_5} \delta_{\lambda_2 \lambda_3} \end{pmatrix} \quad (47)$$

гэж олдоно.

7. Долдугаар эрэмбийн тензор.

Долдугаар эрэмбийн тензорын хувьд 105 изотроп тензорын 36 нь бие биенээсээ үл хамаарах байна. Хүснэгт 1 - д үзүүлсэн хоёр Юнгийн диаграмд харгалзах бие биеэсээ үл хамаарах изотроп тензоруудыг хүснэгт 5 - д үзүүлэв. Эдгээр изотроп тензоруудыг ашиглан $\mathbf{M}^{(7)}$ - ийг тооцоолж болно. Хэмжээний хувьд 36×36 гэсэн том матриц учир бид энд оруулсангүй бөгөөд ил хэлбэрийг нь эх сурвалж [17] - оос үзэж болно.

Цаашид ес ба арван нэгдүгээр эрэмбийн тензорын хувьд шугаман үл хамаарах изотроп тензор ашиглан $I^{(9)}$, $I^{(11)}$ - ийг зарчмын хувьд бодож болно. Гэвч тооцоо нь маш ярвигтай болно. Харин шугаман хамаарах изотроп тензор ашиглан $I^{(9)}$, $I^{(11)}$ - ийг бодож болох бөгөөд энэхүү аргыг [22] - д үзүүлжээ.

VI. Тензор хэмжигдэхүүний дундаж утгыг эргэлтийн инвариантаар илэрхийлэх нь

Бид өмнөх хэсэгт тензор хэмжигдэхүүний дундаж утгыг хоёр ба гуравдугаар эрэмбийн изотроп тензоруудын тензор үржвэрийн нийлбэр хэлбэртэй илэрхийлсэн (илэрхийлэл (30) - ыг үз). Гэвч оптикийн спектроскопид ихэвчлэн тензор үржвэр хэлбэртэй илэрхийлэгддэг тензорын дундаж утгыг олох шаардлага үүсдэг бөгөөд ийм хэлбэрийн дундаж утгыг эргэлтийн инвариантаар илэрхийлэх нь зохимжтой байдаг. Тодруулбал бид өмнөх II дүгээр хэсэгт аяндаа цацрах Раманы сарнил хэрхэн $\alpha_{i_1 i_2} \alpha_{i_3 i_4}$ тензорын дундаж утга олох бодлогод хүргэж буйг тайлбарласан билээ. Тиймээс бид энэ хэсэгт хоёр тензорын тензор үржвэр хэлбэртэй илэрхийлэгддэг тензорын дундаж утгыг хэрхэн эргэлтийн инвариантаар илэрхийлж болохыг үзье.

Өнцгийн моментын онол ёсоор $SO(3)$ эргэлтийн бүлгийн дурын эмхэтгэгдэх төлөөлөл D - г үл эм-

q	$f_q^{(5)}$	q	$f_q^{(5)}$	q	$f_q^{(5)}$	q	$f_q^{(5)}$	q	$f_q^{(5)}$
1	$\epsilon_{i_1 i_2 i_3} \delta_{i_4 i_5}$	3	$\epsilon_{i_1 i_2 i_5} \delta_{i_3 i_4}$	5	$\epsilon_{i_1 i_3 i_5} \delta_{i_2 i_4}$	7	$\epsilon_{i_2 i_3 i_4} \delta_{i_1 i_5}$	9	$\epsilon_{i_2 i_4 i_5} \delta_{i_1 i_3}$
2	$\epsilon_{i_1 i_2 i_4} \delta_{i_3 i_5}$	4	$\epsilon_{i_1 i_3 i_4} \delta_{i_2 i_5}$	6	$\epsilon_{i_1 i_4 i_5} \delta_{i_2 i_3}$	8	$\epsilon_{i_2 i_3 i_5} \delta_{i_1 i_4}$	10	$\epsilon_{i_3 i_4 i_5} \delta_{i_1 i_2}$

Хүснэгт 4: Тавдугаар эрэмбийн шугаман хамаарал бүхий изотроп тензорууд

q	$f_q^{(7)}$	q	$f_q^{(7)}$	q	$f_q^{(7)}$	q	$f_q^{(7)}$
1	$\epsilon_{i_1 i_2 i_3} \delta_{i_4 i_5} \delta_{i_6 i_7}$	10	$\epsilon_{i_1 i_2 i_6} \delta_{i_3 i_4} \delta_{i_5 i_7}$	19	$\epsilon_{i_1 i_3 i_5} \delta_{i_2 i_4} \delta_{i_6 i_7}$	28	$\epsilon_{i_1 i_4 i_5} \delta_{i_2 i_3} \delta_{i_6 i_7}$
2	$\epsilon_{i_1 i_2 i_3} \delta_{i_4 i_6} \delta_{i_5 i_7}$	11	$\epsilon_{i_1 i_2 i_6} \delta_{i_3 i_5} \delta_{i_4 i_7}$	20	$\epsilon_{i_1 i_3 i_5} \delta_{i_2 i_6} \delta_{i_4 i_7}$	29	$\epsilon_{i_1 i_4 i_5} \delta_{i_2 i_7} \delta_{i_3 i_6}$
3	$\epsilon_{i_1 i_2 i_3} \delta_{i_4 i_7} \delta_{i_5 i_6}$	12	$\epsilon_{i_1 i_2 i_6} \delta_{i_3 i_7} \delta_{i_4 i_5}$	21	$\epsilon_{i_1 i_3 i_5} \delta_{i_2 i_7} \delta_{i_4 i_6}$	30	$\epsilon_{i_1 i_4 i_6} \delta_{i_2 i_3} \delta_{i_5 i_7}$
4	$\epsilon_{i_1 i_2 i_4} \delta_{i_3 i_5} \delta_{i_6 i_7}$	13	$\epsilon_{i_1 i_2 i_7} \delta_{i_3 i_4} \delta_{i_5 i_6}$	22	$\epsilon_{i_1 i_3 i_6} \delta_{i_2 i_4} \delta_{i_5 i_7}$	31	$\epsilon_{i_1 i_4 i_6} \delta_{i_2 i_7} \delta_{i_3 i_5}$
5	$\epsilon_{i_1 i_2 i_4} \delta_{i_3 i_6} \delta_{i_5 i_7}$	14	$\epsilon_{i_1 i_2 i_7} \delta_{i_3 i_5} \delta_{i_4 i_6}$	23	$\epsilon_{i_1 i_3 i_6} \delta_{i_2 i_5} \delta_{i_4 i_7}$	32	$\epsilon_{i_1 i_4 i_7} \delta_{i_2 i_3} \delta_{i_5 i_6}$
6	$\epsilon_{i_1 i_2 i_4} \delta_{i_3 i_7} \delta_{i_5 i_6}$	15	$\epsilon_{i_1 i_2 i_7} \delta_{i_3 i_6} \delta_{i_4 i_5}$	24	$\epsilon_{i_1 i_3 i_6} \delta_{i_2 i_7} \delta_{i_4 i_5}$	33	$\epsilon_{i_1 i_4 i_7} \delta_{i_2 i_6} \delta_{i_3 i_5}$
7	$\epsilon_{i_1 i_2 i_5} \delta_{i_3 i_4} \delta_{i_6 i_7}$	16	$\epsilon_{i_1 i_3 i_4} \delta_{i_2 i_5} \delta_{i_6 i_7}$	25	$\epsilon_{i_1 i_3 i_7} \delta_{i_2 i_4} \delta_{i_5 i_6}$	34	$\epsilon_{i_1 i_5 i_6} \delta_{i_2 i_3} \delta_{i_4 i_7}$
8	$\epsilon_{i_1 i_2 i_5} \delta_{i_3 i_6} \delta_{i_4 i_7}$	17	$\epsilon_{i_1 i_3 i_4} \delta_{i_2 i_6} \delta_{i_5 i_7}$	26	$\epsilon_{i_1 i_3 i_7} \delta_{i_2 i_5} \delta_{i_4 i_6}$	35	$\epsilon_{i_1 i_5 i_7} \delta_{i_2 i_3} \delta_{i_4 i_6}$
9	$\epsilon_{i_1 i_2 i_5} \delta_{i_3 i_7} \delta_{i_4 i_6}$	18	$\epsilon_{i_1 i_3 i_4} \delta_{i_2 i_7} \delta_{i_5 i_6}$	27	$\epsilon_{i_1 i_3 i_7} \delta_{i_2 i_6} \delta_{i_4 i_5}$	36	$\epsilon_{i_1 i_6 i_7} \delta_{i_2 i_3} \delta_{i_4 i_5}$

Хүснэгт 5: Долдугаар эрэмбийн бие биеээсээ үл хамаарах 36 изотроп тензорууд

хэтгэгдэх төлөөлөл $D^{(\tau, J)}$ - ийн шулуун нийлбэр хэлбэрт бичиж болдог. Тухайлбал

$$D = \bigoplus_{J=0}^n \bigoplus_{\tau=1}^{\tau_n^{(J)}} D^{(\tau, J)} \quad (48)$$

бөгөөд энд $0 \leq J \leq n$ нь өнцгийн моментод харгалзах квантын тоо харин $1 \leq \tau \leq \tau_n^{(J)}$ нь нэг ижил J квантын тоонд харгалзах ялгаатай төлөвийн дэс дугаар буюу мөхөлтийн зэрэг юм. Харин $\tau_n^{(J)}$ нь мөхөлтийн тоо [25, 26] бөгөөд J квантын

тоонд харгалзах ялгаатай төлөөллийн тоог илэрхийлнэ. Өнцгийн моментыг нэмэх дүрэм [27, 28] ёсоор $J > J'$ байх хоёр өнцгийн моментыг нэмэхэд нийлбэр өнцгийн моментыг боломжит утга $J - J'$, $J - J' + 1, \dots, J + J'$ байна. Тэгвэл $J = 1$, $J' = 1$ тохиолдолд нийт системийн эмхэтгэгдэх төлөөлөл $D^{(1)} \otimes D^{(1)}$ нь

$$D^{(1)} \otimes D^{(1)} = D^{(0)} \oplus D^{(1)} \oplus D^{(2)} \quad (49)$$

гэж илэрхийлэгдэнэ. Харин дахин нэг $J'' = 1$ өнцгийн момент нэмбэл

$$\begin{aligned} (D^{(1)} \otimes D^{(1)}) \otimes D^{(1)} &= (D^{(0)} \oplus D^{(1)} \oplus D^{(2)}) \otimes D^{(1)} \\ &= (D^{(0)} \otimes D^{(1)}) \oplus (D^{(1)} \otimes D^{(1)}) \oplus (D^{(2)} \otimes D^{(1)}) \\ &= D^{(1)} \oplus D^{(0)} \oplus D^{(1)} \oplus D^{(2)} \oplus D^{(1)} \oplus D^{(2)} \oplus D^{(3)} \\ &= D^{(0)} \oplus 3D^{(1)} \oplus 2D^{(2)} \oplus D^{(3)} \end{aligned} \quad (50)$$

буюу мөхөлтийн тоо нь $J = 0, 1, 2, 3$ - ын хувьд харгалзан $\tau_m = 1, 3, 2, 1$ байна.

Дээрх $SO(3)$ эргэлтийн бүлгийн үл эмхэтгэгдэх төлөөллийг тензор хэмжигдэхүүний хувьд хэрэглэвэл дурын n эрэмбийн тензор хэмжигдэхүүн $T(n)$ - ийг эргэлтийн бүлэг $SO(3)$ - ын үл эмхэтгэгдэх төлөөлөл болох үл эмхэтгэгдэх тензорууд $T_{\lambda_1 \dots \lambda_n}^{(\tau, J)}$ - ийн нийлбэр хэлбэртэй бичиж болно [29].

Өөрөөр хэлбэл

$$T_{\lambda_1 \dots \lambda_n}(n) = \sum_{J=0}^n \sum_{\tau=1}^{\tau_n^{(J)}} T_{\lambda_1 \dots \lambda_n}^{(\tau, J)}. \quad (51)$$

Энд J нь задаргааны гишүүдийн дугаар бөгөөд J дугаар задаргааны гишүүн нь $2J + 1$ ширхэг үл хамаарах хувьсагчаас хамаарна. Харин τ нь нэг J - ийн утгад харгалзах ялгаатай гишүүдийн дэс дараа юм. Томъёо (51) нь (48) ерөнхий томъёоны тензор хэмжигдэхүүний хувьд бичигдсэн тухайн

тохиолдол юм.

Илэрхийлэл (51) - ийг бага эрэмбийн тензорын хувьд жишээ авч тайлбарлая. Тэг ба нэгдүгээр эрэмбийн тензорууд нь анхнаасаа эргэлтийн бүлгийн үл эмхэтгэгдэх төлөөлөл болдог учир задлах шаардлага байхгүй. Тодруулбал $T(0) = T^{(1,0)}$ ба $T_{\lambda_1}(1) = T_{\lambda_1}^{(1,1)}$ болно. Харин хоёрдугаар эрэмбийн тензорын задаргаа нь (49) дүгээр томъёо ёсоор [29]

$$T_{\lambda_1\lambda_2}(2) = T_{\lambda_1\lambda_2}^{(1,0)} + T_{\lambda_1\lambda_2}^{(1,1)} + T_{\lambda_1\lambda_2}^{(1,2)} \quad (52)$$

гэж олдох ба энд үл эмхэтгэгдэх тензорын ил хэлбэр

$$\begin{aligned} T_{\lambda_1\lambda_2}^{(1,0)} &= \frac{1}{3} T_{\lambda_3\lambda_3} \delta_{\lambda_1\lambda_2}, \\ T_{\lambda_1\lambda_2}^{(1,1)} &= \frac{1}{2} (T_{\lambda_1\lambda_2} - T_{\lambda_2\lambda_1}), \\ T_{\lambda_1\lambda_2}^{(1,2)} &= \frac{1}{2} (T_{\lambda_1\lambda_2} + T_{\lambda_2\lambda_1}) - \frac{1}{3} T_{\lambda_3\lambda_3} \delta_{\lambda_1\lambda_2} \end{aligned} \quad (53)$$

байна³. Энэ илэрхийллүүдээс үзвэл дээр дурдсан ёсоор $J = 0$ гишүүн 1 хувьсагчтай, $J = 1$ гишүүн 3 үл хамаарах хувьсагчтай, $J = 2$ гишүүн 5 үл хамаарах хувьсагчтай байна. Нийт үл хамаарах хувьсагчийн тоо нь $1+3+5 = 9$ болох бөгөөд энэ нь чухамдаа хоёрдугаар эрэмбийн тензор $3^2 = 9$ үл хамаарах хувьсагчтай байх шаардлагатай нийцэж байна. Гуравдугаар эрэмбийн тензорын хувьд задаргаа нь (50) дугаар томъёо ёсоор [7, 32]

$$\begin{aligned} T_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3}(3) &= T_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3}^{(1,0)} + T_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3}^{(1,1)} + T_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3}^{(2,1)} + T_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3}^{(3,1)} \\ &\quad + T_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3}^{(1,2)} + T_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3}^{(2,2)} + T_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3}^{(1,3)} \end{aligned} \quad (54)$$

гэж бичигдэх бөгөөд задаргааны гишүүдийг хавсралт D - д үзүүлэв. Үл хамаарах хувьсагчийн тоог тооцоолбол

$$\begin{aligned} 1 + 3(2 \times 1 + 1) + 2(2 \times 2 + 1) + (2 \times 3 + 1) \\ = 1 + 9 + 10 + 7 = 27 \end{aligned} \quad (55)$$

болох бөгөөд гуравдугаар эрэмбийн тензорын хувьсагчийн тоо 3^3 байхтай тохирч байна. Дөрөвдүгээр эрэмбийн тензорыг үл эмхэтгэгдэх тензороор задлах задаргааг эх сурвалж [33] - аас үзэж болно.

Үл эмхэтгэгдэх тензор задаргааны нэг чухал чанар бол ялгаатай J дугаар бүхий үл эмхэтгэгдэх тензорууд хоорондоо ортогонал байдаг. Өөрөөр хэлбэл ижил эрэмбийн үл эмхэтгэгдэх $T_{\lambda_1 \dots \lambda_n}^{(\tau, J)}$ ба $\bar{T}_{\lambda_1 \dots \lambda_n}^{(\tau', J')}$ тензоруудын үржвэр $T_{\lambda_1 \dots \lambda_n}^{(\tau, J)} \bar{T}_{\lambda_1 \dots \lambda_n}^{(\tau', J')}$ нь $J \neq J'$ тохиолдолд тэгтэй тэнцүү байдаг. Тэгвэл үүнийг ашиглан n эрэмбийн тензорын эргэлтийн

инвариантыг тодорхойлж болно. Жишээлбэл хоёрдугаар эрэмбийн $T_{\lambda_1\lambda_2}$ ба $\bar{T}_{\lambda_3\lambda_4}$ тензоруудын хувьд

$$\begin{aligned} T_{\lambda_1\lambda_2} \bar{T}_{\lambda_1\lambda_2} &= (T_{\lambda_1\lambda_2}^{(1,0)} + T_{\lambda_1\lambda_2}^{(1,1)} + T_{\lambda_1\lambda_2}^{(1,2)}) (\bar{T}_{\lambda_1\lambda_2}^{(1,0)} + \bar{T}_{\lambda_1\lambda_2}^{(1,1)} + \bar{T}_{\lambda_1\lambda_2}^{(1,2)}) \\ &= T_{\lambda_1\lambda_2}^{(1,0)} \bar{T}_{\lambda_1\lambda_2}^{(1,0)} + T_{\lambda_1\lambda_2}^{(1,1)} \bar{T}_{\lambda_1\lambda_2}^{(1,1)} + T_{\lambda_1\lambda_2}^{(1,2)} \bar{T}_{\lambda_1\lambda_2}^{(1,2)} \end{aligned} \quad (56)$$

гэсэн скаляр тодорхойлж болно. Скаляр тоо нь эргэлтэд өөрчлөгдөхгүй тул дээрх илэрхийллийн баруун гар талын гурван гишүүн нь тус бүрдээ эргэлтэд өөрчлөгдөхгүй тогтмол байна. Энэ гурван эргэлтийн инвариантыг анх Плакзек аяндаа цацрах Раманы сарнилыг судлах явцдаа туйлшралын тензор $\alpha_{\lambda_1\lambda_2}$ - ын хувьд тодорхойлсон [5]. Үүний ил хэлбэр нь дурын $T_{\lambda_1\lambda_2}$ ба $\bar{T}_{\lambda_3\lambda_4}$ тензоруудын хувьд

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^{(0)} &= T_{\lambda_1\lambda_2}^{(1,0)} \bar{T}_{\lambda_1\lambda_2}^{(1,0)} = \frac{1}{3} T_{\lambda_1\lambda_1} \bar{T}_{\lambda_2\lambda_2}, \\ \mathcal{G}^{(1)} &= T_{\lambda_1\lambda_2}^{(1,1)} \bar{T}_{\lambda_1\lambda_2}^{(1,1)} = \frac{2}{9} (T_{\lambda_1\lambda_2} \bar{T}_{\lambda_1\lambda_2} - T_{\lambda_1\lambda_2} \bar{T}_{\lambda_2\lambda_1}), \\ \mathcal{G}^{(2)} &= T_{\lambda_1\lambda_2}^{(1,2)} \bar{T}_{\lambda_1\lambda_2}^{(1,2)} = \frac{1}{2} (T_{\lambda_1\lambda_2} \bar{T}_{\lambda_1\lambda_2} + T_{\lambda_1\lambda_2} \bar{T}_{\lambda_2\lambda_1}) \\ &\quad - \frac{1}{3} T_{\lambda_1\lambda_1} \bar{T}_{\lambda_2\lambda_2} \end{aligned} \quad (57)$$

гэж тодорхойлогддог. Эндээс ажиглавал $T_{\lambda_1\lambda_2}$ ба $\bar{T}_{\lambda_3\lambda_4}$ тензоруудын аль нэгнийх нь диагоналийн элементүүдийн нийлбэр нь тэг байвал ($\text{Tr}(T) = 0$ эсвэл $\text{Tr}(\bar{T}) = 0$) Плакзекийн эргэлтийн инвариант $\mathcal{G}^{(0)} = 0$ байна. Харин $T_{\lambda_1\lambda_2}$ ба $\bar{T}_{\lambda_3\lambda_4}$ тензоруудын аль нэг нь тэгш хэмтэй бол ($T_{\lambda_1\lambda_2} = T_{\lambda_2\lambda_1}$ эсвэл $\bar{T}_{\lambda_1\lambda_2} = \bar{T}_{\lambda_2\lambda_1}$) $\mathcal{G}^{(1)} = 0$, эсрэг тэгш хэмтэй бол ($T_{\lambda_1\lambda_2} = -T_{\lambda_2\lambda_1}$ эсвэл $\bar{T}_{\lambda_1\lambda_2} = -\bar{T}_{\lambda_2\lambda_1}$) $\mathcal{G}^{(2)} = 0$ байна. Тэгэхлээр тензорын тэгш хэмээс шалтгаалан зарим эргэлтийн инвариант тэгтэй тэнцдэг учир онолын тооцоог ихээхэн хялбарчилдаг юм.

Энд нэг ажиглагдсан зүйл бол эргэлтийн бүлэг $SO(3)$ - ийн үл эмхэтгэгдэх төлөөллийг ашиглан дурын n эрэмбийн тензорын хувьд эргэлтийн инвариантын тоог тун хялбархан тогтоож байна. Жишээлбэл дөрөвдүгээр эрэмбийн тензор нь хоёр хоёрдугаар эрэмбийн тензорын тензор үржвэр хэлбэртэй бичигдэж болох тул (49) дүгээр томъёо ёсоор эргэлтийн инвариантын тоо нь $1^2 + 1^2 + 1^2 = 3$ байна. Мөн тавдугаар эрэмбийн тензорын хувьд (49), (50) дугаар томъёонуудыг ашиглавал эргэлтийн инвариантын тоо $1^2 + 1 \cdot 3 + 1 \cdot 2 = 6$ байна. Харин зургадугаар эрэмбийн тензорын хувьд (50) дугаар томъёо ёсоор эргэлтийн инвариантын тоо $1^2 + 3^2 + 2^2 + 1^2 = 15$ байна. Цаашилбал эргэлтийн инвариантын тоо нь үл хамаарах изотроп тензорын тоо $Q^{(n)}$ - тэй тэнцүү байхыг хялбархан харж болно. Тухайлбал хүснэгт 2 - оос үзвэл $Q^{(4)} = 3$, $Q^{(5)} = 6$, $Q^{(6)} = 15$ байх нь дээр тооцоолсон үр дүнтэй тохирч байна. Наймдугаар эрэмбийн эргэлтийн инвариантын тоог хэрхэн бодохыг хавсралт C - д үзүүлэв.

³ Тензорыг үл эмхэтгэгдэх тензороор задалж бичих аргыг үзэхийг хүсвэл эх сурвалж [30, 31] - ыг үзнэ үү.

Одоо аяндаа цацрах Раманы сарнилын томъёо (3) - д буй $\langle \alpha_{xx} \alpha_{xx}^* \rangle$ дундаж утгыг Плакзекийн

инвариантаар илэрхийлж бичье. Томъёо (5), (41) ёсоор

$$\begin{aligned} \langle \alpha_{xx} \alpha_{xx}^* \rangle &= \frac{1}{30} \begin{pmatrix} \delta_{xx} \delta_{xx} \\ \delta_{xx} \delta_{xx} \\ \delta_{xx} \delta_{xx} \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} 4 & -1 & -1 \\ -1 & 4 & -1 \\ -1 & -1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta_{\lambda_1 \lambda_2} \delta_{\lambda_3 \lambda_4} \\ \delta_{\lambda_1 \lambda_3} \delta_{\lambda_2 \lambda_4} \\ \delta_{\lambda_1 \lambda_4} \delta_{\lambda_2 \lambda_3} \end{pmatrix} \alpha_{\lambda_1 \lambda_2} \alpha_{\lambda_3 \lambda_4}^* \\ &= \frac{1}{15} (\alpha_{\lambda_1 \lambda_1} \alpha_{\lambda_2 \lambda_2}^* + \alpha_{\lambda_1 \lambda_2} \alpha_{\lambda_1 \lambda_2}^* + \alpha_{\lambda_1 \lambda_2} \alpha_{\lambda_2 \lambda_1}^*) \end{aligned} \quad (58)$$

болох бөгөөд (57) дугаар томъёонд $T_{\lambda_1 \lambda_2} = \alpha_{\lambda_1 \lambda_2}$, $\bar{T}_{\lambda_1 \lambda_2} = \alpha_{\lambda_1 \lambda_2}^*$ гэж орлуулбал дундаж утга

$$\langle \alpha_{xx} \alpha_{xx}^* \rangle = \frac{1}{15} (5\mathcal{G}^{(0)} + 2\mathcal{G}^{(2)}) \quad (59)$$

гэж бичигдэнэ. Орчин үед аяндаа цацрах Раманы сарнилын онолд Плакзекийн инвариантийн оронд дундаж туйлшрал $a^2 = \mathcal{G}^{(0)}/3$, антисимметр анизотроп $\delta^2 = 3\mathcal{G}^{(1)}/2$, симметр анизотроп $\gamma^2 = 3\mathcal{G}^{(2)}/2$ гэсэн инвариантуудыг ихэвчлэн ашигладаг. Тэгвэл

$$\langle \alpha_{xx} \alpha_{xx}^* \rangle = \frac{45a^2 + 4\gamma^2}{45} \quad (60)$$

гэж илэрхийлэгддэг. Энэхүү дундаж утга $\langle \alpha_{xx} \alpha_{xx}^* \rangle$ - ийг аяндаа цацрах Раманы сарнилын онолд хэрхэн ашиглаж буйг эх сурвалж [5] - аас (томъёо 5.5.22) үзэж болно.

VII. Дүгнэлт

Энэхүү өгүүлэлд тензор хэмжигдэхүүний гурван хэмжээст огторгуй дахь дундаж утга бодох нэгдүгээрт: тооллын системийн нэгж векторуудын ортогональ нормчлогдсон шинж чанарыг мөн эдгээр нэгж векторуудаас зохиогдсон адилтгалуудыг хэрэглэх; хоёрдугаарт: Эйлерийн өнцгийн тусламжтайгаар шууд интегралчлах; гуравдугаарт: тэгш хэмийн онол ашиглан үл хамаарах изотроп тензоруудыг сонгож тэдгээрийн шугаман нийлбэрт бичих зэрэг аргуудыг дэлгэрэнгүй тайлбарлаж, жишээ болгож аяндаа цацрах Раманы сарнилын онолд тааралдах дөрөвдүгээр эрэмбийн $\alpha_{i_1 i_2} \alpha_{i_3 i_4}^*$ тензорын $\alpha_{xx} \alpha_{xx}^*$ элементийн дундаж утгыг бодлоо. Түүнчлэн эргэлтийн инвариантын онолын үндэслэлийг тайлбарлаж өнцгийн моментын онолтой холбогдох сэжмийг аль болох энгийн байдлаар орууллаа. Энэхүү гарын авлага нь оптикийн спектроскопийн салбарт өргөн хэрэглэгддэг тензорын дундаж утга, түүнийг

бодох аргыг ойлгоход судлаач оюутнуудад үнэтэй хэрэглэгдэхүүн болно гэж гүнээ итгэж байна.

Талархал

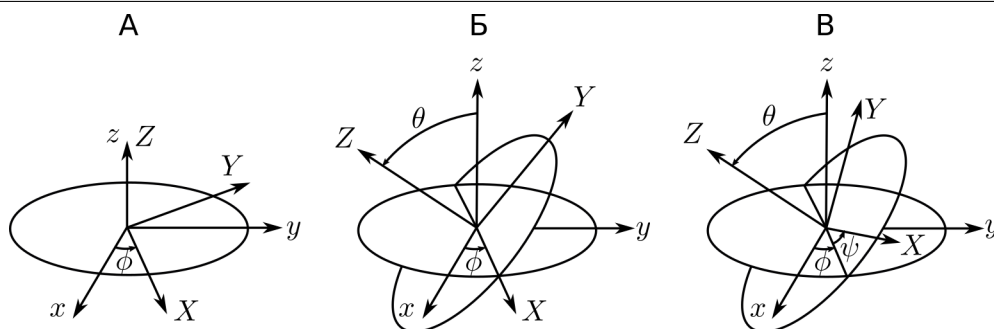
МУИС-ын дотоод санхүүжилттэй P2022-4375 төслийн хүрээнд энэхүү ажлыг гүйцэтгэв.

Хавсралт А: Эйлерийн өнцгүүд

Лабораторийн тооллын системтэй харьцангуй хатуу биетийн гурван хэмжээст огторгуй дахь чиглэлийг гурван параметр бүрэн тодорхойлдог. Зарчмын хувьд энэ параметруудийг маш олон янзаар сонгож болно. Физикт ялангуяа хэрэглээний механикт Эйлерийн гурван өнцгөөр хатуу биетийн гурван хэмжээст огторгуй дахь чиглэлийг тодорхойлдог. Учир нь хатуу биетийн огторгуй дахь дурын чиглэлийг өгөгдсөн гурван ялгаатай тэнхлэгийг тойруулан эргүүлсэн гурван дараалсан эргүүлэлтийн өнцгөөр илэрхийлж болно. Өгөгдсөн тэнхлэгүүдийн олон боломжоос шалтгаалан маш олон сонголт байдаг. Бид энэ өгүүлэлтээ Z - X - Z гэсэн хувилбарыг сонголоо. Энд X, Y, Z нь хатуу биед бэхлэгдсэн тооллын системийн гурван ортогонал тэнхлэг. Эйлерийн гурван өнцгөө ϕ, θ, ψ гэж тэмдэглэе. Тэгвэл зураг 2 - т үзүүлсэн ёсоор дараах гурван эргэлтээр Эйлерийн гурван өнцөг тодорхойлогдоно [11].

1. хатуу биед бэхлэгдсэн Z тэнхлэг тойруулан ϕ өнцгөөр эргүүлэх эргүүлэлт (зураг 2А),
2. хатуу биед бэхлэгдсэн X тэнхлэг тойруулан θ өнцгөөр эргүүлэх эргүүлэлт (зураг 2Б),
3. хатуу биед бэхлэгдсэн Z тэнхлэг тойруулан ψ өнцгөөр эргүүлэх эргүүлэлт (зураг 2В).

Эдгээр эргэлтүүдэд харгалзах эргүүлэлтийн матриц



Зураг 2: Эйлерийн өнцгийн Z-X-Z гэсэн хувилбарын дараалсан гурван эргүүлэлт.

$$R_\phi = \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad R_\theta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & \sin \theta \\ 0 & -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}, \quad R_\psi = \begin{pmatrix} \cos \psi & \sin \psi & 0 \\ -\sin \psi & \cos \psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (A1)$$

гэж тодорхойлогдоно. Энэ эргүүлэлтийн матрицуудын үржвэр нь чиглэл тодорхойлох косинус функцтэй $l = R_\psi R_\theta R_\phi$ хэлбэртэйгээр холбогдох бөгөөд үүний ил хэлбэр нь тэгшитгэл (17) болно.

Хавсралт В: Юнгийн хүснэгт

Юнгийн хүснэгт нь төлөөллийн онол⁴, геометр, алгебрт хэрэглэгддэг чухал дүрслэл юм. Үүнийг тайлбарлахын өмнө эхлээд Юнгийн диаграмыг тодорхойлъё. Юнгийн диаграм гэдэг нь дараах нөхцөлийг хангах шоо дөрвөлжин нүдний цуглуулга юм. Үүнд

1. Дөрвөлжин нүднүүдийг урдаас хойш мөр болгон зэрэгцүүлж өрнө. Өрөхдөө мөрүүдийн эхний нүдийг багана болгон тэгшилж өрнө,
2. Доод мөрийн нүдний тоо дээд мөрийн нүдний тооноос цөөн эсвэл тэнцүү байна.

Жишээлбэл

 гэсэн Юнгийн диаграмын эхний мөрөнд 5 нүд хоёрдугаар мөрөнд 3 нүд гуравдугаар мөрөнд 1 нүд тус тус байна. Түүнчлэн Юнгийн диаграм нь ижил n тооны зүйлийг дэд хэсгүүдэд бүлэглэх үйлдлийн зурган илэрхийлэл юм. Дээрх жишээн дээр үзүүлсэн Юнгийн диаграм нь 9 ижил зүйлийг $\{5, 3, 1\}$ болгон бүлэглэх үйлдлийг илэрхийлж байна.

⁴ Математикт өөрөөр дүрслэлийн онол гэх нь бий.

Харин Юнгийн хүснэгт нь дугаарлагдсан нүд бүхий Юнгийн диаграм юм. Цааш нарийвчилбал стандарт Юнгийн хүснэгт [34] нь урдаасаа хойш мөн дээрээсээ доош үргэлж өсөж байхаар дугаарлагдсан Юнгийн диаграм юм. Жишээлбэл

1	2	5	7	8
3	6	9		
4				

1	3	4	5	6
2	7	8		
9				

гэх мэт.

Хавсралт С: Үл хамаарах изотроп тензорын ба эргэлтийн инвариантын тоо

Өгөгдсөн λ Юнгийн диаграмд харгалзах стандарт Юнгийн хүснэгтийн тоог

$$F_\lambda = \frac{n!}{\prod_{i,j} h_\lambda(i,j)} \quad (C1)$$

гэсэн Гукийн томъёогоор боддог. Үүнд n нь Юнгийн диаграмын нийт нүдний тоо, $h_\lambda(i,j)$ нь (i,j) дүгээр нүдийг өөрийг нь оролцуулан түүнээс доош ба баруун талд орших нүднүүдийн нийлбэр тоо юм. Энэ $h_\lambda(i,j)$ тоог Гукийн тоо гэдэг. Жишээлбэл

Юнгийн диаграм

 - ний нүднүүдэд

харгалзах Гукийн тоог байрлуулбал

7	4	3	2	1
2				
1				

болох бөгөөд Гукийн томъёо (C1) - ийг ашиглавал $7!/(7 \cdot 4 \cdot 3 \cdot 2 \cdot 1 \cdot 2 \cdot 1) = 15$ болно. Удаах Юнгийн диаграм

 - н хувьд $7!/(5 \cdot 3 \cdot 2 \cdot 4 \cdot 2 \cdot 1 \cdot 1) = 21$ болно.

Тиймээс долдугаар эрэмбийн тензорын хувьд нийтдээ $15 + 21 = 36$ ширхэг стандарт Юнгийн

хүснэгтэд харгалзах бие биенээсээ үл хамаарах 36 изотроп тензор байна.

Түүнчлэн үл хамаарах изотроп тензорын тоо $Q^{(n)}$ эргэлтийн инвариантын тоотой тэнцүү байхыг VI дугаар хэсэгт дурдсан ба эргэлтийн инвариантын тоог өнцгийн моментын онол ашиглан хялбархан тооцоолж болно. Жишээ болгож хоёр ширхэг дөрөвдүгээр эрэмбийн тензор үржвэр хэлбэртэй наймдугаар эрэмбийн тензор авъя. $J = 2$, $J' = 2$ хоёр өнцгийн моментын нийлбэрийг үл эмхэтгэгдэх төлөөллийн шууд нийлбэрт бичвэл

$$\begin{aligned} (D^{(0)} \oplus D^{(1)} \oplus D^{(2)}) \otimes (D^{(0)} \oplus D^{(1)} \oplus D^{(2)}) \\ = 3D^{(0)} \oplus 6D^{(1)} \oplus 6D^{(2)} \oplus 3D^{(3)} \oplus D^{(4)} \end{aligned} \quad (C2)$$

болно. Мөхөлтийн тооны квадратуудын нийлбэр $3^2 + 6^2 + 6^2 + 3^2 + 1^2 = 91$ учир эргэлтийн инвариантын тоо 91 байна. Энэ тоо мөн Гукийн томъёогоор бодсон үл хамаарах изотроп тензорын тоо $Q^{(8)} = 91$ - тэй тохирч байна.

Хавсралт D: Гуравдугаар эрэмбийн үл эмхэтгэгдэх тензор

Гуравдугаар эрэмбийн үл эмхэтгэгдэх тензорыг доор үзүүлэв.

$$\begin{aligned} T_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}^{(1,0)} &= \frac{1}{6} \epsilon_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} \epsilon_{\lambda_4 \lambda_5 \lambda_6} T_{\lambda_4 \lambda_5 \lambda_6}, \\ T_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}^{(1,1)} &= \frac{1}{10} \delta_{\lambda_1 \lambda_2} (4T_{\lambda_4 \lambda_4 \lambda_3} - T_{\lambda_4 \lambda_3 \lambda_4} - T_{\lambda_3 \lambda_4 \lambda_4}), \\ T_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}^{(2,1)} &= \frac{1}{10} \delta_{\lambda_1 \lambda_3} (-T_{\lambda_4 \lambda_4 \lambda_2} + 4T_{\lambda_4 \lambda_2 \lambda_4} - T_{\lambda_2 \lambda_4 \lambda_4}), \\ T_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}^{(3,1)} &= \frac{1}{10} \delta_{\lambda_2 \lambda_3} (-T_{\lambda_4 \lambda_4 \lambda_1} - T_{\lambda_4 \lambda_1 \lambda_4} + 4T_{\lambda_1 \lambda_4 \lambda_4}), \\ T_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}^{(1,2)} &= \frac{1}{6} \epsilon_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_4} (2\epsilon_{\lambda_5 \lambda_6 \lambda_4} T_{\lambda_5 \lambda_6 \lambda_3} + 2\epsilon_{\lambda_5 \lambda_6 \lambda_3} T_{\lambda_5 \lambda_6 \lambda_4} \\ &\quad + \epsilon_{\lambda_5 \lambda_6 \lambda_4} T_{\lambda_3 \lambda_5 \lambda_6} + \epsilon_{\lambda_5 \lambda_6 \lambda_3} T_{\lambda_4 \lambda_5 \lambda_6} - 2\delta_{\lambda_3 \lambda_4} \epsilon_{\lambda_5 \lambda_6 \lambda_7} T_{\lambda_5 \lambda_6 \lambda_7}), \\ T_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}^{(2,2)} &= \frac{1}{6} \epsilon_{\lambda_2 \lambda_3 \lambda_4} (2\epsilon_{\lambda_5 \lambda_6 \lambda_4} T_{\lambda_1 \lambda_5 \lambda_6} + 2\epsilon_{\lambda_5 \lambda_6 \lambda_1} T_{\lambda_4 \lambda_5 \lambda_6} \\ &\quad + \epsilon_{\lambda_5 \lambda_6 \lambda_4} T_{\lambda_5 \lambda_6 \lambda_1} + \epsilon_{\lambda_5 \lambda_6 \lambda_1} T_{\lambda_5 \lambda_6 \lambda_1} - 2\delta_{\lambda_1 \lambda_4} \epsilon_{\lambda_5 \lambda_6 \lambda_7} T_{\lambda_5 \lambda_6 \lambda_7}), \\ T_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}^{(1,3)} &= \frac{1}{6} (T_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} + T_{\lambda_1 \lambda_3 \lambda_2} + T_{\lambda_2 \lambda_1 \lambda_3} + T_{\lambda_2 \lambda_3 \lambda_1} + T_{\lambda_3 \lambda_1 \lambda_2} + T_{\lambda_3 \lambda_2 \lambda_1}) \\ &\quad - \frac{1}{15} [\delta_{\lambda_1 \lambda_2} (T_{\lambda_4 \lambda_4 \lambda_3} + T_{\lambda_4 \lambda_3 \lambda_4} + T_{\lambda_3 \lambda_4 \lambda_4}) + \delta_{\lambda_1 \lambda_3} (T_{\lambda_4 \lambda_4 \lambda_2} + T_{\lambda_4 \lambda_2 \lambda_4} + T_{\lambda_2 \lambda_4 \lambda_4}) \\ &\quad + \delta_{\lambda_2 \lambda_3} (T_{\lambda_4 \lambda_4 \lambda_1} + T_{\lambda_4 \lambda_1 \lambda_4} + T_{\lambda_1 \lambda_4 \lambda_4})]. \end{aligned} \quad (D1)$$

-
- [1] D. L. Andrews and P. J. Wilkes, J. Chem. Phys. **83**, 2009 (1985).
[2] J. R. Cable and A. C. Albrecht, J. Chem. Phys. **85**, 3145 (1986).
[3] D. H. Friese, M. T. P. Beerepoot, and K. Ruud, J. Chem. Phys. **141**, 204103 (2014).
[4] J. M. Leeder and D. L. Andrews, J. Chem. Phys. **134**, 094503 (2011).
[5] D. A. Long, *The Raman Effect* (John Wiley & Sons, LTD, 2002), Хуудас 50, 101, 488.
[6] S. J. Cyvin, J. E. Rauch, and J. C. Decius, J. Chem. Phys. **43**, 4083 (1965).
[7] D. L. Andrews and T. Thirunamachandran, J. Chem. Phys. **68**, 2941 (1978).
[8] J. S. Ford and D. L. Andrews, J. Phys. Chem. A **122**, 563 (2018).
[9] L. Barron and A. Buckingham, Mol. Phys. **20**, 1111 (1971).
[10] T. K. Begzjav, Z. Zhang, M. O. Scully, and G. S. Agarwal, Opt. Express **27**, 13965 (2019).
[11] H. Goldstein, *Classical Mechanics* (Addison-Wesley Publishing Company, 1980), Бүлэг 4.
[12] G. Wagnière, J. Chem. Phys. **76**, 473 (1982).
[13] L. D. Barron, *MOLECULAR LIGHT SCATTERING AND OPTICAL ACTIVITY* (Cambridge University Press, 2004), Хуудас 181.
[14] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables* (National Bureau of Standards, 1972), Хуудас 258, Томъёо 6.2.1, 6.2.2.

- [15] S. S. Andrews, J. Chem. Educ. **81**, 877 (2004).
- [16] R. Nessler and T. Begzjav, arXiv e-prints p. arXiv:1902.02396 (2019).
- [17] D. L. Andrews and T. Thirunamachandran, J. Chem. Phys. **67**, 5026 (1977).
- [18] D. L. Andrews and W. A. Ghoul, J. Phys. A: Math. Gen. **14**, 1281 (1981).
- [19] H. Jeffreys, Math. Proc. Cambridge Philos. Soc. **73**, 173–176 (1973).
- [20] G. F. Smith, Tensor, N. S. **19**, 79 (1968).
- [21] E. A. Kearsley and J. T. Fong, J. Res. Natl. Bur. Stand., Sect. B **79B**, 49 (1975).
- [22] T. K. Begzjav and R. Nessler, Phys. Scr. **94**, 105504 (2019).
- [23] I. S. Sokolnikoff, *Tensor Analysis; Theory and Applications* (John Wiley & Sons, INC., 1951), Хуудас 100.
- [24] D. P. Craig and T. Thirunamachandran, *MOLECULAR Quantum Electrodynamics* (Academic Press Inc., 1984), Хавсралт 2.
- [25] V. V. Mikhailov, J. Phys. A: Math. Gen. **10**, 147 (1977).
- [26] M. A. Rashid, J. Phys. A: Math. Gen. **10**, L135 (1977).
- [27] M. E. Rose, *Elementary Theory of Angular Momentum* (John Wiley & Sons, Inc, 1957), Бүлэг 3.
- [28] Х. Цоохүү, *Квантын Механик* (МУИС-Физик Электроникийн Сургууль, 2012), Бүлэг 8.
- [29] J. Jerphagnon, D. Chemla, and R. Bonneville, Adv. Phys. **27**, 609 (1978).
- [30] J. A. R. Coope and R. F. Snider, J. Math. Phys. **11**, 1003 (1970).
- [31] R. F. Snider, *Irreducible Cartesian Tensors* (Walter de Gruyter GmbH, Berlin/Boston, 2018), Бүлэг 3.
- [32] J. A. R. Coope, R. F. Snider, and F. R. McCourt, J. Chem. Phys. **43**, 2269 (1965).
- [33] D. L. Andrews and W. A. Ghoul, Phys. Rev. A **25**, 2647 (1982).
- [34] M. Hamermesh, *Group Theory and Its Application to Physical Problems* (Argonne National Laboratory, 1989), Бүлэг 7.