2005 г № 10
Труды ФОРА

ОБ ОПРЕДЕЛЕНИИ АБСОЛЮТНЫХ ИНТЕНСИВНОСТЕЙ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНЫХ ЛИНИЙ МОЛЕКУЛ XY_3 СИММЕТРИИ C_{3V}

Н.А. Санжаров

Томский государственный университет, г. Томск

Получены аналитические формулы, определяющие зависимости вероятностей переходов в колебательно-вращательных спектрах молекул типа XY_3 симметрии C_{3v} от вращательных квантовых чисел.

Знание аналитических зависимостей интенсивностей колебательно-вращательных линий от вращательных квантовых чисел J и K имеет важное как теоретическое, так и прикладное значение. Такая информация необходима для решения обратной спектроскопической задачи, то есть для определения параметров дипольного момента. С прикладной точки зрения важность определяется тем, что знание аналитических зависимостей интенсивностей колебательно-вращательных линий от вращательных квантовых чисел позволяет на основе экспериментальных данных об интенсивностях получать количественные характеристики среды, например, температуру, давление, концентрацию.

Общая формула для интенсивностей колебательно-вращательной линии (см., например [1,2]) имеет следующий вид:

$$k_\sigma = \frac{8\pi^3\sigma}{4\pi\varepsilon_0 3hc} N\left[1-\exp\left(-\frac{hc\sigma}{kT}\right)\right]\frac{g_\alpha}{Q(T)}\exp\left(-\frac{E_\alpha}{kT}\right)\sum_a\sum_b\left|\left\langle a\middle|\mu_Z\middle|b\right\rangle\right|^2 . \quad (1)$$

Входящие в (1) величины T и N - это температура среды и концентрация молекул в единице объема (последнее может быть связано с давлением); σ и E_α - частота перехода и энергия нижнего квантового состояния, которые предполагаются известными из решения уравнения Шредингера для свободной молекулы; g_α и $Q(T)$ - статистический вес и статистическая сумма, которые также предполагаются известными.

Таким образом, основной проблемой при теоретическом исследовании интенсивностей линий поглощения является расчет матричных элементов оператора дипольного момента. Следует заметить, что строгое решение задачи расчета матричных элементов невозможно вследствие того, что не существует точного решения уравнения Шредингера для свободной молекулы. Поэтому в молекулярной спектроскопии применяются приближенные методы, одним из которых является метод эффективных операторов [3,4], основанный на использовании операторной теории возмущения. Данный метод позволяет корректно описывать те или иные совокупности колебательно - вращательных состояний и квантовых переходов. Кроме того наличие у молекул типа XY_3 симметрии C_{3v} дважды вырожденных колебаний существенно усложняет расчеты, выполненные по теории возмущения. Поэтому расчет матричных элементов $<a|\mu_Z|b>$ разумно выполнять на основе теории неприводимых тензорных операторов (НТО) [5]. Аппарат НТО облегчает расчет матричных элементов, так как позволяет сводить задачу вычисления рядов теории возмущений к вычислению стандартных сумм произведений коэффициентов Клебша-Гордана, 6Г - и 9Г-символов.

Можно показать [5], что в рамках метода НТО матричный элемент $<a|\mu_Z|b>$ оператора эффективного дипольного момента имеет вид:

$$S^{V_2 l_2\Gamma_2;J_2 n_2\gamma_2^r;C_2 s_2}_{V_1 l_1\Gamma_1;J_1 n_1\gamma_1^r;C_1 s_1} = \left\langle V_1 l_1\Gamma_1; J_1 n_1\gamma_1^r; C_1 s_1\middle|\tilde{\mu}^\Gamma\middle|V_2 l_2\Gamma_2; J_2 n_2\gamma_2^r; C_2 s_2\right\rangle, \quad (2)$$

где $|vl\Gamma;Jn\gamma^r;Cs>$ - симметризованные колебательно-вращательные волновые функции:

$$\left|Vl\Gamma; Jn\gamma^r; Cs\right\rangle = \left[\left|Vl\Gamma\right\rangle\otimes\left\langle Jn\gamma^r\right|\right]^C_s . \quad (3)$$

Индексы l и n разделяют функции одной и той же симметрии; Γ и γ^r - симметрия соответственно колебательной и вращательной волновых функций; $C=(\Gamma\otimes\gamma^r)$ - симметрия колебательно - вращательной функции; $\tilde{\mu}^{\Gamma}$ - симметризованный оператор эффективного дипольного момента:

$$\tilde{\mu}^{\Gamma} = \sum_{\substack{V_1 l_1 \Gamma_1 \\ V_2 l_2 \Gamma_2}} \sum_{\substack{\Omega K \tilde{K} \\ n\Gamma_r}} \left(\left[\left| V_1 l_1 \Gamma_1 \right\rangle \otimes \left\langle V_2 l_2 \Gamma_2 \right| \right]^{(\Gamma\otimes\Gamma_r)} \otimes R^{\Omega K(\tilde{K}, n\Gamma_r)} \right)^{\Gamma} r^{\Omega K(\tilde{K}, n\Gamma_r)}_{V_1 l_1 \Gamma_1, V_2 l_2 \Gamma_2}, \tag{4}$$

где $R^{\Omega K(\tilde{K}, n\Gamma_r)}$ - тензорные операторы точечной группы симметрии [5,6]; $\tilde{K} = K, K \pm 1$.

Используя теоремы теории НТО, можно показать [5,6], что выражение (2) может быть преобразовано к следующей удобной для практических приложений форме:

$$S^{V_2 l_2 \Gamma_2; J_2 n_2 \gamma_2^r; C_2 s}_{V_1 l_1 \Gamma_1; J_1 n_1 \gamma_1^r; C_1 s_1} = \sum_{n\Gamma_r} \sum_{\Omega K \tilde{K}} [C_1]^{1/2} (-1)^{J_1} \delta_{[C_1],[C_2]} \begin{bmatrix} \Gamma & \Gamma_V & \Gamma_r \\ C_1 & \Gamma_1 & \gamma_1^r \\ C_2 & \Gamma_2 & \gamma_2^r \end{bmatrix} K^{(\tilde{K} J_1 J_2)}_{(n\Gamma_r, n_1\gamma_1^r, n_2\gamma_2^r)} \left(J_1 \middle\| R^{\Omega K(\tilde{K})} \middle\| J_2 \right) Y^{\Omega K(\tilde{K}, n\Gamma_r)}_{V_1 l_1 \Gamma_1, V_2 l_2 \Gamma_2} \tag{5}$$

где $\left(J_1 \middle\| R^{\Omega K(\tilde{K})} \middle\| J_2 \right)$ - приведенный матричный элемент; $K^{(\tilde{K} J_1 J_2)}_{(n\Gamma_r, n_1\gamma_1^r, n_2\gamma_2^r)}$ - так называемый изоскалярный множитель; $Y^{\Omega K(\tilde{K}, n\Gamma_r)}_{V_1 l_1 \Gamma_1, V_2 l_2 \Gamma_2}$ - экспериментально определенные параметры для колебательных переходов $V_1 l_1 \Gamma_1 \longleftrightarrow V_2 l_2 \Gamma_2$, $\Gamma_V=(\Gamma\otimes\Gamma_r)$. Явные выражения для приведенного матричного элемента и изоскалярного множителя могут быть найдены в [5,6].

В данной работе общее выражение (5), справедливое для произвольной многоатомной молекулы, было использовано для определения матричных элементов дипольного момента молекул типа XY_3 симметрии C_{3v}. Результаты расчетов приведены в приложении.

Литература

1. *Flaud J.M., Camy-Peyret C.*// Molec. Phys. - 1975. - V.15. - №2. - P. 278-310.
2. *Санжаров Н.А., Бехтерева Е.С. , Улеников О.Н.*// Оптика атмосферы и океана. - 2002. - Т.15. - №7. - С. 645-647.
3. *Макушкин Ю.С., Тютерев В.Г.* Методы возмущений и эффективные гамильтонианы в молекулярной спектроскопии. - Новосибирск: Наука, 1984. – С. 240
4. *Papousek D., Aliev M.R.* Molecular vibrational-rotational spectra. - Prague: Academia, 1982. – P. 323
5. *Макушкин Ю.С., Улеников О.Н., Чеглоков А.Е.* Симметрия и ее применение к задачам колебательно - вращательной спектроскопии молекул (Часть 1, часть 2). Томск: изд-во ТГУ, 1990.
6. *Saveliev V.N. and Ulenikov O.N.*/ J. Mol. Spectr. - 1986. - Vol. - 119. - №1. - P. 144-152.

On determination of intensity of molecules rotationally oscillatory lines

N.A. Sangarov

The analytical expressions for transition probability from rotatory quantum number in rotationally oscillatory spectrums of molecules with XY_3 symmetry C_{3v} are obtained.

ПРИЛОЖЕНИЯ

Параллельная полоса

$$S_{A_1-A_1}^{\Delta J=-1\Delta K=0}=\sqrt{\frac{(J+K)(J-K)}{J}}\{Y_{A_1-A_1}^{00(1,0A_2)}-\frac{\sqrt{2}}{2}(J+1)Y_{A_1-A_1}^{11(1,0A_2)}-\frac{\sqrt{3}}{3}J(J+1)Y_{A_1-A_1}^{20(1,0A_2)}+$$

$$+\frac{\sqrt{15}}{30}(2J+3)(J+1)Y_{A_1-A_1}^{22(1,0A_2)}-\frac{\sqrt{10}}{10}\left(-J^2+5K^2+1\right)Y_{A_1-A_1}^{22(3,0A_2)}+\frac{\sqrt{6}}{6}J(J+1)^2Y_{A_1-A_1}^{31(1,0A_2)}+$$

$$+\frac{\sqrt{30}}{20}\left(-J^2+5K^2+1\right)(J+2)Y_{A_1-A_1}^{33(3,0A_2)}+\frac{1}{3}J^2(J+1)^2Y_{A_1-A_1}^{40(1,0A_2)}-\frac{\sqrt{5}}{30}J(J+1)^2(2J+3)Y_{A_1-A_1}^{42(1,0A_2)}+$$

$$+\frac{\sqrt{30}}{30}\left(-J^2+5K^2+1\right)J(J+1)Y_{A_1-A_1}^{42(3,0A_2)}-\frac{\sqrt{70}}{140}\left(-J^2+5K^2+1\right)(2J+5)(J+2)Y_{A_1-A_1}^{44(3,0A_2)}+$$

$$+\frac{\sqrt{14}}{28}\left(J^4-14J^2K^2-5J^2+21K^4+35K^2+4\right)Y_{A_1-A_1}^{44(5,0A_2)}\}\left(\frac{1}{1+\delta_{K,0}}\right)$$

$$S_{A_1-A_1}^{\Delta J=0\Delta K=0}=iK\sqrt{\frac{(2J+1)}{J(J+1)}}\{Y_{A_1-A_1}^{00(1,0A_2)}-\frac{\sqrt{2}}{2}Y_{A_1-A_1}^{11(1,0A_2)}-\frac{\sqrt{3}}{3}J(J+1)Y_{A_1-A_1}^{20(1,0A_2)}-$$

$$-\frac{\sqrt{15}}{30}(2J-1)(2J+3)Y_{A_1-A_1}^{22(1,0A_2)}-\frac{\sqrt{10}}{10}\left(-3J^2-3J+5K^2+1\right)Y_{A_1-A_1}^{22(3,0A_2)}+\frac{\sqrt{6}}{6}J(J+1)Y_{A_1-A_1}^{31(1,0A_2)}+$$

$$+\frac{\sqrt{30}}{10}\left(-3J^2-3J+5K^2+1\right)Y_{A_1-A_1}^{33(3,0A_2)}+\frac{1}{3}J^2(J+1)^2Y_{A_1-A_1}^{40(1,0A_2)}+$$

$$+\frac{\sqrt{5}}{30}J(J+1)(2J+3)(2J-1)Y_{A_1-A_1}^{42(1,0A_2)}+\frac{\sqrt{30}}{30}\left(3J^2+3J-5K^2-1\right)J(J+1)Y_{A_1-A_1}^{42(3,0A_2)}+$$

$$+\frac{\sqrt{70}}{210}\left(-3J^2-3J+5K^2+1\right)(2J-3)(2J+5)Y_{A_1-A_1}^{44(3,0A_2)}+$$

$$+\frac{\sqrt{14}}{28}\left(15J^4+30J^3-70J^2K^2-35J^2-70JK^2-50J+63K^4+105K^2+12\right)Y_{A_1-A_1}^{44(5,0A_2)}\}\left(\frac{1}{1+\delta_{K,0}}\right)$$

$$S_{A_1-A_1}^{\Delta J=0\Delta K\pm 3}=\frac{i}{4}\sqrt{\frac{(2J+1)(J\pm K+3)(J\pm K+2)(J\pm K+1)(J\mp K)(J\mp K-1)(J\mp K-2)}{J(J+1)}}$$

$$\{Y_{A_1-A_1}^{22(3,1A_2)}-\sqrt{3}Y_{A_1-A_1}^{33(3,1A_2)}+i(\pm 2K+3)Y_{A_1-A_1}^{33(4,1A_2)}-\frac{\sqrt{3}}{3}J(J+1)Y_{A_1-A_1}^{42(3,1A_2)}-$$

$$-\frac{\sqrt{7}}{21}(2J-3)(2J+5)Y_{A_1-A_1}^{44(3,1A_2)}-i\sqrt{5}(\pm 2K+3)Y_{A_1-A_1}^{44(4,1A_2)}-$$

$$-\frac{\sqrt{5}}{6}\left(24-J\pm 27K-J^2+9K^2\right)Y_{A_1-A_1}^{44(5,1A_2)}\}\left(\frac{1}{\sqrt{(1+\delta_{K,0})(1+\delta_{K-3,0})}}\right)$$

$$S_{A_1-A_1}^{\Delta J=1\Delta K=0}=\sqrt{\frac{(J+K+1)(J-K+1)}{(J+1)}}\{Y_{A_1-A_1}^{00(1,0A_2)}+\frac{\sqrt{2}}{2}JY_{A_1-A_1}^{11(1,0A_2)}-\frac{\sqrt{3}}{3}J(J+1)Y_{A_1-A_1}^{20(1,0A_2)}+$$
$$+\frac{\sqrt{15}}{30}J(2J-1)Y_{A_1-A_1}^{22(1,0A_2)}-\frac{\sqrt{10}}{10}\left(-J^2-2J+5K^2\right)Y_{A_1-A_1}^{22(3,0A_2)}-\frac{\sqrt{6}}{6}J^2(J+1)Y_{A_1-A_1}^{31(1,0A_2)}-$$
$$-\frac{\sqrt{30}}{20}\left(-J^2-2J+5K^2\right)(J-1)Y_{A_1-A_1}^{33(3,0A_2)}+\frac{1}{3}J^2(J+1)^2Y_{A_1-A_1}^{40(1,0A_2)}-\frac{\sqrt{5}}{30}J^2(2J-1)(J+1)Y_{A_1-A_1}^{42(1,0A_2)}-$$
$$-\frac{\sqrt{30}}{30}\left(J^2+2J-5K^2\right)J(J+1)Y_{A_1-A_1}^{42(3,0A_2)}+\frac{\sqrt{70}}{140}\left(J^2+2J-5K^2\right)(2J-3)(J-1)Y_{A_1-A_1}^{44(3,0A_2)}+$$
$$+\frac{\sqrt{14}}{28}\left(J^4+4J^3-14J^2K^2+J^2-28JK^2-6J+21K^4+21K^2\right)Y_{A_1-A_1}^{44(5,0A_2)}\}\left(\frac{1}{1+\delta_{K,0}}\right)$$

$$S_{A_1-A_1}^{\Delta J=-1\Delta K\pm3}=\frac{1}{4}\sqrt{\frac{(J\pm K+2)(J\pm K+1)(J\mp K)(J\mp K-1)(J\mp K-2)(J\mp K-3)}{J}}\{Y_{A_1-A_1}^{22(3,1A_2)}-$$
$$-\frac{\sqrt{3}}{2}(J+2)Y_{A_1-A_1}^{33(3,1A_2)}+\frac{i}{2}(J\pm4K+6)Y_{A_1-A_1}^{33(4,1A_2)}-\frac{\sqrt{3}}{3}J(J+1)Y_{A_1-A_1}^{42(3,1A_2)}+\frac{\sqrt{7}}{14}(J+2)(2J+5)Y_{A_1-A_1}^{44(3,1A_2)}-$$
$$-\frac{i\sqrt{5}}{10}(J\pm4K+6)(2J+5)Y_{A_1-A_1}^{44(4,1A_2)}-\frac{\sqrt{5}}{10}\left(40+9J\pm45K-J^2\pm6JK+15K^2\right)Y_{A_1-A_1}^{44(5,1A_2)}\}\times$$
$$\times\left(\frac{1}{\sqrt{(1+\delta_{K,0})(1+\delta_{K-3,0})}}\right)$$

$$S_{A_1-A_1}^{\Delta J=1\Delta K\pm3}=\frac{1}{4}\sqrt{\frac{(J\pm K+1)(J\pm K+4)(J\pm K+3)(J\pm K+2)(J\mp K)(J\mp K-1)}{(J+1)}}\{Y_{A_1-A_1}^{22(3,1A_2)}+$$
$$+\frac{\sqrt{3}}{2}(J-1)Y_{A_1-A_1}^{33(3,1A_2)}+\frac{i}{2}(-J\pm4K+5)Y_{A_1-A_1}^{33(4,1A_2)}-\frac{\sqrt{3}}{3}J(J+1)Y_{A_1-A_1}^{42(3,1A_2)}+\frac{\sqrt{7}}{14}(J-1)(2J-3)Y_{A_1-A_1}^{44(3,1A_2)}+$$
$$+\frac{i\sqrt{5}}{10}(-J\pm4K+5)(2J-3)Y_{A_1-A_1}^{44(4,1A_2)}-\frac{\sqrt{5}}{10}\left(30-11J\pm39K-J^2\mp6JK+15K^2\right)Y_{A_1-A_1}^{44(5,1A_2)}\}\times$$
$$\times\left(\frac{1}{\sqrt{(1+\delta_{K,0})(1+\delta_{K-3,0})}}\right)$$

ПЕРПЕНДИКУЛЯРНАЯ ПОЛОСА

$$S_{A_1-E}^{\Delta J=-1\Delta K=\pm1}=\frac{A}{4}\sqrt{\frac{(J\pm K)(J\pm K-1)}{J}}\{Y_{A_1-E}^{00(1,0E)}-\frac{\sqrt{2}}{2}(J+1)Y_{A_1-E}^{11(1,0E)}-\frac{i\sqrt{2}}{2}(-J\pm2K-1)Y_{A_1-E}^{11(2,0E)}-$$

$$-\frac{\sqrt{3}}{3}J(J+1)Y_{A_1-E}^{20(1,0E)}+\frac{\sqrt{15}}{30}(J+1)(2J+3)Y_{A_1-E}^{22(1,0E)}+\frac{i\sqrt{3}}{6}(-J\pm2K-1)(2J+3)Y_{A_1-E}^{22(2,0E)}+$$

$$+\frac{\sqrt{15}}{30}\left(J^2\pm10JK-5J-15K^2\pm15K-6\right)Y_{A_1-E}^{22(3,0E)}+\frac{\sqrt{6}}{6}J(J+1)^2Y_{A_1-E}^{31(1,0E)}+$$

$$+\frac{i\sqrt{6}}{6}J(-J\pm2K-1)(J+1)Y_{A_1-E}^{31(2,0E)}+\frac{i\sqrt{70}}{70}(J\mp2K+1)(2J+3)(J+2)Y_{A_1-E}^{33(2,0E)}+$$

$$+\frac{\sqrt{5}}{20}\left(-J^2\mp10JK+5J+15K^2\mp15K+6\right)(J+2)Y_{A_1-E}^{33(3,0E)}+\frac{1}{3}J^2(J+1)^2Y_{A_1-E}^{40(1,0E)}+$$

$$+\frac{i\sqrt{7}}{28}\left(-12\mp6J^2K+3J^3+3J^2\pm28K^3-21JK^2-42K^2\pm21JK-12J\pm38K\right)Y_{A_1-E}^{33(4,0E)}-$$

$$-\frac{\sqrt{5}}{30}J(J+1)^2(2J+3)Y_{A_1-E}^{42(1,0E)}+\frac{i}{6}(J\mp2K+1)(J+1)J(2J+3)Y_{A_1-E}^{42(2,0E)}-$$

$$-\frac{\sqrt{5}}{30}\left(J^2\pm10JK-5J-15K^2\pm15K-6\right)(J+1)JY_{A_1-E}^{42(3,0E)}-$$

$$-\frac{\sqrt{105}}{420}\left(-J^2\mp10JK+5J+15K^2\mp15K+6\right)(J+2)(2J+5)Y_{A_1-E}^{44(3,0E)}-$$

$$-\frac{i\sqrt{35}}{140}\left(-12\mp6J^2K+3J^3\pm28K^3-21JK^2-42K^2\pm21JK-12J\pm38K\right)(2J+5)Y_{A_1-E}^{44(4,0E)}+$$

$$+(60\pm42J^2K-14J^3-19J^2\mp210K^3+126JK^2+315K^2\mp84JK^3\pm28J^3K+105K^4+$$

$$+J^4\mp154JK-42J^2K^2+56J\mp210K)\frac{\sqrt{210}}{420}Y_{A_1-E}^{44(5,0E)}\}\left(\frac{1}{\sqrt{(1+\delta_{K-1,0})(1+\delta_{K,0})}}\right)$$

где A=1, если $\gamma_2^r=A_\lambda,\lambda=1{,}2$ или $A=\sqrt{2}$, если $\gamma_2^r=E$.

$$S_{A_1-E}^{\Delta J=-1\Delta K=\pm4}=\frac{iB}{8}\sqrt{\frac{(J\pm K-4)(J\pm K-3)(J\pm K-2)(J\pm K-1)(J\pm K)(J\mp K+3)(J\mp K+2)}{J}}\times$$

$$\times\sqrt{(J\mp K+1)}\{Y_{A_1-E}^{33(4,1E)}-\frac{\sqrt{20}}{10}(2J+5)Y_{A_1-E}^{44(4,1E)}+\frac{i\sqrt{20}}{10}(J\mp5K+10)Y_{A_1-E}^{44(5,1E)}\}\times$$

$$\times\left(\frac{1}{\sqrt{(1+\delta_{K,0})(1+\delta_{K-4,0})}}\right)$$

$$S_{A_1-E}^{\Delta J=0\Delta K=\pm1}=\frac{iA}{4}\sqrt{\frac{(J\pm K)(J\mp K+1)(2J+1)}{J(J+1)}}\{Y_{A_1-E}^{00(1,0E)}-\frac{\sqrt{2}}{2}Y_{A_1-E}^{11(1,0E)}-\frac{i\sqrt{2}}{2}(\pm 2K-1)Y_{A_1-E}^{11(2,0E)}-$$

$$-\frac{\sqrt{3}}{3}J(J+1)Y_{A_1-E}^{20(1,0E)}-\frac{\sqrt{15}}{30}(2J-1)(2J+3)Y_{A_1-E}^{22(1,0E)}+\frac{i\sqrt{3}}{6}(\pm 2K-1)Y_{A_1-E}^{22(2,0E)}-$$

$$-\frac{\sqrt{15}}{10}\left(-J^2\mp 5K-J+5K^2+2\right)Y_{A_1-E}^{22(3,0E)}+\frac{\sqrt{6}}{6}J(J+1)Y_{A_1-E}^{31(1,0E)}+$$

$$+\frac{i\sqrt{6}}{6}J(\pm 2K-1)(J+1)Y_{A_1-E}^{31(2,0E)}+3\frac{i\sqrt{70}}{70}(\pm 2K-1)(J-1)(J+2)Y_{A_1-E}^{33(2,0E)}+$$

$$+\frac{3\sqrt{5}}{10}\left(-J^2-J+5K^2\mp 5K+2\right)Y_{A_1-E}^{33(3,0E)}+\frac{1}{3}J^2(J+1)^2Y_{A_1-E}^{40(1,0E)}+$$

$$+\frac{i\sqrt{7}}{14}\left(7K^2\mp 7K-3J^2+6-3J\right)(\pm 2K-1)Y_{A_1-E}^{33(4,0E)}+$$

$$+\frac{\sqrt{5}}{30}J(J+1)(2J+3)(2J-1)Y_{A_1-E}^{42(1,0E)}-\frac{i}{2}(\pm 2K-1)(J+1)JY_{A_1-E}^{42(2,0E)}+$$

$$+\frac{\sqrt{5}}{10}\left(-J^2-J+5K^2\mp 5K+2\right)(J+1)JY_{A_1-E}^{42(3,0E)}+$$

$$+\frac{\sqrt{105}}{210}\left(-J^2-J+5K^2\mp 5K+2\right)(2J-3)(2J+5)Y_{A_1-E}^{44(3,0E)}-$$

$$-\frac{i\sqrt{35}}{14}\left(\mp 7K+7K^2-3J^2+6-3J\right)(\pm 2K-1)Y_{A_1-E}^{44(4,0E)}+$$

$$+(\pm 14J^2K+2J^3+12-7J^2\mp 42K^3-14JK^2+63K^2+21K^4+$$

$$+J^4\pm 14JK-14J^2K^2-8J\mp 42K)\frac{\sqrt{210}}{84}Y_{A_1-E}^{44(5,0E)}\}\left(\frac{1}{\sqrt{(1+\delta_{K-1,0})(1+\delta_{K,0})}}\right)$$

$$S_{A_1-E}^{\Delta J=0\Delta K=\pm4}=\frac{B}{8}\sqrt{\frac{(J\mp K+4)(J\pm K-3)(J\pm K-2)(J\pm K-1)(J\pm K)(J\mp K+3)(J\mp K+2)}{J(J+1)}}\times$$

$$\times\sqrt{(J\mp K+1)}\{Y_{A_1-E}^{33(4,1E)}-\sqrt{5}Y_{A_1-E}^{44(4,1E)}-i\sqrt{5}(\pm K-2)Y_{A_1-E}^{44(5,iE)}\}\left(\frac{1}{\sqrt{(1+\delta_{K,0})(1+\delta_{K-4,0})}}\right)$$

$$S_{A_1-E}^{\Delta J=1\Delta K=\pm4}=\frac{iB}{8}\sqrt{\frac{(J\mp K+4)(J\mp K+5)(J\pm K-2)(J\pm K-1)(J\pm K)(J\mp K+3)(J\mp K+2)}{(J+1)}}\times$$

$$\times\sqrt{(J\mp K+1)}\{Y_{A_1-E}^{33(4,1E)}+\frac{\sqrt{20}}{10}(2J-3)Y_{A_1-E}^{44(4,1E)}+\frac{i\sqrt{20}}{10}(J\pm 5K-9)Y_{A_1-E}^{44(5,1E)}\}\times$$

$$\times\left(\frac{1}{\sqrt{(1+\delta_{K,0})(1+\delta_{K-4,0})}}\right)$$

$$S_{A_1-E}^{\Delta J=1\Delta K=\pm 1}=\frac{A}{4}\sqrt{\frac{(J\mp K+1)(J\mp K+2)}{(J+1)}}\{Y_{A_1-E}^{00(1,0E)}+\frac{\sqrt{2}}{2}JY_{A_1-E}^{11(1,0E)}-\frac{i\sqrt{2}}{2}(J\pm 2K)Y_{A_1-E}^{11(2,0E)}-$$

$$-\frac{\sqrt{3}}{3}J(J+1)Y_{A_1-E}^{20(1,0E)}+\frac{\sqrt{15}}{30}J(2J-1)Y_{A_1-E}^{22(1,0E)}-\frac{i\sqrt{3}}{6}(J\pm 2K)(2J-1)Y_{A_1-E}^{22(2,0E)}-$$

$$-\frac{\sqrt{15}}{30}\left(-J^2\pm 10JK-7J+15K^2\mp 5K\right)Y_{A_1-E}^{22(3,0E)}-\frac{\sqrt{6}}{6}J^2(J+1)Y_{A_1-E}^{31(1,0E)}+$$

$$+\frac{i\sqrt{6}}{6}J(J\pm 2K)(J+1)Y_{A_1-E}^{31(2,0E)}-\frac{i\sqrt{70}}{70}(J\pm 2K)(2J-1)(J-1)Y_{A_1-E}^{33(2,0E)}-$$

$$-\frac{\sqrt{5}}{20}\left(-J^2\pm 10JK-7J+15K^2\mp 5K\right)(J-1)Y_{A_1-E}^{33(3,0E)}+\frac{1}{3}J^2(J+1)^2Y_{A_1-E}^{40(1,0E)}-$$

$$-\frac{i\sqrt{7}}{28}\left(\pm 6J^2K+3J^3+6J^2\mp 28K^3-21JK^2+21K^2\pm 33JK-9J\mp 11K\right)Y_{A_1-E}^{33(4,0E)}-$$

$$-\frac{\sqrt{5}}{30}J^2(J+1)(2J-1)Y_{A_1-E}^{42(1,0E)}+\frac{i}{6}(J\pm 2K)(J+1)J(2J-1)Y_{A_1-E}^{42(2,0E)}+$$

$$+\frac{\sqrt{5}}{30}\left(-J^2\pm 10JK-7J+15K^2\mp 5K\right)(J+1)JY_{A_1-E}^{42(3,0E)}-$$

$$-\frac{\sqrt{105}}{420}\left(-J^2\pm 10JK-7J+15K^2\mp 5K\right)(J-1)(2J-3)Y_{A_1-E}^{44(3,0E)}+$$

$$+\frac{i\sqrt{35}}{140}\left(\mp 6J^2K-3J^3-6J^2\pm 28K^3+21JK^2-21K^2\mp 33JK+9J\pm 11K\right)(2J-3)Y_{A_1-E}^{44(4,0E)}+$$

$$+(\mp 42J^2K+18J^3+29J^2\mp 126K^3-210JK^2+147K^2\pm 84JK^3\mp 28J^3K+105K^4+$$

$$+J^4\pm 154JK-42J^2K^2-48J\pm 42K)\frac{\sqrt{210}}{420}Y_{A_1-E}^{44(5,0E)}\}\left(\frac{1}{\sqrt{(1+\delta_{K-1,0})(1+\delta_{K,0})}}\right)$$

$$S_{A_1-E}^{\Delta J=-1\Delta K=\pm 2}=\frac{iB}{4}\sqrt{\frac{(J\pm K)(J\pm K-1)(J\pm K-2)(J\mp K+1)}{J}}\{Y_{A_1-E}^{11(2,1E)}-\frac{\sqrt{6}}{6}(2J+3)Y_{A_1-E}^{22(2,1E)}-$$

$$-\frac{i\sqrt{12}}{6}(-J\pm 3K-3)Y_{A_1-E}^{22(3,1E)}-\frac{\sqrt{3}}{3}J(J+1)Y_{A_1-E}^{31(2,1E)}+\frac{\sqrt{35}}{35}(2J+3)(J+2)Y_{A_1-E}^{33(2,1E)}-$$

$$-\frac{i}{2}(J\mp 3K+3)(J+2)Y_{A_1-E}^{33(3,1E)}-\frac{\sqrt{7}}{14}\left(-J^2+7J\mp 7JK\mp 28K+14K^2+18\right)Y_{A_1-E}^{33(4,2E)}+$$

$$+\frac{\sqrt{2}}{6}J(J+1)(2J+3)Y_{A_1-E}^{42(2,1E)}+\frac{\sqrt{140}}{140}\left(-J^2+7J\mp 7JK\mp 28K+14K^2+18\right)(2J+5)Y_{A_1-E}^{44(4,2E)}+$$

$$+\frac{i}{3}(-J\pm 3K-3)(J+1)JY_{A_1-E}^{42(3,1E)}-\frac{i\sqrt{21}}{42}(-J\pm 3K-3)(J+2)(2J+5)Y_{A_1-E}^{44(3,1E)}+$$

$$+\frac{i\sqrt{60}}{60}\left(-30+J^3-13J\pm 60K\pm 15K^3\mp 3J^2K-45K^2-9JK^2+3J^2\pm 18JK\right)Y_{A_1-E}^{44(5,2E)}\}\times$$

$$\times\left(\frac{1}{\sqrt{(1+\delta_{K-2,0})(1+\delta_{K,0})}}\right)$$

где $B=\sqrt{2}/2$, если $\gamma_2^r=A_\lambda,\lambda=1,2$ или B=1, если $\gamma_2^r=E$.

$$S_{A_1-E}^{\Delta J=0\Delta K=\pm 2}=\frac{B}{4}\sqrt{\frac{(J\pm K)(J\pm K-1)(J\mp K-2)(J\mp K+1)(2J+1)}{J(J+1)}}\{Y_{A_1-E}^{11(2,1E)}-\frac{\sqrt{6}}{2}Y_{A_1-E}^{22(2,1E)}-$$
$$-i\sqrt{3}(\pm K-1)Y_{A_1-E}^{22(3,1E)}-\frac{\sqrt{3}}{3}J(J+1)Y_{A_1-E}^{31(2,1E)}-\frac{3\sqrt{35}}{35}(J-1)(J+2)Y_{A_1-E}^{33(2,1E)}+$$
$$+3i(\pm K-1)(J+2)Y_{A_1-E}^{33(3,1E)}-\frac{\sqrt{7}}{7}\left(-J^2-J\mp 14K+7K^2+9\right)Y_{A_1-E}^{33(4,2E)}+$$
$$+\frac{\sqrt{2}}{2}J(J+1)Y_{A_1-E}^{42(2,1E)}+\frac{\sqrt{34}}{7}\left(-J^2-J\mp 14K+7K^2+9\right)Y_{A_1-E}^{44(4,2E)}+$$
$$+i(\pm K-1)(J+1)JY_{A_1-E}^{42(3,1E)}+\frac{i\sqrt{21}}{21}(\pm K-1)(2J-3)(2J+5)Y_{A_1-E}^{44(3,1E)}+$$
$$+\frac{i\sqrt{15}}{3}\left(6-J\mp 6K+3K^2-J^2\right)(\pm K-1)Y_{A_1-E}^{44(5,2E)}\}\left(\frac{1}{\sqrt{(1+\delta_{K-2,0})(1+\delta_{K,0})}}\right)$$

$$S_{A_1-E}^{\Delta J=1\Delta K=\pm 2}=\frac{iB}{4}\sqrt{\frac{(J\pm K)(J\mp K+2)(J\mp K+3)(J\mp K+1)}{(J+1)}}\{Y_{A_1-E}^{11(2,1E)}+\frac{\sqrt{6}}{6}(2J-3)Y_{A_1-E}^{22(2,1E)}-$$
$$-\frac{i\sqrt{12}}{6}(J\pm 3K-2)Y_{A_1-E}^{22(3,1E)}-\frac{\sqrt{3}}{3}J(J+1)Y_{A_1-E}^{31(2,1E)}+\frac{\sqrt{35}}{35}(2J-1)(J-1)Y_{A_1-E}^{33(2,1E)}-$$
$$-\frac{i}{2}(J\pm 3K-2)(J-1)Y_{A_1-E}^{33(3,1E)}-\frac{\sqrt{7}}{14}\left(-J^2-9J\pm 7JK\mp 21K+14K^2+10\right)Y_{A_1-E}^{33(4,2E)}-$$
$$-\frac{\sqrt{2}}{6}J(J+1)(2J-1)Y_{A_1-E}^{42(2,1E)}-\frac{\sqrt{140}}{140}\left(-J^2-9J\pm 7JK\mp 21K+14K^2+10\right)(2J-3)Y_{A_1-E}^{44(4,2E)}+$$
$$+\frac{i}{3}(J\pm 3K-2)(J+1)JY_{A_1-E}^{42(3,1E)}-\frac{i\sqrt{21}}{42}(J\pm 3K-2)(J-1)(2J-3)Y_{A_1-E}^{44(3,1E)}+$$
$$+\frac{i\sqrt{60}}{60}\left(-15-J^3+16J\pm 39K\pm 15K^3\mp 3J^2K-36K^2+9JK^2\mp 24JK\right)Y_{A_1-E}^{44(5,2E)}\}\times$$
$$\times\left(\frac{1}{\sqrt{(1+\delta_{K-2,0})(1+\delta_{K,0})}}\right)$$

$$S_{A_1-E}^{\Delta J=-1\Delta K=\pm 5}=\frac{A}{16}\sqrt{\frac{(J\mp K+2)(J\mp K+4)(J\mp K+1)(J\mp K+3)(J\pm K)(J\pm K-2)(J\pm K-1)}{J}}\times$$
$$\times\sqrt{(J\pm K-3)(J\pm K-4)(J\pm K-5)}Y_{A_1-E}^{44(5,3E)}\left(\frac{1}{\sqrt{(1+\delta_{K,0})(1+\delta_{K-5,0})}}\right)$$

