НАНОСИСТЕМЫ: ФИЗИКА, ХИМИЯ, МАТЕМАТИКА, 2012, 3 (3), С. 99–109

УДК 530.145+539.2.01+541.10+548.12

СИММЕТРИЗОВАННЫЕ КОМБИНАЦИИ s-, p-, d-, f-СПИНОРОВ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ФИЗИЧЕСКИХ СИСТЕМ

В. П. Смирнов

Национальный исследовательский университет
информационных технологий, механики и оптики,
Санкт-Петербург, Россия

smirnov36@mail.ru

Для изучения электронного строения молекул, кристаллов и наноструктур в локализованном базисе (линейные комбинации атомо-подобных орбиталей – ЛКАО метод) обычно используют атомо-подобные функции s-, p- и d-типа. Для повышения точности расчетов, а так же для расчета соединений с тяжелыми атомами, необходимо расширять базис путем включения в него атомо-подобных функций f-типа. При учете спин-орбитального взаимодействия базис должен состоять из произведений координатных функций на спиновые (из спиноров). В этой работе построены и приводятся в виде компактных таблиц симметризованные комбинации функций s-, p-, d-, и f-типа (со спиновыми множителями и без них) при симметризации по неприводимым представлениям обычных и двойных точечных групп с осями симметрии не выше шестого порядка.

Ключевые слова: точечные группы, двузначные представления точечных групп, симметризованный базис.

1. Введение

Одним из часто применяемых методов расчета электронной структуры молекул, кристаллов и наносистем является так называемый метод линейных комбинаций атомных орбиталей (ЛКАО метод). Это – вариационный метод, использующий в качестве базиса координатные функции атомного типа. При учете спин-орбитального взаимодействия координатные функции умножаются на спиноры. Для сокращения вычислительной работы базис симметризуют, учитывая частично или в полной мере симметрию исследуемой системы. До недавнего времени в базис включались как правило атомоподобные функции s-, p-, и d-типа. При расчете электронной структуры физических систем, содержащих атомы тяжелых элементов, необзодимо включение в базис атомоподобных функций f-типа. Расширение базиса функциями такого типа повышает точность расчета и для систем, не содержащих атомы тяжелых элементов. А неуклонно возрастающая производительность вычислительной техники делает возможным такое расширение базиса в ЛКАО вычислениях.

В этой работе приводятся линейные комбинации координатных функций s-, p-, d-, и f-типа и ассоциированных с ними спиноров (s-, p-, d-, и f-спиноров), преобразующиеся по неприводимым представлениям (НП) точечных групп C_i, C_s, C_n, C_{nv}, C_{nh}, D_n, D_{nd}, D_{nh} ($n \leqslant 6$), T, T_h, T_d, O, O_h, Y, Y_h и их двойным аналогам (по двузначным НП перечисленных групп). Координатные базисные функций НП (БФНП) p- и d-типа часто приводят при таблицах характеров НП точечных групп (см., например, [5,8–13] (только для p-функций) и во многих других монографиях аналогичного содержания). Автору не известны публикации по симметризованным координатным функциям f–типа и s-, p-, d-, и f-спинорам (базисные спиноры НП — БСНП).

Что же касается обозначений НП точечных групп (однозначных и двузначных), то они одинаковы в подавляющем числе публикаций. Эта общепринятая система обозначений используется и в предлагаемой работе.

В разделе 2 обсуждается связь полиномов переменных x, y, z со сферическими функциями. В разделе 3 приведены таблицы координатных БФНП f- и (для полноты картины) s-, p-, d-типа для всех перечисленных выше точечных групп. Раздел 4 содержит информацию по симметризованным линейным комбинациям s-, p-, d-, и f-спиноров для некубических точечных групп в виде компактных таблиц. Аналогичная информация представлена в разделе 5 для кубических групп и группы икосаэдра Y.

Из экономии места не включены в таблицы сведения, относящиеся к группам, имеющим структуру прямых произведений G×I и G×C$_s$, так как обозначения их НП такие же как в группах G, но с добавлением индексов g и u для групп G×I или штрихов $'$ и $''$ для групп G×C$_s$, а четность полинома относительно инверсиии и отражения в горизонтальной плоскости легко определяется. Это группы:

$$
\begin{array}{lllll}
\mathrm{S}_2 = \mathrm{C}_1 \times \mathrm{I}, & \mathrm{S}_6 = \mathrm{C}_3 \times \mathrm{I}, & \mathrm{C}_{2h} = \mathrm{C}_2 \times \mathrm{I}, & \mathrm{C}_{4h} = \mathrm{C}_4 \times \mathrm{I}, & \mathrm{C}_{6h} = \mathrm{C}_6 \times \mathrm{I}, \\
\mathrm{D}_{2h} = \mathrm{D}_2 \times \mathrm{I}, & \mathrm{D}_{4h} = \mathrm{D}_4 \times \mathrm{I}, & \mathrm{D}_{6h} = \mathrm{D}_6 \times \mathrm{I}, & \mathrm{D}_{3d} = \mathrm{D}_3 \times \mathrm{I}, & \mathrm{D}_{5d} = \mathrm{D}_5 \times \mathrm{I}, \\
\mathrm{T}_h = \mathrm{T} \times \mathrm{I}, & \mathrm{O}_h = \mathrm{O} \times \mathrm{I}, & \mathrm{Y}_h = \mathrm{Y} \times \mathrm{I}; & & \\
\mathrm{C}_{3h} = \mathrm{C}_3 \times \mathrm{C}_s, & \mathrm{C}_{5h} = \mathrm{C}_5 \times \mathrm{C}_s, & \mathrm{D}_{3h} = \mathrm{D}_3 \times \mathrm{C}_s, & \mathrm{D}_{5h} = \mathrm{D}_5 \times \mathrm{C}_s. &
\end{array}
$$

Эти же соотношения остаются верными и для соответствующих двойных групп, за исключением того, что двойные группы $\overline{\mathrm{D}}_{3h}$ и $\overline{\mathrm{D}}_{5h}$ не являются прямыми произведениями групп $\overline{\mathrm{D}}_3$ и $\overline{\mathrm{D}}_5$ на группу C$_s$.

В таблицах полиномы переменных x, y, z заданы в координатных системах, ось Z которых направлена по главной оси симметрии группы G или $\overline{G}$ (если она имеется), или по одной из осей второго (группа T), четвертого (группы T$_d$ и O) или пятого (группа Y) порядка.

2. Связь полиномов со сферическими функциями

Как решения однородного дифференциального уравнения (уравнения Лапласа) нормированные сферические функции определяются с точностью до фазового множителя. Определим нормированные так называемые присоединеные функции Лежандра $\widetilde{P}_l^m(t)$ следующим образом

$$\widetilde{P}_l^m(t) \equiv N_l^m P_l^m(t) = N_l^m \frac{1}{2^l l!} \left(1 - t^2\right)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{l+m}}{dt^{l+m}} \left(t^2 - 1\right)^l, \quad 0 \leqslant m \leqslant l,$$

где N_l^m — нормировочный множитель:

$$N_l^m = \sqrt{\frac{(2l+1)\,(l-|m|)!}{2\,(l+|m|)!}}.$$

К сожалению, в научной и учебной литературе в различных источниках выбор упомянутого фазового множителя сделан по-разному, как и расположение индексов l и m, характеризующих саму сферическую функцию $Y\,(\theta, \varphi)$. Приведем несколько примеров

$$1. \qquad Y_{l,m}\,(\theta,\varphi) = \widetilde{P}_l^{|m|}\,(\cos\theta)\,\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\,(im\varphi)\,, \qquad -l \leqslant m \leqslant l;$$

по Л. Шиффу [1] и Л. И. Блохинцеву [2]. В этой работе использован именно этот выбор фазового множителя в определении сферических функций.

$$2. \qquad Y_l^m(\theta,\varphi) = \begin{cases} (-1)^m \widetilde{P}_l^m(\cos\theta)\,\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(im\varphi), & 0 \leqslant m \leqslant l; \\ \widetilde{P}_l^{|m|}(\cos\theta)\,\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(im\varphi), & -l \leqslant m \leqslant -1; \end{cases}$$

по А. Месси [3];

$$3. \qquad Y_l^m(\theta,\varphi) = \begin{cases} \widetilde{P}_l^m(\cos\theta)\cdot\cos m\varphi, & 0 \leqslant m \leqslant l; \\ \widetilde{P}_l^{|m|}(\cos\theta)\cdot\sin|m|\varphi, & -l \leqslant m \leqslant -1; \end{cases}$$

по И.Н. Бронштейну и К.А Семендяеву [4];

$$4. \qquad Y_l^m(\theta,\varphi) = \begin{cases} (-1)^m i^l \widetilde{P}_l^m(\cos\theta)\,\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(im\varphi), & 0 \leqslant m \leqslant l; \\ i^l \widetilde{P}_l^{|m|}(\cos\theta)\,\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(im\varphi), & -l \leqslant m \leqslant -1; \end{cases}$$

по Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшицу [5];

$$5. \qquad Y_m^{(l)}(\theta,\varphi) = \begin{cases} (-1)^m \widetilde{P}_l^m(\cos\theta)\,\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(im\varphi), & 0 \leqslant m \leqslant l; \\ \widetilde{P}_l^{|m|}(\cos\theta)\,\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(im\varphi), & -l \leqslant m \leqslant -1; \end{cases}$$

по Дж. Эллиоту и П. Доберу [6];

$$6. \qquad Y_{l,m}(\theta,\varphi) = (-1)^m \widetilde{P}_l^{|m|}(\cos\theta)\,\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(im\varphi), \qquad -l \leqslant m \leqslant l;$$

по Н. Мотту и И. Снеддону [7].

В этой работе речь идет только о s-, p-, d-, и f- координатных функциях и ассоциированных с ними спинорах. Для них связь нормированных (при интегрировании по углам) полиномов нулевой, первой, второй и третьей степеней со сферическими функциям $Y_{l,m} \equiv Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ выражается следующим образом:

$$l = 0: \qquad \sqrt{\frac{1}{4\pi}} = Y_{0,0} \equiv s_0;$$

$$l = 1: \qquad \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,z = rY_{1,0} \equiv p_0,$$

$$\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,x = r\,\frac{Y_{1,1}+Y_{1,-1}}{\sqrt{2}} \equiv p_1, \qquad \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,y = r\,\frac{Y_{1,1}-Y_{1,-1}}{i\sqrt{2}} \equiv p_2;$$

$$l = 2: \qquad \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\,\left(3z^2 - r^2\right) = r^2 Y_{2,0} \equiv d_0,$$

$$\sqrt{\frac{15}{16\pi}}\,\left(x^2 - y^2\right) = r^2\frac{Y_{2,2}+Y_{2,-2}}{\sqrt{2}} \equiv d_1, \qquad \sqrt{\frac{15}{4\pi}}\,xy = r^2\frac{Y_{2,2}-Y_{2,-2}}{i\sqrt{2}} \equiv d_2;$$

$$\sqrt{\frac{15}{4\pi}}\, xz = r^2\, \frac{Y_{2,1}+Y_{2,-1}}{\sqrt{2}} \equiv d_3, \qquad \sqrt{\frac{15}{4\pi}}\, yz = r^2\, \frac{Y_{2,1}-Y_{2,-1}}{i\sqrt{2}} \equiv d_4;$$

$$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\left(x^2+y^2+z^2\right) \equiv \widetilde{d}_5;$$

$$l=3: \qquad \sqrt{\frac{7}{16\pi}}\,\left(5z^3-3zr^2\right) = r^3\, Y_{3,0} \equiv f_0,$$

$$\sqrt{\frac{21}{32\pi}}\,\left(5z^2-r^2\right)\, x = r^3 \frac{Y_{3,1}+Y_{3,-1}}{\sqrt{2}} \equiv f_1, \qquad \sqrt{\frac{21}{32\pi}}\,\left(5z^2-r^2\right)\, y = r^3 \frac{Y_{3,1}-Y_{3,-1}}{i\sqrt{2}} \equiv f_2,$$

$$\sqrt{\frac{105}{16\pi}}\,\left(x^2-y^2\right) z = r^3\, \frac{Y_{3,2}+Y_{3,-2}}{\sqrt{2}} \equiv f_3, \qquad \sqrt{\frac{105}{4\pi}}\, xyz = r^3\, \frac{Y_{3,2}-Y_{3,-2}}{i\sqrt{2}} \equiv f_4,$$

$$\sqrt{\frac{35}{32\pi}}\, x\, \left(x^2-3y^2\right) = r^3 \frac{Y_{3,3}+Y_{3,-3}}{\sqrt{2}} \equiv f_5, \; \sqrt{\frac{35}{32\pi}}\, y\, \left(3x^2-y^2\right) = r^3 \frac{Y_{3,3}-Y_{3,-3}}{i\sqrt{2}} \equiv f_6.$$

$$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} z\left(x^2+y^2+z^2\right) \equiv \widetilde{d}_7, \qquad \sqrt{\frac{3}{4\pi}} x\left(x^2+y^2+z^2\right) \equiv \widetilde{d}_8, \qquad \sqrt{\frac{3}{4\pi}} y\left(x^2+y^2+z^2\right) \equiv \widetilde{d}_9.$$

Полиномы $\widetilde{d}$-, $\widetilde{f}$- не могут быть выражены через функции $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ (не являются решениями уравнения Лапласа, не являются собственными функциями операторов квадрата углового момента и его проекции на выделенную ось). Роднит же их с полиномами d-,f-то, что они имеют одинаковую с ними степень. Функция $\widetilde{d}_5$ сферически симметрична, т.е. не зависит от углов сферической системы коорлинат, как s-функции, а $\widetilde{f}_7$, $\widetilde{f}_8$, $\widetilde{f}_9$ по угловой зависимости совпадают с p-функциями.

Для спиновых функций с проекциями спина $m_s = \pm 1/2$ используются обозначения α и β (спиноры α и β). Произведения s-, p-, d-, $\widetilde{d}$-, f- и $\widetilde{f}$-координатных функций на спиноры α и β называются s-, p-, d-, $\widetilde{d}$-, f- и $\widetilde{f}$-спинорами.

3. Базисные координатные функции НП точечных групп s-, p-, d- и f-типа

В таблицах этого раздела приведены линейные комбинации координатных функций f-типа, преобразующиеся по НП точечных групп и которые публикуются, по-видимому, впервые, но и s-, p-, d-типа. Это сделано для удобства пользования таблицами, когда вся необходимая информация собрана воедино в виде компактных таблиц. В качестве координатных s-, p-, d- f-функций могут быть не только атомоподобные функции, центрированные на атомах, но и их линейные комбинации, преобразующиеся по тем же НП.

Таблица 1. Симметрия координатных s-, p-, d- и f-функций для точечных групп C_i, C_s, C_2, C_{2v}, C_{3v}, C_{4v}, C_{5v}, C_{6v}, D_2, D_3, D_4, D_5, D_6, D_{2d}, D_{4d}, D_{6d}

БФНП	C_i	C_s	C_2	C_{2v}	C_{3v}	C_{4v}	C_{5v}	C_{6v}	D_2	D_3	D_4	D_5	D_6	D_{2d}	D_{4d}	D_{6d}
s_0	a_g	a'	a	a	a_1	a_1	a_1	a_1	a	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1
p_0	a_u	a''	a	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	b_1	a_2	a_2	a_2	a_2	b_2	b_2	b_2
p_1	a_u	a'	b	b_1	e	e	e_1	e_1	b_3	e	e	e_1	e_1	e	e	e_1
p_2	a_u	a'	b	b_2	e	e	e_1	e_1	b_2	e	e	e_1	e_1	e	e	e_1
d_0	a_g	a'	a	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1
d_1	a_g	a'	a	a_1	e	b_1	e_2	e_2	a	e	b_1	e_2	e_2	b_1	e_2	e_2
d_2	a_g	a'	a	a_2	e	b_2	e_2	e_2	b_1	e	b_2	e_2	e_2	b_2	e_2	e_2
d_3	a_g	a''	b	b_1	e	e	e_1	e_1	b_2	e	e	e_1	e_1	e	e_3	e_5
d_4	a_g	a''	b	b_2	e	e	e_1	e_1	b_3	e	e	e_1	e_1	e	e_3	e_5
f_0	a_u	a''	a	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	b_1	a_2	a_2	a_2	a_2	b_2	b_2	b_2
f_1	a_u	a'	b	b_1	e	e	e_1	e_1	b_3	e	e	e_1	e_1	e	e_1	e_5
f_2	a_u	a'	b	b_2	e	e	e_1	e_1	b_2	e	e	e_1	e_1	e	e_1	e_5
f_3	a_u	a''	a	a_1	e	b_1	e_2	e_2	b_1	e	b_2	e_2	e_2	a_2	e_2	e_4
f_4	a_u	a''	a	a_2	e	b_2	e_2	e_2	a	e	b_1	e_2	e_2	a_1	e_2	e_4
f_5	a_u	a'	b	b_1	a_1	e	e_2	b_1	b_3	a_2	e	e_2	b_2	e	e_3	e_3
f_6	a_u	a'	b	b_2	a_2	e	e_2	b_2	b_2	a_1	e	e_2	b_1	e	e_3	e_3

Таблица 2. Симметрия s-, p-, d- и f-функций для точечных групп C_3, C_4, C_5, C_6, S_4, T, T_d, O, Y

БФНП	C_3	C_4	C_5	C_6	S_4	БФНП	T	T_d	O	БФНП	Y
s_0	a	a	a	a	a	s	a	a_1	a_1	s_0	a
p_0	a	a	a	a	b	p_0	t	t_2	t_1	p_0	t_1
$p_1 - ip_2$	$e^{(1)}$	$e^{(1)}$	$e_1^{(1)}$	$e_1^{(1)}$	$e^{(1)}$	p_1	t	t_2	t_1	p_1	t_1
$p_1 + ip_2$	$e^{(2)}$	$e^{(2)}$	$e_1^{(2)}$	$e_1^{(2)}$	$e^{(2)}$	p_2	t	t_2	t_1	p_2	t_1
d_0	a	a	a	a	a	d_0	[a] e	e	e	d_0	h
$d_1 - id_2$	$e^{(2)}$	b	$e_2^{(1)}$	$e_2^{(1)}$	b	d_1	[a] e	e	e	d_1	h
$d_1 + id_2$	$e^{(1)}$	b	$e_2^{(2)}$	$e_2^{(2)}$	b	d_2	t	t_2	t_2	d_2	h
$d_3 - id_4$	$e^{(1)}$	$e^{(1)}$	$e_1^{(1)}$	$e_1^{(1)}$	$e^{(1)}$	d_3	t	t_2	t_2	d_3	h
$d_3 + id_4$	$e^{(2)}$	$e^{(2)}$	$e_1^{(2)}$	$e_1^{(2)}$	$e^{(2)}$	d_4	t	t_2	t_2	d_4	h
f_0	a	a	a	a	b	f_0	t	t_2	t_1	f_0	t_2
$f_1 - if_2$	$e^{(1)}$	$e^{(1)}$	$e_1^{(1)}$	$e_1^{(1)}$	$e^{(1)}$	$\sqrt{3}f_1 - \sqrt{5}f_5$	t	t_2	t_1	$\sqrt{3}f_3 - \sqrt{2}f_5$	t_2
$f_1 + if_2$	$e^{(2)}$	$e^{(2)}$	$e_1^{(2)}$	$e_1^{(2)}$	$e^{(2)}$	$\sqrt{3}f_2 + \sqrt{5}f_6$	t	t_2	t_1	$\sqrt{3}f_4 + \sqrt{2}f_6$	t_2
$f_3 - if_4$	$e^{(2)}$	b	$e_2^{(1)}$	$e_2^{(1)}$	a	f_4	a	a_1	a_2	f_1	g
$f_3 + if_4$	$e^{(1)}$	b	$e_2^{(2)}$	$e_2^{(2)}$	a	f_3	t	t_1	t_2	f_2	g
$f_5 + if_6$	a	$e^{(1)}$	$e_2^{(1)}$	b	$e^{(1)}$	$\sqrt{5}f_1 + \sqrt{3}f_5$	t	t_1	t_2	$\sqrt{2}f_3 + \sqrt{3}f_5$	g
$f_5 - if_6$	a	$e^{(2)}$	$e_2^{(2)}$	b	$e^{(2)}$	$\sqrt{5}f_2 - \sqrt{3}f_6$	t	t_1	t_2	$\sqrt{2}f_4 - \sqrt{3}f_6$	g

[a] $d_0 \mp id_1$ преобразуются по НП $e_1^{(1)}$ и $e_1^{(2)}$ группы T.

4. Базисные спиноры НП некубических двойных точечных групп

ТАБЛИЦА 3. Симметрия s- и p-спиноров для двойных точечных групп $\overline{\mathrm{C}}_i$, $\overline{\mathrm{C}}_s$, $\overline{\mathrm{C}}_2$, $\overline{\mathrm{C}}_{2v}$, $\overline{\mathrm{D}}_2$, $\overline{\mathrm{C}}_3$, $\overline{\mathrm{C}}_4$, $\overline{\mathrm{C}}_5$, $\overline{\mathrm{C}}_6$, $\overline{\mathrm{S}}_4$, $\overline{\mathrm{C}}_{3v}$, $\overline{\mathrm{C}}_{4v}$, $\overline{\mathrm{C}}_{5v}$, $\overline{\mathrm{C}}_{6v}$

БСНП	$\overline{\mathrm{C}}_i$	$\overline{\mathrm{C}}_s$	$\overline{\mathrm{C}}_2$	$\overline{\mathrm{C}}_{2v}$	$\overline{\mathrm{D}}_2$	БСНП	$\overline{\mathrm{C}}_3$	$\overline{\mathrm{C}}_4$	$\overline{\mathrm{C}}_5$	$\overline{\mathrm{C}}_6$	$\overline{\mathrm{S}}_4$	$\overline{\mathrm{C}}_{3v}$	$\overline{\mathrm{C}}_{4v}$	$\overline{\mathrm{C}}_{5v}$	$\overline{\mathrm{C}}_{6v}$
$s\alpha$	$\overline{a}_g$	$\overline{e}^{(2)}$	$\overline{e}^{(2)}$	$\overline{e}$	$\overline{e}$	$s\alpha$	$\overline{e}^{(2)}$	$\overline{e}_1^{(2)}$	$\overline{e}_1^{(2)}$	$\overline{e}_1^{(2)}$	$\overline{e}_2^{(2)}$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$
$s\beta$	$\overline{a}_g$	$\overline{e}^{(1)}$	$\overline{e}^{(1)}$	$\overline{e}$	$\overline{e}$	$s\beta$	$\overline{e}^{(1)}$	$\overline{e}_1^{(1)}$	$\overline{e}_1^{(1)}$	$\overline{e}_1^{(1)}$	$\overline{e}_2^{(1)}$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$
$p_0\alpha$	$\overline{a}_u$	$\overline{e}^{(1)}$	$\overline{e}^{(2)}$	$\overline{e}$	$\overline{e}$	$p_0\alpha$	$\overline{e}^{(2)}$	$\overline{e}_1^{(2)}$	$\overline{e}_1^{(2)}$	$\overline{e}_1^{(2)}$	$\overline{e}_1^{(1)}$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$
$p_0\beta$	$\overline{a}_u$	$\overline{e}^{(2)}$	$\overline{e}^{(1)}$	$\overline{e}$	$\overline{e}$	$p_0\beta$	$\overline{e}^{(1)}$	$\overline{e}_1^{(1)}$	$\overline{e}_1^{(1)}$	$\overline{e}_1^{(1)}$	$\overline{e}_1^{(2)}$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$
$p_1\alpha$	$\overline{a}_u$	$e^{(2)}$	$e^{(2)}$	$\overline{e}$	$\overline{e}$	$(p_1+ip_2)\alpha$	$\overline{b}$	$\overline{e}_2^{(2)}$	$\overline{e}_2^{(2)}$	$\overline{e}_2^{(2)}$	$\overline{e}_2^{(1)}$	${}^a\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_3$
$p_1\beta$	$\overline{a}_u$	$e^{(1)}$	$e^{(1)}$	$\overline{e}$	$\overline{e}$	$(p_1-ip_2)\beta$	$\overline{b}$	$\overline{e}_2^{(1)}$	$\overline{e}_2^{(1)}$	$\overline{e}_2^{(1)}$	$\overline{e}_2^{(2)}$	${}^a\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_3$
$p_2\alpha$	$\overline{a}_u$	$e^{(2)}$	$e^{(2)}$	$\overline{e}$	$\overline{e}$	$(p_1-ip_2)\alpha$	$\overline{e}^{(1)}$	$\overline{e}_1^{(1)}$	$\overline{e}_1^{(1)}$	$\overline{e}_1^{(1)}$	$\overline{e}_1^{(2)}$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$
$p_2\beta$	$\overline{a}_u$	$e^{(1)}$	$e^{(1)}$	$\overline{e}$	$\overline{e}$	$(p_1+ip_2)\beta$	$\overline{e}^{(2)}$	$\overline{e}_1^{(2)}$	$\overline{e}_1^{(2)}$	$\overline{e}_1^{(2)}$	$\overline{e}_1^{(1)}$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$

${}^a(p_1+ip_2)\alpha \mp i(p_1-ip_2)\beta$ преобразуются по НП $\overline{e}_1^{(1)}$ и $\overline{e}_1^{(2)}$ группы $\overline{\mathrm{C}}_{3v}$.

ТАБЛИЦА 4. Симметрия s- и p-спиноров при классификации по НП двойных точечных групп $\overline{\mathrm{D}}_3$, $\overline{\mathrm{D}}_4$, $\overline{\mathrm{D}}_5$, $\overline{\mathrm{D}}_6$, $\overline{\mathrm{D}}_{3h}$, $\overline{\mathrm{D}}_{5h}$, $\overline{\mathrm{D}}_{2d}$, $\overline{\mathrm{D}}_{4d}$, $\overline{\mathrm{D}}_{6d}$

БСНП	$\overline{\mathrm{D}}_3$	$\overline{\mathrm{D}}_4$	$\overline{\mathrm{D}}_5$	$\overline{\mathrm{D}}_6$	$\overline{\mathrm{D}}_{3h}$	$\overline{\mathrm{D}}_{5h}$	$\overline{\mathrm{D}}_{2d}$	$\overline{\mathrm{D}}_{4d}$	$\overline{\mathrm{D}}_{6d}$
$s\alpha$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_4$
$s\beta$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_4$
$p_0\alpha$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_3$
$p_0\beta$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_3$
$(p_1+ip_2)\alpha$	${}^a\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_5$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_4$	$\overline{e}_5$
$(p_1-ip_2)\beta$	${}^a\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_5$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_4$	$\overline{e}_5$
$(p_1-ip_2)\alpha$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_3$
$(p_1+ip_2)\beta$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_3$

${}^a(p_1+ip_2)\alpha \pm i(p_1-ip_2)\beta$ преобразуются по НП $\overline{e}_1^{(1)}$ и $\overline{e}_1^{(2)}$ группы $\overline{\mathrm{D}}_3$.

Таблица 5. Симметрия d-спиноров при классификации по НП двойных точечных групп $\overline{\mathrm{C}}_i$, $\overline{\mathrm{C}}_s$, $\overline{\mathrm{C}}_2$, $\overline{\mathrm{C}}_{2v}$, $\overline{\mathrm{D}}_2$, $\overline{\mathrm{C}}_4$, $\overline{\mathrm{S}}_4$, $\overline{\mathrm{D}}_4$, $\overline{\mathrm{D}}_{2d}$

БСНП	$\overline{\mathrm{C}}_i$	$\overline{\mathrm{C}}_s$	$\overline{\mathrm{C}}_2$	$\overline{\mathrm{C}}_{2v}$	$\overline{\mathrm{D}}_2$	БСНП	$\overline{\mathrm{C}}_4$	$\overline{\mathrm{S}}_4$	$\overline{\mathrm{D}}_4$	$\overline{\mathrm{D}}_{2d}$
$d_0\alpha$	$\overline{a}_g$	$\overline{e}^{(2)}$	$\overline{e}^{(2)}$	$\overline{e}$	$\overline{e}$	$d_0\alpha$	$\overline{e}_1^{(2)}$	$\overline{e}_2^{(2)}$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_1$
$d_0\beta$	$\overline{a}_g$	$\overline{e}^{(1)}$	$\overline{e}^{(1)}$	$\overline{e}$	$\overline{e}$	$d_0\beta$	$\overline{e}_1^{(1)}$	$\overline{e}_2^{(1)}$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_1$
$d_1\alpha$	$\overline{a}_g$	$\overline{e}^{(2)}$	$e^{(2)}$	$\overline{e}$	$\overline{e}$	$d_1\alpha$	$\overline{e}_2^{(1)}$	$\overline{e}_1^{(2)}$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_2$
$d_1\beta$	$\overline{a}_g$	$\overline{e}^{(1)}$	$e^{(1)}$	$\overline{e}$	$\overline{e}$	$d_1\beta$	$\overline{e}_2^{(2)}$	$\overline{e}_1^{(1)}$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_2$
$d_2\alpha$	$\overline{a}_g$	$\overline{e}^{(2)}$	$e^{(2)}$	$\overline{e}$	$\overline{e}$	$d_2\alpha$	$\overline{e}_2^{(1)}$	$\overline{e}_1^{(2)}$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_2$
$d_2\beta$	$\overline{a}_g$	$\overline{e}^{(1)}$	$e^{(1)}$	$\overline{e}$	$\overline{e}$	$d_2\beta$	$\overline{e}_2^{(2)}$	$\overline{e}_1^{(1)}$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_2$
$d_3\alpha$	$\overline{a}_g$	$\overline{e}^{(1)}$	$e^{(1)}$	$\overline{e}$	$\overline{e}$	$(d_3+id_4)\alpha$	$\overline{e}_2^{(2)}$	$\overline{e}_1^{(1)}$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_2$
$d_3\beta$	$\overline{a}_g$	$\overline{e}^{(2)}$	$e^{(2)}$	$\overline{e}$	$\overline{e}$	$(d_3-id_4)\beta$	$\overline{e}_2^{(1)}$	$\overline{e}_1^{(2)}$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_2$
$d_4\alpha$	$\overline{a}_g$	$\overline{e}^{(1)}$	$e^{(1)}$	$\overline{e}$	$\overline{e}$	$(d_3-id_4)\alpha$	$\overline{e}_1^{(1)}$	$\overline{e}_2^{(2)}$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_1$
$d_4\beta$	$\overline{a}_g$	$\overline{e}^{(2)}$	$e^{(2)}$	$\overline{e}$	$\overline{e}$	$(d_3+id_4)\beta$	$\overline{e}_1^{(2)}$	$\overline{e}_2^{(1)}$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_1$

Таблица 6. Симметрия d-спиноров при классификации по НП двойных точечных групп $\overline{\mathrm{C}}_3$, $\overline{\mathrm{C}}_5$, $\overline{\mathrm{C}}_6$, $\overline{\mathrm{C}}_{3v}$, $\overline{\mathrm{C}}_{4v}$, $\overline{\mathrm{C}}_{5v}$, $\overline{\mathrm{C}}_{6v}$, $\overline{\mathrm{D}}_3$, $\overline{\mathrm{D}}_5$, $\overline{\mathrm{D}}_6$, $\overline{\mathrm{D}}_{3h}$, $\overline{\mathrm{D}}_{5h}$, $\overline{\mathrm{D}}_{4d}$, $\overline{\mathrm{D}}_{6d}$

БСНП	$\overline{\mathrm{C}}_3$	$\overline{\mathrm{C}}_5$	$\overline{\mathrm{C}}_6$	$\overline{\mathrm{C}}_{3v}$	$\overline{\mathrm{C}}_{4v}$	$\overline{\mathrm{C}}_{5v}$	$\overline{\mathrm{C}}_{6v}$	$\overline{\mathrm{D}}_3$	$\overline{\mathrm{D}}_5$	$\overline{\mathrm{D}}_6$	$\overline{\mathrm{D}}_{3h}$	$\overline{\mathrm{D}}_{5h}$	$\overline{\mathrm{D}}_{4d}$	$\overline{\mathrm{D}}_{6d}$
$d_0\alpha$	$\overline{e}^{(2)}$	$\overline{e}_1^{(2)}$	$\overline{e}_1^{(2)}$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_4$
$d_0\beta$	$\overline{e}^{(1)}$	$\overline{e}_1^{(1)}$	$\overline{e}_1^{(1)}$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_4$
$(d_1+id_2)\alpha$	$\overline{e}^{(1)}$	$\overline{b}$	$\overline{e}_3^{(2)}$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_2$	${}^c\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_2$	${}^c\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_4$	$\overline{e}_6$
$(d_1-id_2)\beta$	$\overline{e}^{(2)}$	$\overline{b}$	$\overline{e}_3^{(1)}$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_2$	${}^c\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_2$	${}^c\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_4$	$\overline{e}_6$
$(d_1-id_2)\alpha$	$\overline{b}$	$\overline{e}_2^{(1)}$	$\overline{e}_2^{(1)}$	${}^a\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_3$	${}^a\overline{e}_1$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_4$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$
$(d_1+id_2)\beta$	$\overline{b}$	$\overline{e}_2^{(2)}$	$\overline{e}_2^{(2)}$	${}^a\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_3$	${}^a\overline{e}_1$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_4$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$
$(d_3+id_4)\alpha$	$\overline{b}$	$\overline{e}_2^{(2)}$	$\overline{e}_2^{(2)}$	${}^b\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_3$	${}^b\overline{e}_1$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_4$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$
$(d_3-id_4)\beta$	$\overline{b}$	$\overline{e}_2^{(1)}$	$\overline{e}_2^{(1)}$	${}^b\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_3$	${}^b\overline{e}_1$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_4$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$
$(d_3-id_4)\alpha$	$\overline{e}^{(1)}$	$\overline{e}_1^{(1)}$	$\overline{e}_1^{(1)}$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_4$
$(d_3+id_4)\beta$	$\overline{e}^{(2)}$	$\overline{e}_1^{(2)}$	$\overline{e}_1^{(2)}$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_2$	$\overline{e}_1$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_3$	$\overline{e}_4$

[a] $(d_1-id_2)\alpha \mp i(d_1+id_2)\beta$ преобразуются по НП $\overline{e}_1^{(1)}$ и $\overline{e}_1^{(2)}$ групп $\overline{\mathrm{C}}_{3\mathrm{v}}$ и $\overline{\mathrm{D}}_3$.

[b] $(d_3+id_4)\alpha \mp i(d_3-id_4)\beta$ преобразуются по НП $\overline{e}_1^{(1)}$ и $\overline{e}_1^{(2)}$ групп $\overline{\mathrm{C}}_{3\mathrm{v}}$ и $\overline{\mathrm{D}}_3$.

[c] $(d_1+id_2)\alpha \mp (d_1-id_2)\beta$ преобразуются по НП $\overline{e}_1^{(1)}$ и $\overline{e}_1^{(2)}$ групп $\overline{\mathrm{C}}_{5\mathrm{v}}$ и $\overline{\mathrm{D}}_5$.

Таблица 7. Симметрия f-спиноров при классификации по НП двойных точечных групп $\overline{\mathrm{C}}_i$, $\overline{\mathrm{C}}_s$, $\overline{\mathrm{C}}_2$, $\overline{\mathrm{C}}_{2v}$, $\overline{\mathrm{D}}_2$, $\overline{\mathrm{C}}_6$, $\overline{\mathrm{C}}_{3v}$, $\overline{\mathrm{C}}_{6v}$, $\overline{\mathrm{D}}_3$, $\overline{\mathrm{D}}_6$, $\overline{\mathrm{D}}_{3h}$

БСНП	$\overline{\mathrm{C}}_i$	$\overline{\mathrm{C}}_s$	$\overline{\mathrm{C}}_2$	$\overline{\mathrm{C}}_{2v}$	$\overline{\mathrm{D}}_2$	БСНП	$\overline{\mathrm{C}}_6$	$\overline{\mathrm{C}}_{3v}$	$\overline{\mathrm{C}}_{6v}$	$\overline{\mathrm{D}}_3$	$\overline{\mathrm{D}}_6$	$\overline{\mathrm{D}}_{3h}$
$f_0\alpha$	$\bar a_u$	$\bar e^{(2)}$	$\bar e^{(2)}$	$\bar e$	$\bar e$	$f_0\alpha$	$\bar e_1^{(2)}$	$\bar e_2$	$\bar e_1$	$\bar e_2$	$\bar e_1$	$\bar e_2$
$f_0\beta$	$\bar a_u$	$\bar e^{(1)}$	$\bar e^{(1)}$	$\bar e$	$\bar e$	$f_0\beta$	$\bar e_1^{(1)}$	$\bar e_2$	$\bar e_1$	$\bar e_2$	$\bar e_1$	$\bar e_2$
$f_1\alpha$	$\bar a_u$	$\bar e^{(1)}$	$\bar e^{(1)}$	$\bar e$	$\bar e$	$(f_1+if_2)\alpha$	$\bar e_2^{(2)}$	${}^{a}\bar e_1$	$\bar e_3$	${}^{a}\bar e_1$	$\bar e_3$	$\bar e_1$
$f_1\beta$	$\bar a_u$	$\bar e^{(2)}$	$\bar e^{(2)}$	$\bar e$	$\bar e$	$(f_1-if_2)\beta$	$\bar e_2^{(1)}$	${}^{a}\bar e_1$	$\bar e_3$	${}^{a}\bar e_1$	$\bar e_3$	$\bar e_1$
$f_2\alpha$	$\bar a_u$	$\bar e^{(1)}$	$\bar e^{(1)}$	$\bar e$	$\bar e$	$(f_1-if_2)\alpha$	$\bar e_1^{(1)}$	$\bar e_2$	$\bar e_1$	$\bar e_2$	$\bar e_1$	$\bar e_2$
$f_2\beta$	$\bar a_u$	$\bar e^{(2)}$	$\bar e^{(2)}$	$\bar e$	$\bar e$	$(f_1+if_2)\beta$	$\bar e_1^{(2)}$	$\bar e_2$	$\bar e_1$	$\bar e_2$	$\bar e_1$	$\bar e_2$
$f_3\alpha$	$\bar a_u$	$\bar e^{(2)}$	$\bar e^{(2)}$	$\bar e$	$\bar e$	$(f_3+if_4)\alpha$	$\bar e_3^{(2)}$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_3$
$f_3\beta$	$\bar a_u$	$\bar e^{(1)}$	$\bar e^{(1)}$	$\bar e$	$\bar e$	$(f_3-if_4)\beta$	$\bar e_3^{(1)}$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_3$
$f_4\alpha$	$\bar a_u$	$\bar e^{(2)}$	$\bar e^{(2)}$	$\bar e$	$\bar e$	$(f_3-if_4)\alpha$	$\bar e_2^{(1)}$	${}^{b}\bar e_1$	$\bar e_3$	${}^{b}\bar e_1$	$\bar e_3$	$\bar e_1$
$f_4\beta$	$\bar a_u$	$\bar e^{(1)}$	$\bar e^{(1)}$	$\bar e$	$\bar e$	$(f_3+if_4)\beta$	$\bar e_2^{(2)}$	${}^{b}\bar e_1$	$\bar e_3$	${}^{b}\bar e_1$	$\bar e_3$	$\bar e_1$
$f_5\alpha$	$\bar a_u$	$\bar e^{(1)}$	$\bar e^{(1)}$	$\bar e$	$\bar e$	$f_5\alpha$	$\bar e_3^{(1)}$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_3$
$f_5\beta$	$\bar a_u$	$\bar e^{(2)}$	$\bar e^{(2)}$	$\bar e$	$\bar e$	$f_5\beta$	$\bar e_3^{(2)}$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_3$
$f_6\alpha$	$\bar a_u$	$\bar e^{(1)}$	$\bar e^{(1)}$	$\bar e$	$\bar e$	$f_6\alpha$	$\bar e_3^{(1)}$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_3$
$f_6\beta$	$\bar a_u$	$\bar e^{(2)}$	$\bar e^{(2)}$	$\bar e$	$\bar e$	$f_6\beta$	$\bar e_3^{(2)}$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_3$

[a] $(f_1+if_2)\alpha \mp i(f_1-if_2)\beta$ преобразуются по НП $\bar e_1^{(1)}$ $(\bar e_1^{(2)})$ и $\bar e_1^{(2)}$ $(\bar e_1^{(1)})$ группы $\overline{\mathrm{C}}_{3\mathrm{v}}$ $(\overline{\mathrm{D}}_3)$.

[b] $(f_3-if_4)\alpha \mp i(f_3+if_4)\beta$ преобразуются по НП $\bar e_1^{(1)}$ $(\bar e_1^{(2)})$ и $\bar e_1^{(2)}$ $(\bar e_1^{(1)})$ группы $\overline{\mathrm{C}}_{3\mathrm{v}}$ $(\overline{\mathrm{D}}_3)$.

Таблица 8. Симметрия f-спиноров при классификации по НП двойных точечных групп $\overline{\mathrm{C}}_4$, $\overline{\mathrm{S}}_4$, $\overline{\mathrm{C}}_{4v}$, $\overline{\mathrm{D}}_4$, $\overline{\mathrm{D}}_{2d}$, $\overline{\mathrm{C}}_3$, $\overline{\mathrm{C}}_5$, $\overline{\mathrm{C}}_{5v}$, $\overline{\mathrm{D}}_5$, $\overline{\mathrm{D}}_{5h}$, $\overline{\mathrm{D}}_{4d}$, $\overline{\mathrm{D}}_{6d}$

БСНП	$\overline{\mathrm{C}}_4$	$\overline{\mathrm{S}}_4$	$\overline{\mathrm{C}}_{4v}$	$\overline{\mathrm{D}}_4$	$\overline{\mathrm{D}}_{2d}$	БСНП	$\overline{\mathrm{C}}_3$	$\overline{\mathrm{C}}_5$	$\overline{\mathrm{C}}_{5v}$	$\overline{\mathrm{D}}_5$	$\overline{\mathrm{D}}_{5h}$	$\overline{\mathrm{D}}_{4d}$	$\overline{\mathrm{D}}_{6d}$
$f_0\alpha$	$\bar e_1^{(2)}$	$\bar e_1^{(1)}$	$\bar e_1$	$\bar e_1$	$\bar e_2$	$f_0\alpha$	$\bar e^{(2)}$	$\bar e_1^{(2)}$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_3$
$f_0\beta$	$\bar e_1^{(1)}$	$\bar e_1^{(2)}$	$\bar e_1$	$\bar e_1$	$\bar e_2$	$f_0\beta$	$\bar e^{(1)}$	$\bar e_1^{(1)}$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_3$
$(f_1+if_2)\alpha$	$\bar e_2^{(2)}$	$\bar e_2^{(1)}$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_1$	$(f_1+if_2)\alpha$	$\bar b$	$\bar e_2^{(2)}$	$\bar e_3$	$\bar e_3$	$\bar e_5$	$\bar e_4$	$\bar e_5$
$(f_1-if_2)\beta$	$\bar e_2^{(1)}$	$\bar e_2^{(2)}$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_1$	$(f_1-if_2)\beta$	$\bar b$	$\bar e_2^{(1)}$	$\bar e_3$	$\bar e_3$	$\bar e_5$	$\bar e_4$	$\bar e_5$
$(f_1-if_2)\alpha$	$\bar e_1^{(1)}$	$\bar e_1^{(2)}$	$\bar e_1$	$\bar e_1$	$\bar e_2$	$(f_1-if_2)\alpha$	$\bar e^{(1)}$	$\bar e_1^{(1)}$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_3$
$(f_1+if_2)\beta$	$\bar e_1^{(2)}$	$\bar e_1^{(1)}$	$\bar e_1$	$\bar e_1$	$\bar e_2$	$(f_1+if_2)\beta$	$\bar e^{(2)}$	$\bar e_1^{(2)}$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_3$
$f_3\alpha$	$\bar e_2^{(1)}$	$\bar e_2^{(2)}$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_1$	$(f_3+if_4)\alpha$	$\bar e^{(1)}$	$\bar b$	${}^{a}\bar e_1$	${}^{a}\bar e_1$	$\bar e_1$	$\bar e_1$	$\bar e_1$
$f_3\beta$	$\bar e_2^{(2)}$	$\bar e_2^{(1)}$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_1$	$(f_3-if_4)\beta$	$\bar e^{(2)}$	$\bar b$	${}^{a}\bar e_1$	${}^{a}\bar e_1$	$\bar e_1$	$\bar e_1$	$\bar e_1$
$f_4\alpha$	$\bar e_2^{(1)}$	$\bar e_2^{(2)}$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_1$	$(f_3-if_4)\alpha$	$\bar b$	$\bar e_2^{(1)}$	$\bar e_3$	$\bar e_3$	$\bar e_5$	$\bar e_4$	$\bar e_5$
$f_4\beta$	$\bar e_2^{(2)}$	$\bar e_2^{(1)}$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_1$	$(f_3+if_4)\beta$	$\bar b$	$\bar e_2^{(2)}$	$\bar e_3$	$\bar e_3$	$\bar e_5$	$\bar e_4$	$\bar e_5$
$(f_5-if_6)\alpha$	$\bar e_2^{(2)}$	$\bar e_2^{(1)}$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_1$	$(f_5-if_6)\alpha$	$\bar e^{(2)}$	$\bar b$	${}^{b}\bar e_1$	${}^{b}\bar e_1$	$\bar e_1$	$\bar e_1$	$\bar e_1$
$(f_5+if_6)\beta$	$\bar e_2^{(1)}$	$\bar e_2^{(2)}$	$\bar e_2$	$\bar e_2$	$\bar e_1$	$(f_5+if_6)\beta$	$\bar e^{(1)}$	$\bar b$	${}^{b}\bar e_1$	${}^{b}\bar e_1$	$\bar e_1$	$\bar e_1$	$\bar e_1$
$(f_5+if_6)\alpha$	$\bar e_1^{(1)}$	$\bar e_1^{(2)}$	$\bar e_1$	$\bar e_1$	$\bar e_2$	$(f_5+if_6)\alpha$	$\bar e^{(2)}$	$\bar e_2^{(1)}$	$\bar e_3$	$\bar e_3$	$\bar e_4$	$\bar e_3$	$\bar e_6$
$(f_5-if_6)\beta$	$\bar e_1^{(2)}$	$\bar e_1^{(1)}$	$\bar e_1$	$\bar e_1$	$\bar e_2$	$(f_5-if_6)\beta$	$\bar e^{(1)}$	$\bar e_2^{(2)}$	$\bar e_3$	$\bar e_3$	$\bar e_4$	$\bar e_3$	$\bar e_6$

[a] $(f_3+if_4)\alpha \mp (f_3-if_4)\beta$ преобразуются по НП $\bar e_1^{(1)}$ $(\bar e_1^{(2)})$ и $\bar e_1^{(2)}$ $(\bar e_1^{(1)})$ группы $\overline{\mathrm{C}}_{5\mathrm{v}}$ $(\overline{\mathrm{D}}_5)$.

[b] $(f_5-if_6)\alpha \pm (f_5+if_6)\beta$ преобразуются по НП $\bar e_1^{(1)}$ $(\bar e_1^{(2)})$ и $\bar e_1^{(2)}$ $(\bar e_1^{(1)})$ группы $\overline{\mathrm{C}}_{5\mathrm{v}}$ $(\overline{\mathrm{D}}_5)$.

5. Базисные спиноры НП кубических двойных точечных групп и группы $\overline{\mathrm{Y}}$

В этом разделе структура таблиц иная, так как оказалось невозможным составить одинаковые линейные комбинации спиноров для всех групп этого раздела. Поэтому для каждой группы составлена отдельная таблица. Первый столбец таблицы содержит символы НП двойных точечных групп (в скобках указаны их размерности), а во втором столбце приведены преобразующиеся по ним линейные комбинации спиноров. Партнеры по представлению разделены запятыми, а независимые базисы, если их несколько, разделены точками с запятой.

ТАБЛИЦА 9. Симметрия s-, p-, d-, f- спиноров для двойной точечной группы $\overline{\mathrm{T}}$

НП	Базисные спиноры НП группы $\overline{\mathrm{T}}$
$\overline{e}(2)$	$s_0\alpha,\ s_0\beta;\quad f_4\alpha,\ f_4\beta;\quad p_0\alpha+(p_1+ip_2)\beta,\ p_0\beta-(p_1-ip_2)\alpha;$
	$d_2\alpha+(id_3+d_4)\beta,\ d_2\beta+(id_3-d_4)\alpha;$
	$\sqrt{8}f_0\alpha+[-\sqrt{3}(f_1+if_2)+\sqrt{5}(f_5-if_6)]\beta,$ $\sqrt{8}f_0\beta+[\sqrt{3}(f_1-if_2)-\sqrt{5}(f_5+if_6]\alpha;$
	$\sqrt{8}f_3\alpha+[-\sqrt{5}(f_1-if_2)-\sqrt{3}(f_5+if_6)]\beta,$ $\sqrt{8}f_3\beta+[\sqrt{5}(f_1+if_2)+\sqrt{3}(f_5-if_6)]\alpha;$
$\overline{g}^{(1)}(2)$	$2p_0\alpha-[(1+i\sqrt{3})p_1+(\sqrt{3}+i)p_2]\beta,\quad 2p_0\beta+[(1+i\sqrt{3})p_1-(\sqrt{3}+i)p_2]\alpha;$
	$(d_0-id_1)\alpha,\quad (d_0-id_1)\beta;$
	$2d_2\alpha-[(\sqrt{3}+i)d_3+(1+i\sqrt{3})d_4]\beta,\quad 2d_2\beta+[-(\sqrt{3}+i)d_3+(1+i\sqrt{3})d_4]\alpha;$
	$\sqrt{32}f_0\alpha+\{\sqrt{3}[(1+i\sqrt{3})f_1+(\sqrt{3}+i)f_2]-\sqrt{5}[(1+i\sqrt{3})f_5-(\sqrt{3}+i)f_6]\}\beta,$ $\sqrt{32}f_0\beta-\{\sqrt{3}[(1+i\sqrt{3})f_1-(\sqrt{3}+i)f_2]-\sqrt{5}[(1+i\sqrt{3})f_5+(\sqrt{3}+i)f_6]\}\alpha;$
	$\sqrt{32}f_3\alpha+\{\sqrt{3}[(1+i\sqrt{3})f_5+(\sqrt{3}+i)f_6]+\sqrt{5}[(1+i\sqrt{3})f_1-(\sqrt{3}+i)f_2]\}\beta,$ $\sqrt{32}f_3\beta-\{\sqrt{3}[(1+i\sqrt{3})f_5-(\sqrt{3}+i)f_6]+\sqrt{5}[(1+i\sqrt{3})f_1+(\sqrt{3}+i)f_2]\}\alpha;$
$\overline{g}^{(2)}(2)$	$2p_0\alpha+[(-1+i\sqrt{3})p_1+(\sqrt{3}-i)p_2]\beta,\quad 2p_0\beta+[(1-i\sqrt{3})p_1+(\sqrt{3}-i)p_2]\alpha;$
	$(d_0+id_1)\alpha,\quad (d_0+id_1)\beta;$
	$2d_2\alpha+[(\sqrt{3}-i)d_3-(1-i\sqrt{3})d_4]\beta,\ 2d_2\beta+[(\sqrt{3}-i)d_3+(1-i\sqrt{3})d_4]\alpha;$
	$\sqrt{32}f_0\alpha+\{\sqrt{3}[(1-i\sqrt{3})f_1-(\sqrt{3}-i)f_2]-\sqrt{5}[(1-i\sqrt{3})f_5-(\sqrt{3}-i)f_6]\}\beta,$ $\sqrt{32}f_0\beta-\{\sqrt{3}[(1-i\sqrt{3})f_1+(\sqrt{3}-i)f_2]-\sqrt{5}[(1-i\sqrt{3})f_5-(\sqrt{3}-i)f_6]\}\alpha;$
	$\sqrt{32}f_3\alpha+\{\sqrt{3}[(1-i\sqrt{3})f_5-(\sqrt{3}-i)f_6]+\sqrt{5}[(1-i\sqrt{3})f_1+(\sqrt{3}-i)f_2]\}\beta,$ $\sqrt{32}f_3\beta-\{\sqrt{3}[(1-i\sqrt{3})f_5+(\sqrt{3}-i)f_6]+\sqrt{5}[(1-i\sqrt{3})f_1-(\sqrt{3}-i)f_2]\}\alpha;$

ТАБЛИЦА 10. Симметрия s-, p-, d-, f-спиноров для двойной точечной группы $\overline{\mathrm{T}}_d$

НП	Базисные спиноры НП группы $\overline{\mathrm{T}}_d$
$\overline{e}_1(2)$	$s_0\alpha,\ s_0\beta;\ \ f_4\alpha,\ f_4\beta;\ \ \sqrt{8}f_3\alpha+[-\sqrt{5}(f_1-if_2)-\sqrt{3}(f_5+if_6]\beta,$ $\sqrt{8}f_3\beta+[\sqrt{5}(f_1+if_2)+\sqrt{3}(f_5-if_6]\alpha;$
$\overline{e}_2(2)$	$(p_1-ip_2)\alpha-p_0\beta,\ \ (p_1+ip_2)\beta+p_0\alpha;$ $d_2\alpha+i(d_3-id_4)\beta,\ \ d_2\beta+i(d_3+id_4)\alpha;$ $\sqrt{8}f_0\alpha+[-\sqrt{3}(f_1+f_2)+\sqrt{5}(f_5-if_6]\beta,$ $\sqrt{8}f_0\beta+[\sqrt{3}(f_1-if_2)-\sqrt{5}(f_5+if_6]\alpha;$
$\overline{g}(4)$	$p_1\alpha+p_0\beta,\ \ p_1\beta-p_0\alpha,\ \ (p_1+2ip_2)\alpha-p_0\beta,\ \ (p_1-2ip_2)\beta+p_0\alpha;$ $d_0\alpha,\ \ d_0\beta,\ \ d_1\alpha,\ \ d_1\beta;$ $2d_2\alpha-i(d_3-id_4)\beta,\ \ 2d_2\beta-i(d_3+id_4)\alpha,\ \ (d_3-id_4)\alpha,\ \ (d_3+id_4)\beta;$ $\sqrt{32}f_0\alpha+[\sqrt{3}(f_1+if_2)-\sqrt{5}(f_5-if_6)]\beta,$ $\sqrt{32}f_0\beta+[-\sqrt{3}(f_1-if_2)+\sqrt{5}(f_5+if_6)]\alpha,$ $[\sqrt{3}(f_1+if_2)-\sqrt{5}(f_5-if_6)]\alpha,\ \ [\sqrt{3}(f_1-if_2)-\sqrt{5}(f_5+if_6)]\beta;$ $\sqrt{32}f_3\alpha+[\sqrt{5}(f_1-if_2)+\sqrt{3}(f_5+if_6)]\beta,$ $\sqrt{32}f_3\beta+[-\sqrt{5}(f_1+if_2)-\sqrt{3}(f_5-if_6)]\alpha,$ $[\sqrt{5}(f_1-if_2)+\sqrt{3}(f_5+if_6)]\alpha,\ \ [\sqrt{5}(f_1+if_2)+\sqrt{3}(f_5-if_6)]\beta;$

ТАБЛИЦА 11. Симметрия s-, p-, d-, f-спиноров для двойной точечной группы $\overline{\mathrm{O}}$

НП	Базисные спиноры НП группы $\overline{\mathrm{O}}$
$\overline{e}_1(2)$	$s_0\alpha,\ \ s_0\beta;\ \ \ p_0\alpha+(p_1+ip_2)\beta,\ \ p_0\beta-(p_1-ip_2)\alpha;$ $\sqrt{8}f_0\alpha+[-\sqrt{3}(f_1+f_2)+\sqrt{5}(f_5-if_6]\beta,$ $\sqrt{8}f_0\beta+[\sqrt{3}(f_1-if_2)-\sqrt{5}(f_5+if_6]\alpha$
$\overline{e}_2(2)$	$d_2\alpha+i(d_3-id_4)\beta,\ \ d_2\beta+i(d_3+id_4)\alpha;\ \ \ \ f_4\alpha,\ \ f_4\beta;$ $\sqrt{8}f_3\alpha+[-\sqrt{5}(f_1-if_2)-\sqrt{3}(f_5+if_6]\beta,$ $\sqrt{8}f_3\beta+[\sqrt{5}(f_1+if_2)+\sqrt{3}(f_5-if_6]\alpha$
$\overline{g}(4)$	$p_0\alpha-p_1\beta,\ \ p_0\beta+p_1\alpha,\ \ p_0\alpha+(p_1-2ip_2)\beta,\ \ p_0\beta-(p_1+2ip_2)\alpha;$ $d_0\alpha,\ \ d_0\beta,\ \ d_1\alpha,\ \ d_1\beta;$ $(2d_2\alpha-(id_3+d_4)\beta,\ \ (2d_2\beta-(id_3-d_4)\alpha,\ \ (d_3-id_4)\alpha,\ \ (d_3+id_4)\beta;$ $\sqrt{32}f_0\alpha+[\sqrt{3}(f_1+if_2)-\sqrt{5}(f_5-if_6)]\beta,$ $\sqrt{32}f_0\beta+[-\sqrt{3}(f_1-if_2)+\sqrt{5}(f_5+if_6)]\alpha,$ $[\sqrt{3}(f_1+if_2)-\sqrt{5}(f_5-if_6)]\alpha,\ \ [\sqrt{3}(f_1-if_2)-\sqrt{5}(f_5+if_6)]\beta;$ $\sqrt{32}f_3\alpha+[\sqrt{5}(f_1-if_2)+\sqrt{3}(f_5+if_6)]\beta,$ $\sqrt{32}f_3\beta+[-\sqrt{5}(f_1+if_2)-\sqrt{3}(f_5-if_6)]\alpha,$ $[\sqrt{5}(f_1-if_2)+\sqrt{3}(f_5+if_6)]\alpha,\ \ [\sqrt{5}(f_1+if_2)+\sqrt{3}(f_5-if_6)]\beta;$

ТАБЛИЦА 12. Симметрия s-, p-, d-, f-спиноров для двойной точечной группы $\overline{\mathrm{Y}}$

НП	Базисные спиноры НП группы $\overline{\mathrm{Y}}$
$\overline{e}_1(2)$	$s_0\alpha,\ \ s_0\beta;\ \ \ p_0\alpha + (p_1 + ip_2)\beta,\ \ p_0\beta - (p_1 - ip_2)\alpha;$
$\overline{e}_2(2)$	$\sqrt{5}(f_1 + if_2)\alpha - [\sqrt{2}(f_3 + if_4) + \sqrt{3}(f_5 - if_6)]\beta,$ $\sqrt{5}(f_1 - if_2)\beta + [\sqrt{2}(f_3 - if_4) + \sqrt{3}(f_5 + if_6)]\alpha;$
$\overline{g}(4)$	$(p_0\alpha - p_1\beta),\ \ (p_0\beta + p_1\alpha),\ \ p_0\alpha + (p_1 - 2ip_2)\beta,\ \ p_0\beta - (p_1 + 2ip_2)\alpha;$ $2d_0\alpha + \sqrt{3}(d_3 + id_4)\beta,\ \ 2d_0\beta - \sqrt{3}(d_3 - id_4)\alpha,$ $2(d_1 - id_2)\alpha - (d_3 - id_4)\beta,\ \ \ 2(d_1 + id_2)\beta + (d_3 + id_4)\alpha;$
$\overline{i}(6)$	$\sqrt{3}d_0\alpha - (d_3 + id_4)\beta,\ \ \sqrt{3}d_0\beta + (d_3 - id_4)\alpha,\ \ (d_1 + id_2)\alpha,\ \ (d_1 - id_2)\beta,$ $(d_1 - id_2)\alpha + 2(d_3 - id_4)\beta,\ \ (d_1 + id_2)\beta - 2(d_3 + id_4)\alpha;$ $f_0\alpha,\ \ f_0\beta,\ \ (\sqrt{3}f_3 - \sqrt{2}f_5)\alpha,\ \ (\sqrt{3}f_3 - \sqrt{2}f_5)\beta,$ $(\sqrt{3}f_4 + \sqrt{2}f_6)\alpha,\ \ (\sqrt{3}f_4 + \sqrt{2}f_6)\beta;$ $(f_1 - if_2)\alpha,\ \ (f_1 + if_2)\beta,$ $[\sqrt{2}(f_3 + if_4) + \sqrt{3}(f_5 - if_6)]\alpha,\ \ [\sqrt{2}(f_3 - if_4) + \sqrt{3}(f_5 + if_6)]\beta,$ $\sqrt{5}(f_1 + if_2)\alpha + [\sqrt{2}(f_3 + if_4) + \sqrt{3}(f_5 - if_6)]\beta,$ $\sqrt{5}(f_1 - if_2)\beta - [\sqrt{2}(f_3 - if_4) + \sqrt{3}(f_5 + if_6)]\alpha;$

Литература

[1] Шифф Л. Квантовая механика. — Москва: Изд. иностранной литературы, 1959. — 475 с.
[2] Блохнцев Д.И. Основы квантовой механики. — Москва–Ленинград: Изд. технико-теоретической литературы, 1949. — 588 с.
[3] Мессиа А. Квантовая механика, том 2. — Москва: «Наука», 1979. — 584 с.
[4] Бронштейн И.Н., Семендяев К.А. Справочник по математике. — Москва: «Наука», 1986. — 544 с.
[5] Ландау Л.Д., Лифшиц И.М. Квантовая механика. — Москва: «Наука», 1963. — 703 с.
[6] Эллиот Дж., Добер П. Симметрия в физике, том 1. — Москва: «Мир», 1983. — 366 с.
[7] Мотт Н., Снеддон И. Волновая механика и ее применения. — Москва: «Наука», 1966. — 428 с.
[8] Фларри Р. Группы симметрии. Теория и химические приложения. — Москва: «Мир», 1983. — 396 с.
[9] Баличева Т.Г., Лобанева О.А. Электронные и колебательные спектры неорганических и координационных соединений. — Ленинград: Изд-во Ленинградского университета, 1983. — 119 с.
[10] Эварестов Р.А., Смирнов В.П. Методы теории групп в квантовой химии твердого тела. — Ленинград: Издательство Ленинградского университета, 1987. — 376 с.
[11] Evarestov R.A., Smirnov V.P. Site Symmetry in Crystals. Theory and Applications. — Berlin: Springer-Verlag, 1993. — 275 p.
[12] Эварестов Р.А., Смирнов В.П. Локальная симметрия в молекулах и кристаллах. — Санкт-Петербург: Издательство С.-Петербургского университета, 1997. — 372 с.
[13] Bilbao Crystallographic Server // URL: `http://www.cryst.ehu.es/cryst/`