The corresponding result for $\partial I/\partial\beta$ is rather complicated and will be omitted.

Most of the above results were obtained several years ago in the course of an investigation into non-radiative transitions in phosphors (unpublished but see HAUG [2]) undertaken at the University of Bristol under Professor N. F. MOTT, to whom I am very grateful for suggesting the problem and for many discussions. The author is engaged at present in finding approximate values for the overlap integral valid for large m, n and arbitrary β, γ. Should this be successful, the treatment of lattice-localised electron interactions becomes more promising; the work involved in using the most useful expansions (3) [or (5) and (9) to a lesser extent] in a problem involving large m or n, is prohibitive as no comprehensive tables of the appropriate polynomials are yet available.

[2] A. HAUG, Halbleiterprobleme I, p. 227, Herausgeber W. Schottky, F. Vieweg & Sohn, Braunschweig 1954.

Definition und Eigenschaften der bikubisch-sphärischen Harmonischen

Von HELMUT BROSS

Aus dem Institut für theoretische und angewandte Physik der Technischen Hochschule Stuttgart und Max-Planck-Institut für Metallforschung Stuttgart

(Z. Naturforschg. **14 a**, 892—900 [1959]; eingegangen am 11. Dezember 1958)

Durch Linearkombinationen von Produkten aus Kugelflächenfunktionen der beiden Variablenpaare ϑ, φ und ϑ', φ' werden neue Funktionen, die sogenannten bikubisch-sphärischen Harmonischen, gebildet, die invariant gegenüber allen Deckoperationen der kubisch-enantiomorph-hemiedrischen bzw. kubisch-holoedrischen Symmetriegruppen sind. Einige Eigenschaften der bikubisch-sphärischen Harmonischen werden näher untersucht. Für die Berechnung der Koeffizienten der Entwicklung von bikubisch-sphärischen Harmonischen nach Produkten von Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\vartheta,\varphi)\cdot Y_{l'm'}(\vartheta',\varphi')$ werden mehrere Methoden und die numerischen Werte für $l+l' \leqq 12$ angegeben.

1. Einführung; Allgemeine Betrachtungen des Transformationsverhaltens von Produkten aus Kugelflächenfunktionen

Bei verschiedenen Problemen in der Physik treten Funktionen auf, die von den Komponenten x, y, z und x', y', z' der beiden Vektoren $\mathfrak{r}$ und $\mathfrak{r}'$ eines kartesischen Koordinatensystems so abhängig sind, daß sie invariant gegenüber allen reinen Drehoperationen der kubischen Gruppe sind. Funktionen mit dieser Eigenschaft nennen wir bikubisch-symmetrisch. In rechtwinkligen Koordinaten sind die analytischen Ausdrücke für diese Funktionen sehr unübersichtlich und eignen sich daher kaum für die mathematische Behandlung bestimmter Aufgaben (z.B. zur Lösung einer Integralgleichung). Für viele Fälle hat es sich als günstig erwiesen, an Stelle der rechtwinkligen Koordinaten x, y, z und x', y', z' sphärische Polarkoordinaten durch

$$\mathfrak{r} = \begin{matrix} r\sin\vartheta\cos\varphi, \\ r\sin\vartheta\sin\varphi, \\ r\cos\vartheta, \end{matrix} \qquad \mathfrak{r}' = \begin{matrix} r'\sin\vartheta'\cos\varphi', \\ r'\sin\vartheta'\sin\varphi', \\ r'\cos\vartheta' \end{matrix} \tag{1}$$

einzuführen und die Funktionen mit bikubischer Symmetrie nach Produkten von Kugelflächenfunktionen zu entwickeln. Diese Entwicklung ist nach HOBSON [1] immer möglich, wenn die Funktion $F(\mathfrak{r},\mathfrak{r}')$ bei festgehaltenem $\mathfrak{r}'$ nur solche Unstetigkeiten besitzt, daß das Integral $\int F(\mathfrak{r},\mathfrak{r}')\,d\omega_{\mathfrak{r}}$ genommen über einen kleinen, jedoch beliebigen Bereich der Oberfläche im $\mathfrak{r}$-Raum einen endlichen Wert hat. Als Funktion von $\mathfrak{r}'$ soll $F(\mathfrak{r},\mathfrak{r}')$ dieselbe Eigenschaft besitzen. Im folgenden beschränken wir uns nur auf solche Funktionen, so daß folgende Entwicklung möglich ist *

$$F(\mathfrak{r},\mathfrak{r}') = \sum_{\substack{l\\m}} \sum_{\substack{l'\\m'}} F_{l\,l'}^{m\,m'}(r,r')\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi)\, Y_{l'm'}(\vartheta',\varphi'). \tag{2}$$

Aus den $(2\,l+1)\,(2\,l'+1)$ Produkten $Y_{lm}(\vartheta,\varphi)\cdot Y_{l'm'}(\vartheta',\varphi')$ lassen sich durch Ausreduktion Funktionen bilden, die sich wie Darstellungen $\mathfrak{D}_L$ der reinen Drehungsgruppe transformieren [2]

[1] E. W. HOBSON, The Theory of Spherical and Ellipsoidal Harmonics, Univers. Press, Cambridge 1931, p. 347.

* $Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$ sind normierte Kugelflächenfunktionen

$$Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = \left[\frac{(2\,l+1)}{4\,\pi}\,\frac{(l-m)\,!}{(l+m)\,!}\right]^{1/2} \cdot P_l^m(\cos\vartheta)\cdot e^{i\,m\,\varphi}.$$

[2] E. WIGNER, Gruppentheorie und ihre Anwendung auf die Quantenmechanik der Atomspektren, Vieweg, Braunschweig 1931.

$$Y_{LM}^{ll'}(\vartheta, \varphi; \vartheta', \varphi') = \sum_m C(l, l', L; m, M-m) \quad (3\,a)$$
$$\cdot\, Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \cdot Y_{l', M-m}(\vartheta', \varphi'),$$
$$\text{mit} \quad |l-l'| \leqq L \leqq l+1 \quad L \text{ ganz; einschl. } 0,$$
$$\text{und} \quad -L \leqq M \leqq L,$$

wobei die C die Clebsch–Gordan-Koeffizienten sind[3]. Wegen der Orthogonalität der Clebsch–Gordan-Koeffizienten gilt umgekehrt

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi)\, Y_{l', M-m}(\vartheta', \varphi') = \sum_L C(l, l', L; m, M-m)$$
$$\cdot\, Y_{LM}^{ll'}(\vartheta, \varphi; \vartheta', \varphi'). \quad (3\,b)$$

Die Entwicklung (2) läßt sich dann umformen zu

$$F(\mathfrak{r}, \mathfrak{r}') = \sum_{LMll'} F_{LM}^{ll'}(r, r')\, Y_{LM}^{ll'}(\vartheta, \varphi; \vartheta', \varphi'). \quad (3\,c)$$

Im Anschluß an diese Ausführungen über das Transformationsverhalten von Produkten aus Kugelflächenfunktionen bemerken wir noch, daß bei Multiplikation einer zur Darstellung $\mathfrak{D}_L$ gehörenden Funktion

$$g_L(\vartheta, \varphi; \vartheta', \varphi') = \sum_M g_{LM}^{ll'}\, Y_{LM}^{ll'}(\vartheta, \varphi; \vartheta', \varphi'),$$

mit dem Faktor

$$\cos\Theta = \cos\vartheta \cos\vartheta' + \sin\vartheta \sin\vartheta' \cos(\varphi - \varphi')$$

neue Funktionen entstehen, die zur selben Darstellung gehören. Die Funktion $\cos\Theta$, die nur vom Winkel zwischen dem Vektor $\mathfrak{r}$ und $\mathfrak{r}'$ abhängig ist, ist nämlich invariant gegenüber allen Drehungen des Koordinatensystems und gehört daher zur Darstellung $\mathfrak{D}_0$. Diese Eigenschaft läßt sich auf eine beliebige, nur von $\cos\Theta$ abhängige Funktion erweitern, was später öfter nötig sein wird.

2. Spezialisierung auf kubische Symmetrie

Durch die Ausreduktion haben wir Funktionen $Y_{LM}^{ll'}(\vartheta, \varphi; \vartheta', \varphi')$ erhalten, die gegenüber der vollständigen Drehgruppe des dreidimensionalen Raumes definiertes Verhalten haben. Für uns von Interesse sind nur solche Linearkombinationen der $Y_{LM}^{ll'}(\vartheta, \varphi; \vartheta', \varphi')$ mit $|M| \leqq L$, die invariant gegenüber allen reinen Drehungen der Oktaedergruppe sind. In der Bezeichnungsweise von Bethe[4] gehören die entsprechenden Funktionen zur Darstellung Γ_1 und Γ_1' der Oktaedergruppe.

Diese Funktionen nennen wir bikubisch-sphärische Harmonische und kürzen sie – abgesehen von einem Normierungsfaktor – mit $B_{ll'}^{(L)}(\vartheta, \varphi; \vartheta', \varphi')$ ab; l und l' geben dabei die Ordnung der Kugelfunktionen an, aus deren Produkt die Funktionen $Y_{LM}^{ll'}(\vartheta, \varphi; \vartheta', \varphi')$ durch Ausreduktion gewonnen wurden.

Wie Döring[5] zeigen konnte, gibt es $(n+1)$ linear unabhängige Polynome, die homogen vom Grade L sind und gegenüber den reinen Drehungen der Oktaedergruppe invariant sind, wenn $L = 12\,n$, $12\,n+4$, $12\,n+6$, $12\,n+8$, $12\,n+9$, $12\,n+10$ ist. Für $L = 12\,n+1$, $12\,n+2$, $12\,n+3$, $12\,n+5$, $12\,n+7$ und $12\,n+11$ gibt es n linear unabhängige Lösungen. Diese Eigenschaft gilt auch für die Linearkombinationen der $Y_{LM}^{ll'}(\vartheta, \varphi; \vartheta', \varphi')$, die sich nur in der Radialabhängigkeit von den obigen homogenen Polynomen unterscheiden. Durch passende Wahl der Linearkombinationen lassen sich diese Ausdrücke zueinander orthogonal machen. Die für ein bestimmtes Wertetripel l, l' und L möglichen bikubisch-sphärischen Harmonischen $B_{ll'}^{(L,k)}(\vartheta, \varphi; \vartheta', \varphi')$ werden durch den zweiten oberen Index k unterschieden, wobei $1 \leqq k \leqq n$ bzw. $(n+1)$ ist**.

Bikubisch-sphärische Harmonische mit verschiedenen oberen Indizes L und L' sind aufeinander orthogonal, weil sie zu verschiedenen Darstellungen der dreidimensionalen Drehgruppe gehören

$$\int B_{ll'}^{(L)}(\vartheta, \varphi; \vartheta', \varphi')\, B_{ll'}^{(L')}(\vartheta, \varphi; \vartheta', \varphi')\, d\omega\, d\omega' = 0,$$
$$\text{wenn } L \neq L'. \quad (4)$$

Da sie aus Produkten von Kugelflächenfunktionen bestehen, besitzen sie noch folgende weitere Orthogonalitätseigenschaft

$$\int B_{ll'}^{(L)}(\vartheta, \varphi; \vartheta', \varphi')\, B_{nn'}^{(L)}(\vartheta, \varphi; \vartheta', \varphi')\, d\omega\, d\omega' = 0,$$
$$\text{wenn} \quad n' \neq l' \quad \text{oder} \quad n \neq l \quad (5)$$

Bikubisch-sphärische Harmonische $B_{ll'}^{(L)}(\vartheta, \varphi; \vartheta', \varphi')$,

[3] Mit der Bezeichnungsweise der Clebsch–Gordan-Koeffizienten folgen wir M. E. Rose, Elementary Theory of Angular Momentum, New York–London 1957.

[4] H. Bethe, Ann. Phys., Lpz. (5) **3**, 133 [1929].

[5] W. Döring, Ann. Phys., Lpz. (7) **1**, 102 [1958]. – Unabhängig von Döring wurde die Häufigkeit der Funktionen der Darstellung $\mathfrak{D}_L$, die invariant gegenüber allen Symmetrieoperationen der Kristallklasse O sind, von L. Meichsner, MPI für Chemie, Mainz, berechnet. Ich danke Herrn Dr. Meichsner für die Mitteilung dieser Untersuchungen.

** Zur Vereinfachung der Bezeichnung lassen wir im folgenden sehr oft den Index k weg.

die zur Darstellung $\mathfrak{D}_L$ gehören, sind nur dann von Null verschieden, wenn die unteren Indizes folgender Ungleichung genügen:

$$|l-l'| \leqq L \leqq l+l'.$$

3. Konstruktion der bikubisch-sphärischen Harmonischen

Aus den bei BETHE [4] angegebenen Klassenprodukten der Oktaedergruppe folgt, daß jede bei der Klasse C_3 invariante Funktion invariant gegenüber allen reinen Drehoperationen der Oktaedergruppe ist. Eine nähere Untersuchung zeigt, daß Invarianz bei den beiden Elementen $C_3^{(1)}: (x,y,z) \to (-y,x,z)$ und $C_3^{(3)}: (x,y,z) \to (x,-z,y)$ für die Invarianz bei den 4 übrigen Elementen aus der Klasse C_3 hinreichend ist. Diese Eigenschaft läßt sich auch aus der bei VON DER LAGE und BETHE [6] aufgeführten Gruppentafel entnehmen. Eine bikubisch-sphärische Harmonische $B_{ll'}^{(L)}(\vartheta,\varphi;\vartheta',\varphi')$ muß also invariant gegenüber folgenden Symmetrieoperationen sein:

1. Drehung des Koordinatensystems um die vierzählige z-Achse um den Winkel $\gamma=\pi/2$,
2. Drehung des Koordinatensystems um die vierzählige y-Achse um den Winkel $\beta=\pi/2$.

Für die gesuchten Funktionen machen wir nun folgenden Ansatz [7]

$$B_{ll'}^{(L)}(\vartheta,\varphi;\vartheta',\varphi') = \sum_{M=-L}^{L} A_{LM}\, Y_{LM}^{ll'}(\vartheta,\varphi;\vartheta',\varphi') = 2\pi \sum_{m=-l}^{l} \sum_{m'=-l'}^{l'} \beta_{\substack{m m' \\ l\, l'}}^{(L)}\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi)\, Y_{l'm'}(\vartheta',\varphi'). \tag{6}$$

Zwischen den A_{LM} und den $\beta_{\substack{m m' \\ l\, l'}}^{(L)}$ besteht wegen Gl. (3 a) folgender Zusammenhang

$$\beta_{\substack{m, M-m \\ l\quad l'}}^{(L)} = \frac{1}{2\pi} A_{LM}\, c(l,l',L;m,M-m), \tag{7}$$

so daß nur noch die Koeffizienten A_{LM} mit Hilfe der obigen Symmetrieforderungen berechnet zu werden brauchen. Dazu benützen wir die Eigenschaft, daß sich bei einer dreidimensionalen Drehung $\Re(\alpha,\beta,\gamma)$ um die EULERschen Winkel α, β und γ Kugelflächenfunktionen desselben Grades unter sich transformieren [8].

$$\Re(\alpha,\beta,\gamma) \sum_{M=-L}^{L} A_{LM}\, Y_{LM}^{ll'} = \sum_{\substack{M=-L \\ M'}}^{L} A_{LM}\, D_{M'M}^{L}(\alpha,\beta,\gamma)\, Y_{LM'}^{ll'}. \tag{8}$$

Wegen $\quad D_{M'M}^{L}(0,0,\pi/2) = e^{-iM\pi/2}\,\delta_{MM'}$

führt die Forderung 1 auf $A_{LM}=0$, wenn nicht $M=0, \pm 4, \pm 8, \ldots$ ist. Die zweite Forderung führt auf folgendes homogenes Gleichungssystem

$$\sum_{M'} \left[D_{M'M}^{L}(0,\pi/2,0) - \delta_{MM'} \right] A_{LM'} = 0. \tag{9}$$

Wenn bei einem gegebenen L die Darstellung Γ_1 bzw. Γ_1' einmal auftritt, so sind die Entwicklungskoeffizienten A_{LM} und damit auch die bikubisch-sphärischen Harmonischen bis auf einen Normierungsfaktor eindeutig bestimmt. Sind dagegen für ein bestimmtes L mehrere Funktionen möglich, so können diese durch passende Linearkombinationen zueinander orthogonal gemacht werden. Zwischen den Koeffizienten A_{LM} und $A_{L,-M}$ läßt sich noch ein einfacher Zusammenhang ableiten, wenn wir berücksichtigen, daß zweimaliges Anwenden des Symmetrieelementes $C_3^{(3)}$ eine Drehung der y-Achse um den Winkel π bedeutet. Wegen

$$D_{M'M}^{L}(0,\pi,0) = (-1)^{L-M}\,\delta_{M',-M}$$

und der Bedingung für M folgt

$$A_{L,-M} = (-1)^{L-M} A_{LM} = (-1)^{L} A_{LM}. \tag{10}$$

Benützen wir noch die Eigenschaft der CLEBSCH-GORDAN-Koeffizienten, daß

$$C(j_1,j_2,j_3;-m_1,-m_2) = (-1)^{j_1+j_2-j_3}\, C(j_1,j_2,j_3;m_1,m_2)$$

ist [9], so ergibt sich für

$$\beta_{\substack{-m, -M+m \\ l\quad l'}}^{(L)} = (-1)^{l+l'}\, \beta_{\substack{m, M-m \\ l\quad l'}}^{(L)}. \tag{11}$$

Wir bemerken noch, daß die Koeffizienten A_{LM} mit den Entwicklungskoeffizienten der kubisch-sphärischen Harmonischen identisch sind, weil wir bei der obigen Ableitung nur gefordert haben, daß die Linearkombinationen der Y_{LM} gegenüber reinen Drehungen der Oktaedergruppe invariant sein sollen.

[6] F. C. VON DER LAGE u. H. A. BETHE, Phys. Rev. **71**, 612 [1947].

[7] Wir beschränken uns auf $l \leqq l'$.

[8] E. WIGNER, Gruppentheorie und ihre Anwendungen auf die Quantenmechanik der Atomspektren, Vieweg, Braunschweig 1931, S. 161.

[9] M. E. ROSE, l. c. [3], Seite 38.

4. Verhalten der bikubisch-sphärischen Harmonischen bei Inversion und Vertauschung der Variablenpaare

a) Inversion

Nach dem Verhalten bei Inversion $\mathfrak{J}$ kann man bikubisch-sphärische Harmonische mit *positiver* und *negativer* Darstellung unterscheiden.

Bikubisch-sphärische Harmonische mit positiver Darstellung (Funktionen vom Typus Γ_1) sind invariant gegenüber allen Deckoperationen der kubisch-holoedrischen Symmetriegruppe. Wegen

$$\mathfrak{J}, B_{l l'}^{(L)}\ (\vartheta, \varphi ; \vartheta', \varphi') = (-1)^{l+l'} B_{l l'}^{(L)}\ (\vartheta, \varphi ; \vartheta', \varphi')$$

muß $l+l'$ gerade sein. Berücksichtigen wir noch Gl. (11), dann läßt sich die Entwicklung (6) in folgende reelle Form bringen [10]

$$\begin{aligned} B_{l l'}^{(L)}\ (\vartheta, \varphi ; \vartheta', \varphi') &= \sum_{m=-l}^{l} \sum_{m'=-l'}^{l'} \beta_{\substack{m m' \\ l l'}}^{(L)} \Pi_l^m\ (\cos \vartheta)\ \Pi_{l'}^{m'}\ (\cos \vartheta') \cos(m \varphi + m' \varphi') \\ &= \sum_{m=0}^{l} \sum_{m'=-l'}^{l'} \frac{1}{1+\delta_{m,0}}\ \alpha_{\substack{m m' \\ l l'}}^{(L)} P_l^m\ (\cos \vartheta)\ P_{l'}^{|m'|} (\cos \vartheta') \cos(m \varphi + m' \varphi') . \end{aligned} \tag{12}$$

Die Normierung dieser Funktionen wählen wir so, daß für $\vartheta = \vartheta' = 0$ die Funktionen den Wert 1 annehmen; $\beta_{\substack{0 0 \\ l l'}}^{L} = \left[\frac{2}{(2 l+1)} \frac{2}{(2 l'+1)}\right]^{1/2}$. Für das numerische Rechnen hat sich diese Normierung, ebenso die Verwendung der Koeffizienten $\alpha_{\substack{m m' \\ l l'}}^{(L)}$, die im Unterschied zu den $\beta_{\substack{m m' \\ l l'}}^{(L)}$ rationale Funktionen sind, sehr bewährt.

Bikubisch-sphärische Harmonische mit *negativer* Darstellung (Funktionen vom Typus $\Gamma_1{}'$) erhält man, wenn $l+l'$ ungerade ist. In diesem Falle läßt sich die Entwicklung (6) auf folgende Form bringen [10]

$$\begin{aligned} B_{l l'}^{(L)}\ (\vartheta, \varphi ; \vartheta', \varphi') &= i \sum_{m=-l}^{l} \sum_{m'=-l'}^{l'} \beta_{\substack{m m' \\ l l'}}^{(L)} \Pi_l^m\ (\cos \vartheta)\ \Pi_{l'}^{m'}\ (\cos \vartheta') \sin(m \varphi + m' \varphi') \\ &= \sum_{m=0}^{l} \sum_{m'=-l'}^{l'} \frac{1}{1+\delta_{m,0}}\ \alpha_{\substack{m m' \\ l l'}}^{(L)} P_l^m\ (\cos \vartheta)\ P_{l'}^{|m'|} (\cos \vartheta') \sin(m \varphi + m' \varphi') . \end{aligned} \tag{13}$$

Die Normierung dieser Funktionen wählen wir so, daß für $\vartheta \to 0$ und $\vartheta' \to 0$ die Funktionen, wie $\sin \vartheta \cdot \sin \vartheta' \cdot \sin(\varphi - \varphi') \cdot \operatorname{sgn}(l'-l)$ verschwinden;

$$\beta_{\substack{1,-1 \\ l l'}}^{(L)} = -2\left[\frac{2}{2 l+1} \frac{(l-1)!}{(l+1)!} \frac{2}{2 l'+1} \frac{(l'-1)!}{(l'+1)!}\right]^{1/2} .$$

b) *Verhalten bei Vertauschung der beiden Variablenpaare ϑ, φ und ϑ', φ'*

Bis jetzt haben wir noch nicht berücksichtigt, daß keiner von den beiden Vektoren $\mathfrak{r}$ und $\mathfrak{r}'$ vor dem anderen besonders ausgezeichnet ist. Wir definieren nun symmetrische bikubisch-sphärische Harmonische $B_{l l'}^{(L,+)}\ (\vartheta, \varphi ; \vartheta', \varphi')$ durch die Forderung, daß sie ihren Wert bei der Permutation von ϑ, φ mit ϑ', φ' nicht ändern sollen und antisymmetrische, bikubisch-sphärische Harmonische $B_{l l'}^{(L,-)}\ (\vartheta, \varphi ; \vartheta', \varphi')$, die ihr Vorzeichen bei der angegebenen Permutation ändern sollen.

$$\begin{aligned} B_{l l'}^{(L,+)} (\vartheta, \varphi ; \vartheta', \varphi') &= \tfrac{1}{2}\left[B_{l l'}^{(L)}\ (\vartheta, \varphi ; \vartheta', \varphi') + B_{l l'}^{(L)}\ (\vartheta', \varphi' ; \vartheta, \varphi)\right] \\ &= B_{l l'}^{(L,+)}\ (\vartheta', \varphi' ; \vartheta, \varphi) \\ &= B_{l l'}^{(L,+)}\ (\vartheta, \varphi ; \vartheta', \varphi'), \end{aligned} \tag{14}$$

[10] Durch die spezielle Wahl der unteren Summationsgrenze und durch Zufügen des Faktors $(1+\delta_{m,0})$ wurde erreicht, daß jedes Produkt in der Summe nur einmal vorkommt. Es ist

$$\alpha_{\substack{m m' \\ l l'}}^{(L)} = \begin{cases} 2\left[\dfrac{2 l+1}{2} \dfrac{(1-m)!}{(1+m)!} \dfrac{2 l'+1}{2} \dfrac{(l'-m')!}{(l'+m')!}\right]^{1/2} \beta_{\substack{m m' \\ l l'}}^{(L)}, & m' \geqq 0, \\ (-1)^{m'} \cdot 2\left[\dfrac{2 l+1}{2} \dfrac{(1-m)!}{(1+m)!} \dfrac{2 l'+1}{2} \dfrac{(l'+m')!}{(l'-m')!}\right]^{1/2} \beta_{\substack{m m' \\ l l'}}^{(L)}, & m' < 0 . \end{cases}$$

$$B_{l l'}^{(L,-)}(\vartheta,\varphi;\vartheta',\varphi') = \tfrac{1}{2}\left[B_{l l'}^{(L)}(\vartheta,\varphi;\vartheta',\varphi') - B_{l l'}^{(L)}(\vartheta',\varphi';\vartheta,\varphi)\right] = -B_{l l'}^{(L,-)}(\vartheta',\varphi';\vartheta,\varphi) = -B_{l' l}^{(L,-)}(\vartheta,\varphi;\vartheta',\varphi') . \tag{15}$$

Für $l=l'$ verschwinden also die antisymmetrischen, bikubisch-sphärischen Harmonischen. Die in entsprechender Weise wie bei den bikubisch-sphärischen Harmonischen $B_{l l'}^{(L)}(\vartheta,\varphi;\vartheta',\varphi')$ definierten Entwicklungskoeffizienten $\beta_{\substack{m m'\\ l l'}}^{(L,+)}$ und $\beta_{\substack{m m'\\ l l'}}^{(L,-)}$ besitzen folgende Eigenschaft:

$$\beta_{\substack{m m'\\ l l'}}^{(L,+)} = +\beta_{\substack{m' m\\ l l'}}^{(L,+)}, \tag{16}$$

$$\beta_{\substack{m m'\\ l l'}}^{(L,-)} = -\beta_{\substack{m' m\\ l l'}}^{(L,-)}. \tag{17}$$

Mit den so definierten Funktionen läßt sich eine Funktion $F(\mathfrak{r},\mathfrak{r}')$ mit bikubischer Symmetrie in folgender Weise entwickeln:

$$F(\mathfrak{r},\mathfrak{r}') = \sum_{l l' L k} F_{l l'}^{(L,k,+)}(r,r')\, B_{l l'}^{(L,k,+)}(\vartheta,\varphi;\vartheta',\varphi') + \sum_{l l' l k} F_{l l'}^{(L,k,-)}(r,r')\, B_{l l'}^{(L,k,-)}(\vartheta,\varphi;\vartheta',\varphi') . \tag{18}$$

Der Verfasser dankt den Herren Professoren Dr. U. Dehlinger und Dr. A. Seeger für die Anregung zu dieser Arbeit und für viele eingehende Diskussionen, Herrn Dipl.-Phys. G. Schottky für wertvolle Hinweise und der Deutschen Forschungsgemeinschaft für ihre finanzielle Unterstützung. Herrn Dr. L. Meichsner, Max-Planck-Institut für Chemie, Mainz, danke ich noch besonders für den Hinweis, daß die Darstellung durch Verwendung von Clebsch–Gordan-Koeffizienten übersichtlicher wird und daß man zweckmäßigerweise die Ausreduktion nach der dreidimensionalen Drehgruppe und nach der Oktaedergruppe nacheinander ausführt.

Anhang

Zweckmäßige Berechnung der bikubisch-sphärischen Harmonischen

In Abschnitt 3 haben wir ein Verfahren abgeleitet, mit dem man bikubisch-sphärische Harmonische unter Benützung von Clebsch–Gordan-Koeffizienten berechnen kann. Wenn man sich für Funktionen mit größeren Werten für die unteren Indizes l und l' interessiert, ist die Berechnung der Clebsch–Gordan-Koeffizienten sehr mühevoll. Im folgenden wird ein Verfahren beschrieben, wie man die bikubisch-sphärischen Harmonischen sukzessive berechnen kann. Der Grundgedanke für dieses Verfahren ist der, daß man bei Multiplikation mit der gegenüber Drehungen invarianten Funktion $P_n(\cos\Theta)$ innerhalb derselben Funktionsfamilie mit der Darstellung $\mathfrak{D}_L$ bleibt. Mit dem Additionstheorem der Kugelfunktionen

$$P_n(\cos\Theta) = \frac{4\pi}{2n+1}\sum_{k=-n}^{+n}(-1)^k\, Y_{nk}(\vartheta,\varphi)\, Y_{n,-k}(\vartheta',\varphi') \tag{A 1}$$

wird

$$P_n(\cos\Theta)\, B_{l l'}^{(L)}(\vartheta,\varphi;\vartheta',\varphi') = \frac{8\pi^2}{2n+1}\sum_{m=-l}^{+l}\sum_{m'=-l'}^{+l'}\sum_{k=-n}^{n}(-1)^k\,\beta_{\substack{m m'\\ l l'}}^{(L)} \cdot Y_{lm}(\vartheta,\varphi)\, Y_{nk}(\vartheta,\varphi)\, Y_{l'm'}(\vartheta',\varphi')\, Y_{n-k}(\vartheta',\varphi') . \tag{A 2}$$

Nun läßt sich das Produkt zweier Kugelflächenfunktionen mit demselben Argument in eine Reihe von Kugelflächenfunktionen desselben Arguments umformen, und zwar gilt [11]

$$Y_{l_1 m_1}(\vartheta,\varphi)\, Y_{l_2 m_2}(\vartheta,\varphi) = \sum_{l}\left[\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l+1)}\right]^{1/2} C(l_1,l_2,l;m_1,m_2)\, C(l_1,l_2,l;0,0)\, Y_{l,m_1+m_2}(\vartheta,\varphi) . \tag{A 3}$$

Wir erhalten also für

$$P_n(\cos\Theta)\, B_{l l'}^{(L)}(\vartheta,\varphi;\vartheta',\varphi') = 2\pi\sum_{\bar l=|l-n|}^{(l+n)}\sum_{\bar l'=|l'-n|}^{(l'+n)}\sum_{m=-l}^{l}\sum_{m'=-l'}^{l'}\sum_{k=-n}^{n}(-1)^k\left[\frac{(2l+1)(2l'+1)}{(2\bar l+1)(2\bar l'+1)}\right]^{1/2} \cdot \beta_{\substack{m m'\\ l l'}}^{(L)} C(l,n,\bar l;m,k)\, C(l,n,\bar l;0,0)\, C(l',n,\bar l';m',-k)\, C(l',n,\bar l';0,0)\, Y_{\bar l,m+k}(\vartheta,\varphi)\cdot Y_{\bar l',m'-k}(\vartheta',\varphi') . \tag{A 4}$$

Alle Terme mit demselben Indexpaar $\bar l$ und $\bar l'$ lassen sich nun wieder zu bikubisch-sphärischen Harmonischen $B_{\bar l \bar l'}^{(L)}(\vartheta,\varphi;\vartheta',\varphi')$ zusammenfassen, so daß durch Multiplikation von $B_{l l'}^{(L)}(\vartheta,\varphi;\vartheta',\varphi')$ mit $P_n(\cos\Theta)$ folgende

[11] M. E. Rose, l. c. [3], Seite 61.

Entwicklung entsteht

$$P_n(\cos\Theta)\, B_{l\,l'}^{(L)}\,(\vartheta,\varphi;\vartheta',\varphi') = \sum_{\bar{l}=l-n}^{l+n}\ \sum_{\bar{l}'=l'-n}^{l'+n} b_{\substack{\bar{l}\,\bar{l}'\\ l\,l'}}^{(L,n)}\, B_{\bar{l}\,\bar{l}'}^{(L)}\,(\vartheta,\varphi;\vartheta',\varphi')\,. \tag{A 5}$$

Die Doppelindizierung von $b_{\substack{\bar{l}\,\bar{l}'\\ l\,l'}}^{(L,n)}$ ist deshalb nötig, weil eine bikubisch-sphärische Harmonische von verschiedenen Ausgangsfunktionen erreicht werden kann. Eine Unterscheidung der Koeffizienten für symmetrische und antisymmetrische Funktionen ist nicht nötig. Aus den Gln. (A 4) und (A 5) ergibt sich nun weiter

$$b_{\substack{\bar{l}\,\bar{l}'\\ l\,l'}}^{(L,n)}\ \beta_{\substack{\bar{m}\,\bar{m}'\\ \bar{l}\,\bar{l}'}}^{(L)} = \left[\frac{(2\,l+1)\,(2\,l'+1)}{(2\,\bar{l}+1)\,(2\,\bar{l}'+1)}\right]^{1/2} C(l,n,\bar{l};0,0)\ C(l',n,\bar{l}';0,0) \tag{A 6}$$

$$\cdot \sum_{k=-n}^{n} \beta_{\substack{\bar{m}-k,\ \bar{m}'+k\\ l'\quad l'}}^{(L)}\ C(l,n,\bar{l};\bar{m}-k,k)\ C(l',n,\bar{l}';\bar{m}'+k,k)\,.$$

Aus diesen Gleichungen läßt sich zunächst der Koeffizient $b_{\substack{\bar{l}\,\bar{l}'\\ l\,l'}}^{(L,n)}$ berechnen, weil wir wegen der in Abschnitt 4 getroffenen Normierung den Wert von $\beta_{\substack{0\,0\\ l\,l'}}^{(L)}$ bei Funktionen mit gerader Darstellung bzw. $\beta_{\substack{1,\,-1\\ l\,l'}}^{(L)}$ bei Funktionen mit negativer Darstellung angeben können. Der Vorteil der obigen Gleichung besteht darin, daß wir für n nur solche Werte zu verwenden brauchen, für die die CLEBSCH–GORDAN-Koeffizienten schon bekannt sind oder sich sehr leicht berechnen lassen, was insbesondere für $n=1$ der Fall ist. Wir können daher mit Gl. (A 6) sukzessive alle bikubisch-sphärischen Hormonischen berechnen, wenn nur eine Funktion bekannt ist, die zur Darstellung $\mathfrak{D}_L$ gehört. Als Ausgangsfunktionen benützt man am besten Linearkombinationen von kubisch-sphärischen Harmonischen, falls diese für das gewünschte L vorhanden sind.

$$B_{0\,L}^{(L,+)}\,(\vartheta,\varphi;\vartheta',\varphi') = \frac{K_L(\vartheta,\varphi) \pm K_L(\vartheta',\varphi')}{2}\,. \tag{A 7}$$

Zum Schluß geben wir noch einige Eigenschaften der in Gl. (A 5) definierten Entwicklungskoeffizienten $b_{\substack{\bar{l}\,\bar{l}'\\ l\,l'}}^{(L,n)}$ an. Da die CLEBSCH–GORDAN-Koeffizienten $C(l_1,l_2,L;m_1,m_2)$ nur dann von Null verschieden sind, wenn $|l_1-l_2| \leqq L \leqq l_1+l_2$ ist, können wir aus (A 6) folgende Beziehung entnehmen

$$b_{\substack{\bar{l}\,\bar{l}'\\ l\,l'}}^{(L,n)} = 0\,, \qquad \text{wenn}\ \begin{matrix} 2\,n > (l+l') + (\bar{l}+\bar{l}')\,, \\ 2\,n < (l+l') - (\bar{l}+\bar{l}')\,. \end{matrix} \tag{A 8}$$

Wegen der in Abschnitt 4 a getroffenen Normierung der bikubisch-sphärischen Harmonischen müssen die Entwicklungskoeffizienten folgende Gleichung erfüllen

$$\sum_{\bar{l},\bar{l}'} \operatorname{sgn}(\bar{l}'-\bar{l})\ b_{\substack{\bar{l}\,\bar{l}'\\ l\,l'}}^{(L,n)} = 1 \quad \text{für alle } l \text{ und } l'. \tag{A 9}$$

Für die numerische Berechnung der Entwicklungskoeffizienten $b_{\substack{\bar{l}\,\bar{l}'\\ l\,l'}}^{(L,n)}$ ist folgende Rekursionsformel gut geeignet

$$b_{\substack{\bar{l}\,\bar{l}'\\ l\,l'}}^{(L,n)} = \frac{2\,n-1}{n} \sum_{\lambda=l-n+1}^{l+n-1}\ \sum_{\lambda'=l'-n+1}^{l+n-1} b_{\substack{\lambda\,\lambda'\\ l\,l'}}^{(L,1)} \cdot b_{\substack{\bar{l}\,\bar{l}'\\ \lambda\,\lambda'}}^{(L,n-1)} - \frac{n-1}{n}\, b_{\substack{\bar{l}\,\bar{l}'\\ l\,l'}}^{(L,n-2)} \tag{A 10}$$

$$= \frac{2\,n-1}{n} \sum_{\lambda=l-n+1}^{l+n-1}\ \sum_{\lambda'=l'-n+1}^{l'+n-1} b_{\substack{\lambda\,\lambda'\\ l\,l'}}^{(L,n-1)}\ b_{\substack{\bar{l}\,\bar{l}'\\ \lambda\,\lambda'}}^{(L,1)} - \frac{n-1}{n}\, b_{\substack{\bar{l}\,\bar{l}'\\ l\,l'}}^{(L,n-2)}\,,$$

die sich mit der zwischen den LEGENDREschen Polynomen bestehenden Funktionalgleichung

$$P_n(\cos\Theta) = \frac{2\,n-1}{n}\cos\Theta\, P_{n-1}(\cos\Theta) - \frac{n-1}{n}\, P_{n-2}(\cos\Theta) \tag{A 11}$$

ableiten läßt.

$m\ m'$	$\alpha\substack{(4)\\ m m'\\ 2\;2}$	$\alpha\substack{(4)\\ m m'\\ 1\;3}$	$\alpha\substack{(4)\\ m m'\\ 0\;4}$
0 0	2	2	2
1−1	−2/9	−1/4	
2−2	1/72		
2 2	5/72		
1 3		1/24	
0 4			1/168

Tab. 1. Die Entwicklungskoeffizienten $\alpha\substack{(L)\\ m m'\\ l\;l'}$ für $L=4$ und $l+l'=4$.

$m\ m'$	$\alpha\substack{(4)\\ m m'\\ 1\;4}$	$\alpha\substack{(4)\\ m m'\\ 2\;3}$
1−1	1/10	1/18
2−2		−1/180
2 2		−1/180
1 3	−1/420	1/180
0 4	1/420	

Tab. 7. Die Entwicklungskoeffizienten $\alpha\substack{(L)\\ m m'\\ l\;l'}$ für $L=4$ und $l+l'=5$.

$m\ m'$	$\alpha\substack{(4)\\ m m'\\ 3\;3}$	$\alpha\substack{(4)\\ m m'\\ 2\;4}$	$\alpha\substack{(4)\\ m m'\\ 1\;5}$	$\alpha\substack{(6)\\ m m'\\ 3\;3}$	$\alpha\substack{(6)\\ m m'\\ 2\;4}$	$\alpha\substack{(6)\\ m m'\\ 1\;5}$	$\alpha\substack{(6)\\ m m'\\ 0\;6}$
0 0	2	2	2	2	2	2	2
1−1	1/36	1/20	1/5	−1/8	−2/15	−1/6	
2−2	−7/360	−1/40		1/200	1/180		
3−3	1/720			−1/7200			
3 1	−1/72			−7/240			
2 2	1/72	−1/120		−7/200	−7/180		
1 3	−1/72	1/120	−1/840	−7/240	−1/45	−1/48	
0 4		−1/120	1/840		−1/120	−1/216	−1/360
1−5			1/1680			1/4320	

Tab. 2. Die Entwicklungskoeffizienten $\alpha\substack{(L)\\ m m'\\ l\;l'}$ für $L=4$, 6 und $l+l'=6$.

$m\ m'$	$\alpha\substack{(4)\\ m m'\\ 4\;4}$	$\alpha\substack{(4)\\ m m'\\ 3\;5}$	$\alpha\substack{(4)\\ m m'\\ 2\;6}$	$\alpha\substack{(6)\\ m m'\\ 4\;4}$	$\alpha\substack{(6)\\ m m'\\ 3\;5}$	$\alpha\substack{(6)\\ m m'\\ 2\;6}$	$\alpha\substack{(6)\\ m m'\\ 1\;7}$
0 0	2	2	2	2	2	2	2
1−1	1/20	11/180	1/9	− 1/200	0	1/42	1/7
2−2	−11/3240	− 1/360	1/180	−11/1800	−1/140	−1/84	
3−3	− 1/2160	− 1/1440		17/50400	1/2520		
4−4	1/25920			− 1/100800			
4 0	1/216			1/40			
3 1	− 1/216	1/360		1/400	1/30		
2 2	1/216	− 1/360	1/2520	− 7/600	−1/140	1/56	
1 3	− 1/216	1/360	−1/2520	1/400	−1/168	−1/144	1/420
0 4	1/216	− 1/360	1/2520	1/40	1/168	1/2520	−1/840
1−5		− 1/4320	1/15120		−1/1680	−1/3360	−1/5040
2−6			1/60480			1/60480	

Tab. 3. Die Entwicklungskoeffizienten $\alpha\substack{(L)\\ m m'\\ l\;l'}$ für $L=4$, 6 und $l+l'=8$.

$m\ m'$	$\alpha\substack{(4)\\ m m'\\ 5\;5}$	$\alpha\substack{(4)\\ m m'\\ 4\;6}$	$\alpha\substack{(4)\\ m m'\\ 3\;7}$	$\alpha\substack{(6)\\ m m'\\ 5\;5}$	$\alpha\substack{(6)\\ m m'\\ 4\;6}$	$\alpha\substack{(6)\\ m m'\\ 3\;7}$
0 0	2	2	2	2	2	2
1−1	2/45	1/20	1/14	+ 1/50	1/42	13/336
2−2	−1/2520	0	1/420	− 3/1400	−11/5040	− 1/504
3−3	−1/10080	−1/10080	1/12600	−29/403200	− 1/10080	− 1/4032
4−4	−1/181440	−1/100800		1/151200	1/120960	
5−5	1/1814400			− 1/4838400		
5−1	1/15120			1/1920		
4 0	1/504	−1/840		1/240	− 1/48	
3 1	−1/504	1/840	−1/5880	13/4800	5/504	− 5/448
2 2	1/504	−1/840	1/5880	− 1/200	−23/10080	5/756
1 3	−1/504	1/840	−1/5880	13/4800	− 1/480	−191/60480
0 4	1/504	−1/840	1/5880	1/240	1/315	1/1260
1−5	1/15120	−1/16800	1/70560	1/1920	1/20160	−29/725760
2−6		−1/302400	1/705600		− 1/80640	− 1/181440
3−7			1/4233600			1/2903040

Tab. 4. Die Entwicklungskoeffizienten $\alpha\substack{(L)\\ m m'\\ l\;l'}$ für $L=4$, 6 und $l+l'=10$.

$m\ m'$	$\alpha_{6\,6}^{(4)\,m m'}$	$\alpha_{5\,7}^{(4)\,m m'}$	$\alpha_{7\,7}^{(4)\,m m'}$	$\alpha_{6\,6}^{(6)\,m m'}$	$\alpha_{5\,7}^{(6)\,m m'}$	$\alpha_{7\,7}^{(6)\,m m'}$
0 0	2	2	2	2	2	2
1−1	16/441	11/280	23/784	1/42	11/420	5/224
2−2	11/70560	1/2940	251/1143072	−11/16800	− 1/1680	− 1/6048
3−3	− 1/47040	−23/1411200	− 83/19051200	−43/1209600	− 1/25200	−197/15120000
4−4	− 1/793800	− 1/705600	− 1/3572100	− 1/4536000	− 1/1814400	− 1/3780000
5−5	− 1/25401600	− 1/11289600	− 79/8230118400	1/14515200	1/10886400	1/435456000
6−6	1/203212800		− 1/5486745600	− 1/435456000		1/2177280000
7−7			1/32920473600			− 1/60963840000
7−3			1/274337280			1/24192000
6−2	1/1693440		5/27433728	1/172800		1/864000
5−1	1/42336	− 1/94080	5/508032	1/9600	− 1/4320	7/288000
4 0	1/1008	− 1/1680	5/9072	1/1800	−17/2160	− 1/6000
3 1	− 1/1008	1/1680	− 5/9072	1/576	13/3360	13/12000
2 2	1/1008	− 1/1680	5/9072	− 1/400	−29/30240	− 1/720
1 3	− 1/1008	1/1680	− 5/9072	1/576	−13/15120	13/12000
0 4	1/1008	− 1/1680	5/9072	1/1800	1/630	− 1/6000
1−5	1/42336	− 1/50400	5/508032	1/9600	37/907200	7/288000
2−6	1/1693440	− 1/1411200	5/27433728	1/172800	− 1/3628800	1/864000
3−7		− 1/33868800	1/274337280		− 1/7257600	1/24192000

Tab. 5. Die Entwicklungskoeffizienten $\alpha_{l\,l'}^{(L)\,mm'}$ für $L=4$, 6 und $l+l'=10$.

$m\ m'$	$\alpha_{4\,4}^{(8)\,m m'}$	$\alpha_{3\,5}^{(8)\,m m'}$	$\alpha_{2\,6}^{(8)\,m m'}$	$\alpha_{5\,5}^{(8)\,m m'}$	$\alpha_{4\,6}^{(8)\,m m'}$	$\alpha_{6\,6}^{(8)\,m m'}$
0 0	2	2	2	2	2	2
1−1	− 2/25	− 1/12	− 2/21	− 1/75	− 1/84	1/147
2−2	1/450	1/420	1/336	−17/7350	−13/5040	−71/58800
3−3	− 1/22050	− 1/20160		73/705600	1/8640	−19/2116800
4−4	1/1411200			−31/12700800	− 1/362880	89/63504000
5−5				1/25401600		− 1/25401600
6−6						1/1524096000
6−2						1/907200
5−1				1/15120		− 1/75600
40	1/840			−11/7560	− 1/216	− 1/1800
31	1/525	1/360		1/12600	− 5/4536	− 1/7560
22	1/450	1/420	1/336	1/1050	37/45360	1/2100
13	1/525	1/672	1/756	1/12600	43/90720	− 1/7560
04	1/840	1/1512	1/2520	−11/7560	−29/68040	− 1/1800
1−5		− 1/60480	− 1/83160	1/15120	17/544320	− 1/75600
2−6			1/3991680		− 1/1088640	1/907200
62						13/12700800
53				−13/2540160		−13/12700800
44	13/282240			13/2540160	−13/3265920	+13/12700800
35		13/362880		13/2540160	+13/3265920	−13/12700800
26			13/798336		−13/3265920	13/12700800

Tab. 6. Die Entwicklungskoeffizienten $\alpha_{l\,l'}^{(L)\,mm'}$ für $L=4$, 6 und $l+l'=12$, 14.

$m\ m'$	$\alpha_{2\,5}^{(4)\,m m'}$	$\alpha_{3\,4}^{(4)\,m m'}$	$\alpha_{1\,6}^{(6)\,m m'}$	$\alpha_{2\,5}^{(6)\,m m'}$	$\alpha_{3\,4}^{(6)\,m m'}$
1−1	1/45	1/60	1/21	1/45	1/60
2−2	1/360	1/1080		−1/630	−1/900
3−3		−1/6480			1/25200
3 1		1/1080			1/200
2 2	1/2520	−1/1080		1/210	1/900
1 3	−1/2520	1/1080	1/504	−1/2520	−1/504
0 4	1/2520	−1/1080	−1/1890	−1/945	−1/420
1−5	−1/15120		−1/15120	−1/15120	

Tab. 8. Die Entwicklungskoeffizienten $\alpha_{l\,l'}^{(L)\,mm'}$ für $L=4$, 6 und $l+l'=7$.

$m \quad m'$	$\overset{(4)}{\underset{3\ 6}{\alpha\, m m'}}$	$\overset{(4)}{\underset{4\ 5}{\alpha\, m m'}}$	$\overset{(6)}{\underset{2\ 7}{\alpha\, m m'}}$	$\overset{(6)}{\underset{3\ 6}{\alpha\, m m'}}$	$\overset{(6)}{\underset{4\ 5}{\alpha\, m m'}}$
1−1	1/126	1/150	1/84	1/126	1/150
2−2	1/1575	1/2700	1/1008	1/5040	1/12600
3−3	1/25200	1/226800		−1/30240	−1/50400
4−4		−1/453600			1/1209600
4 0		−1/3780			−1/480
3 1	−1/8820	1/3780		−1/504	1/1800
2 2	1/8820	−1/3780	−5/6048	1/1120	1/3150
1 3	−1/8820	1/3780	1/2160	−1/6048	−3/5600
0 4	1/8820	−1/3780	−1/5040	−1/5040	1/10080
1−5	−1/105840	1/75600	1/181440	1/60480	1/20160
2−6	−1/1058400		−1/725760	−1/725760	

Tab. 9. Die Entwicklungskoeffizienten $\overset{(L)}{\underset{l\ l'}{\alpha\, mm'}}$ für $L=4$, 6 und $l+l'=9$.

$m \quad m'$	$\overset{(4)}{\underset{4\ 7}{\alpha\, m m'}}$	$\overset{(4)}{\underset{5\ 6}{\alpha\, m m'}}$	$\overset{(6)}{\underset{3\ 8}{\alpha\, m m'}}$	$\overset{(6)}{\underset{4\ 7}{\alpha\, m m'}}$	$\overset{(6)}{\underset{5\ 6}{\alpha\, m m'}}$
1−1	1/280	1/315	1/216	1/280	1/315
2−2	1/5040	1/7056	1/3780	1/8505	1/12600
3−3	1/117600	1/282240	1/90720	1/1360800	− 1/604800
4−4	1/2822400	−1/25401600		− 1/2721600	− 1/5443200
5−5		−1/50803200			1/108864000
5−1		−1/423360			− 1/43200
4 0	1/23520	−1/10080		1/1080	− 1/2160
3 1	−1/23520	1/10080	1/2592	−17/30240	1/10080
2 2	1/23520	−1/10080	−1/3780	19/68040	1/8400
1 3	−1/23520	1/10080	1/6048	− 1/12960	−29/151200
0 4	1/23520	−1/10080	−1/11340	− 1/22680	1/8400
1−5	−1/470400	1/302400	1/362880	23/5443200	1/302400
2−6	1/8467200	1/8467200	0	1/8164800	1/1814400
3−7	−1/118540800		−1/65318400	− 1/65318400	

Tab. 10. Die Entwicklungskoeffizienten $\overset{(L)}{\underset{l\ l'}{\alpha\, mm'}}$ für $L=4$, 6 und $l+l'=11$.

L	0	4	6	8
B_{00}	4.00000000	—	—	—
B_{11}	2.30940108	—	—	—
B_{22}	1.78885438	1.46059348	—	—
B_{13}	—	1.06904496	—	—
B_{33}	1.51185789	1.54743588	2.45647832	
B_{04}	—	1.23442679	—	—
B_{24}	—	1.08320512	1.76886655	—
B_{44}	1.33333333	1.44650059	2.79682359	1.00309424
B_{15}	—	0.95618288	1.88561808	—
B_{35}	—	0.99522669	1.97948664	0.71730961
B_{55}	1.20604538	1.34196341	2.72363393	1.19246901
B_{06}	—	—	2.21880078	—
B_{26}	—	0.81882610	1.96675668	0.74438737
B_{46}	—	0.91547544	1.91134394	0.84550201
B_{66}	1.10940039	1.25126832	2.59375672	1.12342453
B_{17}	—	—	1.74574312	
B_{37}	—	0.73050962	1.84181710	
B_{57}	—	0.84948964	1.81142757	
B_{77}	1.03279556	1.17441566	2.46247571	

Tab. 11. Die Oberflächenintegrale $\left\{\frac{1}{\pi^2}\int\left[B_{ll'}^{(L,+)}(\vartheta,\varphi;\vartheta',\varphi')\right]^2 d\omega\, d\omega'\right\}^{1/2}$.