ՀԱՅԿԱԿԱՆ ՔԻՄԻԱԿԱՆ ԱՄՍԱԳԻՐ
АРМЯНСКИЙ ХИМИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ
XXIII, № 9, 1970

ОБЩАЯ И ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

УДК 530.145

# МЕТОД СИММЕТРИЗИРОВАННЫХ ФУНКЦИЙ; ЕГО ПРИМЕНЕНИЕ К МОЛЕКУЛЯРНЫМ И КРИСТАЛЛИЧЕСКИМ СИСТЕМАМ

## I. О ПРАВИЛАХ КВАЗИДИАГОНАЛИЗАЦИИ ВЕКОВЫХ ОПРЕДЕЛИТЕЛЕЙ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ НА ОСНОВАНИИ ГРУПП СОВМЕСТНОГО ЦИКЛИРОВАНИЯ

О. К. ДАВТЯН, В. Е. КЛИМЕНКО и Ф. В. МАКОРДЕЙ

Всесоюзный научно-исследовательский и проектно-конструкторский институт комплексного электрооборудования

Поступило 24 III 1969

Рассматриваются некоторые важные свойства групп совместного циклирования; доказана теорема, определяющая порядок этих групп. Показано, что на основании свойств групп совместного циклирования можно найти правила разложения вековых определителей, не прибегая в конечном счете к теории групп и зная лишь число атомных орбиталей и число подсистем эквивалентных орбиталей.

Доказана теорема, согласно которой максимальный порядок субопределителей разложения равен числу подсистем эквивалентных орбиталей. Даны правила определения порядка и числа всех субопределителей разложения векового уравнения.

Библ. ссылок 3.

В данной серии работ ставится задача нахождения обобщенных уравнений симметризированных функций (СФ), применение которых важно при решении многих задач в одноэлектронном приближении. Применение СФ к молекулярным и кристаллическим системам приводит к такой степени упрощения задач, которая принципиально возможна с применением методов теории групп. Во многих случаях СФ являются молекулярными орбиталями с известными вариационными параметрами.

В настоящем сообщении показано, как на основе некоторых свойств групп совместного циклирования можно найти простые правила разложения вековых определителей на субопределители, не прибегая к теории групп. Как мы увидим в следующих сообщениях, эти правила являются важным приложением к методу симметризированных функций.

В предыдущих работах [1, 2] нами были предложены методы расчета молекул, основанные на применении групп перестановок эквивалентных орбиталей. Эти методы основываются на том факте, что преобразования симметрии молекул по методу точечных групп фактически приводят только к перестановке эквивалентных орбиталей (ЭО), поэтому соответствующие точечные группы можно заменить изоморфными им циклическими подгруппами групп перестановок эквивалентных орбиталей. Среди этих подгрупп перестановок наиболее интересными оказались подгруппы совместного циклирования, прямого произведения и диэдрических перестановок эквивалентных орбиталей. Все существующие типы точечных групп фактически можно свести только к одному из этих типов подгрупп циклических перестановок. Мало того, во многих случаях нет необходимости знать, к какой точечной группе относится данная молекула; достаточно знать число подсистем эквивалентных орбиталей и атомы, относящиеся к этим подсистемам. Часто химику, независимо от определения геометрической структуры молекулы, но при знании химической структуры, известно, какие атомы и их орбитали в молекуле эквивалентны. Одним из критериев эквиалентности является химическая инвариантность молекулы по отношению к перестановкам атомов или радикалов у эквивалентных орбиталей; при таких перестановках не должны получаться новые, различимые химически, изомеры.

Для приближенного решения задач (которое может быть впоследствии уточнено по теории возмущений) можно считать, что полная собственная функция системы инвариантна также к перестановкам приближенно эквивалентных орбиталей. В этом случае метод позволяет рассчитать также много несимметричных молекул. Среди отмеченных трех типов подгрупп перестановок эквивалентных орбиталей наиболее простой и удобной для применения в области молекулярных и кристаллических систем является подгруппа совместного циклирования. Остановимся на некоторых свойствах этой группы.

1. Рассмотрим пример молекулярной системы, состоящей из девяти атомных орбиталей, которые распределены по трем подсистемам эквивалентных орбиталей:

$$\underbrace{\psi_{11},\ \psi_{12}};\quad \underbrace{\psi_{23},\ \psi_{24},\ \psi_{25}};\quad \underbrace{\psi_{36},\ \psi_{37},\ \psi_{38},\ \psi_{39}}. \tag{1}$$

Здесь первые индексы показывают номера подсистем ЭО, а вторые—порядковые номера АО; внутри каждой подсистемы орбитали эквивалентны. Циклическая перестановка ЭО внутри каждой подсистемы дает следующие три циклические группы (их обозначаем через $P_c$):

$$P_{c_1}\left[\begin{array}{l} p_{11}=E\equiv\begin{pmatrix} 1_1 & 2_1 & 3_2 & 4_2 & 5_2 & 6_3 & 7_3 & 8_3 & 9_3\\ 1_1 & 2_1 & 3_2 & 4_2 & 5_2 & 6_3 & 7_3 & 8_3 & 9_3\end{pmatrix};\\ p_{12}=\begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot\\ 2_1 & 1_1 & 3_2 & 4_2 & 5_2 & 6_3 & 7_3 & 8_3 & 9_3\end{pmatrix}; \end{array}\right]$$

$$P_{c_2}\left[\begin{array}{l} p_{21}=E\\ p_{22}=\begin{pmatrix} 1_1 & 2_1 & 3_2 & 4_2 & 5_2 & 6_3 & 7_3 & 8_3 & 9_3\\ 1_1 & 2_1 & 4_2 & 5_2 & 3_2 & 6_3 & 7_3 & 8_3 & 9_3\end{pmatrix},\\ p_{23}=\begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot\\ 1_1 & 2_1 & 5_2 & 3_2 & 4_2 & 6_3 & 7_3 & 8_3 & 9_3\end{pmatrix}; \end{array}\right] \tag{2}$$

$$P_{c_3}\left[\begin{array}{l} p_{31}=E, \\ p_{32}=\begin{pmatrix} 1_1 & 2_1 & 3_2 & 4_2 & 5_2 & 6_3 & 7_3 & 8_3 & 9_3 \\ 1_1 & 2_1 & 3_2 & 4_2 & 5_2 & 7_3 & 8_3 & 9_3 & 6_3 \end{pmatrix}, \\ p_{33}=\begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 1_1 & 2_1 & 3_2 & 4_2 & 5_2 & 8_3 & 9_3 & 6_3 & 7_3 \end{pmatrix}, \\ p_{34}=\begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 1_1 & 2_1 & 3_2 & 4_2 & 5_2 & 9_3 & 6_3 & 7_3 & 8_3 \end{pmatrix}. \end{array}\right] \tag{2}$$

В дальнейшем эти циклические группы будем называть *простыми или элементарными циклами.*

Совокупность же перестановок, полученных при одновременном (совместном) циклировании всех ЭО внутри каждой подсистемы, образует группу, которая также является абелевой. Ее мы называли *группой совместного циклирования* и обозначали через $[P]$ [1]. Для рассматриваемой системы эта группа состоит из 12 элементов:

$$[P]\left[\begin{array}{l} p_{1}=E, \\ p_{2}=\begin{pmatrix} 1_1 & 2_1 & 3_2 & 4_2 & 5_2 & 6_3 & 7_3 & 8_3 & 9_3 \\ 2_1 & 1_1 & 4_2 & 5_2 & 3_2 & 7_3 & 8_3 & 9_3 & 6_3 \end{pmatrix}, \\ p_{3}=\begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 1_1 & 2_1 & 5_2 & 3_2 & 4_2 & 8_3 & 9_3 & 6_3 & 7_3 \end{pmatrix}, \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ p_{12}=\begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 2_1 & 1_1 & 5_2 & 3_2 & 4_2 & 9_3 & 6_3 & 7_3 & 8_3 \end{pmatrix}. \end{array}\right] \tag{3}$$

Нетрудно проверить, что каждый элемент группы $[P]$ представляет собой произведение элементов составляющих ее простых циклов [2]:

$$\left.\begin{array}{lll} p_1=p_{11}\cdot p_{21}\cdot p_{31}=E; & p_2=p_{12}\cdot p_{22}\cdot p_{32}; & p_3=p_{11}\cdot p_{23}\cdot p_{33}, \\ p_4=p_{12}\cdot p_{21}\cdot p_{34}; & p_5=p_{11}\cdot p_{22}\cdot p_{31};\cdots; & p_{12}=p_{12}\cdot p_{23}\cdot p_{34}. \end{array}\right\} \tag{4}$$

Это является свойством группы $[P]$ любого порядка. Для использования группы совместного циклирования важно знать ее порядок. Для этого докажем следующую теорему: *Порядок группы совместного циклирования равен наименьшему общему кратному (н. о. к.) чисел подсистем эквивалентных орбиталей.* А так как число ЭО в каждой подсистеме $\alpha$ равно порядку соответствующего простого цикла $P_{c_2}$, то теорему можно еще сформулировать так: порядок группы $[P]$ равен н. о. к. порядков составляющих элементарных циклов.

Как было показано, каждый элемент группы $[P]$ представляет собой произведение элементов составляющих ее циклов, т. е.

$$p_l=\prod_{\alpha=1}^{n} p_{\alpha j}; \tag{5}$$

здесь $\alpha$—номера подсистем. Так как элементы абелевых групп коммутируют, то

$$p_i^a = \left(\prod_{\alpha=1}^{n} p_{\alpha j}\right)^a = \prod_{\alpha=1}^{n} p_{\alpha j}^a, \tag{6}$$

где $a$ — любое целое положительное число, в качестве которого мы возьмем $a = g$, являющееся н. о. к. чисел ЭО в подсистемах, $N_\alpha$ ($\alpha = 1, 2, \cdots, n$). Тогда, согласно (6),

$$p_i^g = \prod_{\alpha=1}^{n} p_{\alpha j}^g = \prod_{\alpha=1}^{n} p_{\alpha j}^{d_\alpha N_\alpha}. \tag{7}$$

Здесь по условию, $d_\alpha = g/N_\alpha$. А так как $N_\alpha$ является порядком циклической группы $P_{c\alpha}$ (простого цикла подсистемы $\alpha$) с элементами $p_{\alpha j}$, то $p_{\alpha j}^{N_\alpha} = E$, где $E$ — единичный элемент группы. Отсюда

$$p_i^g = \prod_{\alpha=1}^{n} E^{d_\alpha} = E. \tag{8}$$

Это значит, что $g = d_\alpha N_\alpha \equiv$ н. о. к. действительно является порядком группы $[P]$.

Эта теорема имеет следующее следствие: порядок группы $[P]$ будет наименьшим, если все подсистемы имеют одинаковое число ЭО. В этом случае порядок группы будет равен числу ЭО в любой подсистеме.

2. Как известно, при рассмотрении молекулярных систем методом молекулярных орбиталей последние часто образуются линейной комбинацией атомных орбиталей:

$$\varphi_r = \sum_{l=1}^{m} C_{rl} \psi_l. \tag{9}$$

Решение задачи приводит к вековому определению порядка $m$:

$$Det\,(H_{lk} - S_{lk}\varepsilon) \equiv |m \times m| = 0. \tag{10}$$

При применении же метода теории групп для симметричных молекул вековой определитель типа (10) можно разложить на произведение субопределителей более низкого порядка. Одно из основных свойств группы $[P]$ заключается в том, что для разложения ее приводимого представления на неприводимые и для диагонализации векового определителя, достаточно знать лишь число подсистем ЭО и общее число АО.

Согласно теории групп, порядок субопределителей разложения определяется кратностью соответствующих неприводимых представлений в приводимом:

$$|m \times m| = \prod_{l=1}^{k} |a_l \times a_l|^{f_L^{(l)}}, \tag{11}$$

где $m$ — порядок приводимого представления, $f_k^{(i)}$ — размерность $i$-го неприводимого представления, $k$ — число неприводимых представлений в приводимом и

$$a = \frac{1}{g} \sum_{l}^{g} \chi(p_l) \chi^{(i)}(p_l) - \tag{12}$$

кратность $i$-го неприводимого представления. В выражении (12) $g$ — порядок группы, $\chi(p_l)$ и $\chi^{(i)}(p_l)$ — характеры приводимого и неприводимых представлений. Выражение (11) непосредственно вытекает из известной теоремы по подбору матричных элементов.

На основании формулы (11) можно доказать следующую теорему: *максимальный порядок субопределителей разложения равен числу подсистем ЭО.*

Так как группа $[P]$ абелева, то $f_k^{(i)} = 1$ для всех $i$, а $k = g$. Таким образом, для $[P]$

$$|m \times m| = \prod_{i=1}^{g} |a_i \times a_i|. \tag{13}$$

Согласно этой формуле, максимальный порядок субопределителя равен максимальному значению кратности $a_i$; оно может быть определено из формулы (12), принимая во внимание, что для циклических групп $\max \chi^{(i)}(p_l) = 1$ и характеры приводимого представления $\chi(p_l)$ одинаковы для всех неприводимых представлений. Так что, по (12),

$$\max a_i = \frac{1}{g} \sum_{l=1}^{g} \chi(p_l) \max \chi^{(i)}(p_l) = \frac{1}{g} \sum_{l=1}^{g} \chi(p_l). \tag{14}$$

Таким образом, задача сводится к определению суммы в (14). Нетрудно доказать, что

$$\sum_{l=1}^{g} \chi(p_l) = g \cdot n, \tag{15}$$

где $n$ — число подсистем ЭО. Действительно, характеры $\chi(p_l)$ представляют собой характеры матриц, преобразующих АО данной молекулы под действием элементов соответствующей группы $[P]$. Так, для нашего примера (1) совокупность АО можно представить в виде следующей однострочной матрицы:

$$(\psi) = (\psi_{11} \;\; \psi_{12} \;\; \psi_{23} \;\; \psi_{24} \;\; \psi_{25} \;\; \psi_{36} \;\; \psi_{37} \;\; \psi_{38} \;\; \psi_{39}) \tag{16}$$

Действие какого-либо элемента группы (3), например элемента $p_2$, на эту матрицу дает

$$p_2\cdot(\psi)=(\psi_{32}\ \psi_{31}\ \psi_{24}\ \psi_{25}\ \psi_{23}\ \psi_{37}\cdot\psi_{38}\ \psi_{39}\ \psi_{36})=$$

$$=(\psi)\cdot A_2=(\psi)\cdot\begin{pmatrix}0&1&0&0&0&0&0&0&0\\1&0&0&0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&1&0&0&0&0\\0&0&1&0&0&0&0&0&0\\0&0&0&1&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&0&1\\0&0&0&0&0&1&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&1&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&1&0\end{pmatrix};\quad \chi(p_2)=0. \qquad (17)$$

Как видно, здесь характер $\chi(p_2)$ преобразующей матрицы $A_2$ равен нулю. Точно также можно получить все преобразующие матрицы $A_i$ (и их характеры), соответствующие элементам группы $[P]$. Совокупность таких преобразующих матриц и образует приводимое представление.

Диагональные элементы этих матриц, сумма которых образует характеры, отличны от нуля только в том случае, если соответствующие элементы матрицы (16) не изменяются под действием элементов групп $[P]$. А это может быть только в том случае, если циклическая операция перестановок отвечает единичной операции составляющих элементарных циклов. Если в подсистеме ЭО первый элемент простого цикла—А, его порядок—$g_\alpha$ (он же равен числу ЭО в этой подсистеме), то, согласно свойству циклических групп, $A,\ A^2,\ \cdots,\ A^{g_\alpha}=E$, где $E$ — единичный элемент. Отсюда, в процессе преобразований ЭО под действием всех операций группы $[P]$ в $\alpha$ подсистеме ЭО остается неизменной каждая орбиталь $g/g_\alpha$ раз (т. е. столько раз, сколько повторяется единичный элемент простого цикла). Таким образом, в каждой подсистеме ЭО под действием операций всех элементов групп $[P]$ число неизменных элементов составляет $g\dfrac{N_\alpha}{g_\alpha}=g$, где $N_\alpha=g_\alpha$ — число ЭО в подсистеме. Если число подсистем — $n$ $(\alpha=1,\ 2,\ \cdots,\ n)$, то действительно

$$\sum_{i=1}^{g}\chi(P_i)=gn.$$

Тогда из уравнений (13) и (14) следует, что

$$\max a_i=n \qquad (18)$$

и

$$|m\times m|=|n\times n|\prod_{i=2}^{n}(a_i\times a_i), \qquad (19)$$

где $a_2\leqslant n$ для всех $i=2,\ 3,\ \cdots,\ g$, что и требовалось доказать.

3. Теперь определим число субопределителей максимального порядка, порядки и числа других субопределителей. Так как порядок субопре-

делителей есть целое число и максимальный порядок субопределитей—$n$, то очевидно, что возможные порядки остальных субопределителей должны быть $n-1$, $n-2$, ..., 1. В зависимости от числа и распределения АО по подсистемам ЭО эти субопределители могут быть реализованы или не реализованы. Определение числа возможных субопределителей (включая и число, равное нулю) фактически есть процесс разложения приводимого представления на неприводимые и, следовательно, процесс диагонализации векового определителя.

Для такого разложения определителей мы будем пользоваться некоторыми правилами, которые по существу являются теоремами. Хотя их доказательства здесь не приводятся*, однако они проверены путем многочисленных расчетов.

Правило I. *Количество субопределителей максимального порядка равно наибольшему общему делителю чисел АО в подсистемах ЭО:*

$$q(n) = D(n) \equiv (N_1, N_2, \cdots, N_n) \equiv \text{н. о. д.} \tag{20}$$

Для нашего примера $n = 3$, $N_1 = 2$, $N_2 = 3$, $N_3 = 4$. Следовательно, согласно приведенной теореме и правилу 1, максимальный порядок субопределителей равен 3 и их число

$$q(3) = (2, 3, 4) = 1.$$

Правило II. *Число субопределителей порядка $(n-1)$ в разложении векового определителя равно*

$$q(n-1) = \sum_{\beta=1}^{C_n^{n-1}} [D_\beta(n-1) - g(n)], \tag{21}$$

где $C_n^{n-1}$ — число сочетаний из $n$ по $n-1$, $\beta$ — номера сочетаний, $D_\beta(n-1)$ — н. о. к. $n-1$ чисел. Так, для рассмотренного примера

$$q(2) = \sum_{\beta=1}^{C_3^2} [D_\beta(2) - q(3)] = D_1(2, 3) - 1 + D_2(2, 4) - 1 +$$

$$+ D_3(3, 4) - 1 = 1$$

*Число субопределителей порядка $(n-2)$ равно*

$$q(n-2) = \sum_{\beta=1}^{C_n^{n-2}} \{D_\beta(n-2) - [q(n) + q(n-1)]\}; \tag{22}$$

*и в общем случае*

$$q(n-k) = \sum_{\beta=1}^{C_n^{n-k}} [D_\beta(n-k) - \sum_{m=0}^{k} q(n-m), \tag{23}$$

где

$$k = 0, 1, \cdots, (n-2).$$

* Доказательство этих правил вытекает из первой теоремы.

Под знаком суммы в выражениях (21)—(23) отрицательные слагаемые следует заменить нулем, так как это значит, что в соответствующих подсистемах ЭО все АО уже использованы для образования субопределителей более высокого порядка.

*Правило III. Число определителей первого порядка определяется разностью между числом всех АО и суммой произведений порядков субопределителей (больше одного порядка) на их число:*

$$q(1) = \sum_{\alpha=1}^{n} N_\alpha - [q(n)\cdot n + q(n-1)\cdot(n-1) + \cdots q(2)\cdot 2] \qquad (24)$$

Однако в окончательных вычислениях следует учесть, что если среди симметризированных функций имеются комплексно сопряженные функции, то они попарно группируются в субопределители второго порядка. Этот вопрос более подробно будет рассматриваться в следующем сообщении.

4. Теперь для иллюстрации приложения приведенных теорем и правил возьмем молекулу гексаметилэтана $C_2(CH_3)_6$, рассмотренную нами в работе [3]. Она состоит из 50 атомных орбиталей, в которых имеются 5 подсистем ЭО. В этих подсистемах числа ЭО составляют: $N_1=2$, $N_2 = N_3 = 6$, $N_4 = N_5 = 18$.

Если молекулярные орбитали представить как линейную комбинацию 50 АО, то исходный вековой определитель будет иметь вид:

$$Det\,(H_{ik} - S_{ik}\,\varepsilon) = |50 \times 50| = 0.$$

Согласно последней теореме и правилу I, максимальный порядок субопределителей равен 5, а их число

$$q(5) = (2,\ 6,\ 6,\ 18,\ 18) = 2;$$

в формуле (21)

$$C_5^4 = \frac{5!}{4!} = 5,$$

$$D_1(4) = (2,\ 6,\ 6,\ 18) = 2, \qquad D_4(4) = (2,\ 6,\ 18,\ 18) = 2,$$

$$D_2(4) = (2,\ 6,\ 6,\ 18) = 2, \qquad D_5(4) = (6,\ 6,\ 18,\ 18) = 6;$$

$$D_3(4) = (2,\ 6,\ 18,\ 18) = 2,$$

следовательно, $q(4) = 4$. Проводя такие же расчеты по формулам (22), (23) и (24), мы находим, что

$$q(3) = 0, \qquad q(2) = 12 \quad \text{и} \quad q(1) = 0.$$

Таким образом, полученные результаты

$$|50 \times 50| = 2|5 \times 5|\cdot 4|4 \times 4|\cdot 12|2 \times 2|$$

полностью соответствуют данным, полученным непосредственно по методу групп совместного циклирования [3].

# ՍԻՄՄԵՏՐԻԿԱՑՎԱԾ ՖՈՒՆԿՑԻԱՆԵՐԻ ՄԵԹՈԴԸ. ՆՐԱ ԿԻՐԱՌՈՒՄԸ ՄՈԼԵԿՈՒԼԱՅԻՆ ԵՎ ԲՅՈՒՐԵՂԱՅԻՆ ՍԻՍՏԵՄՆԵՐԻ ՆԿԱՏՄԱՄԲ

## I. ՀԱՄԱՏԵՂ ՑԻԿԼԱՑՎՈՂ ԽՄԲԵՐԻ ՀԻՄԱՆ ՎՐԱ ՄՈԼԵԿՈՒԼԱՅԻՆ ՍԻՍՏԵՄՆԵՐԻ ԴԱՐԱՎՈՐ ԴԵՏԵՐՄԻՆԱՆՏՆԵՐԻ ՔՎԱԶԻԴԻԱԳՈՆԱԼԱՑՄԱՆ ԿԱՆՈՆՆԵՐԻ ՄԱՍԻՆ

Հ. Կ. ԴԱՎԹՅԱՆ, Վ. ՅԵ. ԿԼԻՄԵՆԿՈ և Ֆ. Վ. ՄԱԿՈՐԴԵՅ

Ամփոփում

*Քննարկվում են միասին ցիկլացվող խմբերի մի քանի կարևոր հատկությունները։ Ապացուցված է մի թեորեմա, որը որոշում է այդ խմբերի կարգը։*

*Ցույց է տրված, որ հիմնվելով միասին ցիկլացվող խմբերի հատկությունների վրա, կարելի է գտնել դարավոր դետերմինանտների որոշման հասարակ կանոնները, օգտագործելով խմբային տեսությունը. այդ դեպքում բավական է իմանալ ատոմական օրբիտալները և համարժեք օրբիտալների ենթասիստեմների քանակը։*

*Ապացուցված է մի թեորեմա, որի համաձայն վերլուծված սուպդետերմինանտների մաքսիմալ կարգը հավասար է համարժեք օրբիտալերի ենթասիստեմների քանակին։*

*Տրված են դարավոր հավասարության վերլուծվող բոլոր սուպդետերմինանտների կարգի և քանակի որոշման կանոնները։*

## ЛИТЕРАТУРА

1. *О. К. Давтян, Ф. В. Макордей,* ЖФХ, 41, 2321 (1967).
2. *О. К. Давтян, Ф. В. Макордей,* ЖФХ, 41, 2717 (1967).
3. *Ф. В. Макордей, О. К. Давтян,* ЖФХ, 41, 3929 (1966).