Оптика и спектроскопия, 2018, том 125, вып. 4

01

Взаимодействие спин–чужая орбита в конфигурациях с p- и h-электронами на внешних оболочках. Обменные матричные элементы

© Г.П. Анисимова[1], А.П. Горбенко[1,¶], О.А. Долматова[2], И.Р. Крылов[1], Г.А. Цыганкова[1]

[1] Санкт-Петербургский государственный университет, Физический факультет,
198504 Петергоф, Санкт-Петербург, Россия
[2] Санкт-Петербургский государственный университет телекоммуникаций имени профессора М.А. Бонч-Бруевича,
193232 Санкт-Петербург, Россия

[¶] e-mail: spbgor@mail.ru, olgadolmatova@gmail.com

Поступила в Редакцию 11 декабря 2017 г.
В окончательной редакции 13 июня 2018 г.

Современные методы теоретической атомной спектроскопии позволяют производить расчеты атомных систем, необходимые для различных практических задач в разных разделах физики, в частности в астрофизике. При этом использовались различные чисто теоретические (*ab initio*) методы, в том числе и получившие развитие в последнее время. При расчете атомных систем наряду с *ab initio* методами, используются разные варианты полуэмпирического метода. Одним из общепризнанных критериев расчета атомных систем являются минимальные отклонения между расчетными и экспериментальными энергиями уровней тонкой структуры (невязки). Эти отклонения, полученные с помощью теоретических методов (*ab initio*), до сих пор являются довольно большими. Полуэмпирический подход, где эмпирическим материалом являются экспериментальные энергии уровней тонкой структуры, тоже незначительно уменьшает невязки, если в матрице оператора энергии учитывать только шесть параметров: электростатические (два прямых и два обменных) и два параметра взаимодействия спин–своя орбита (ξ_p и ξ_h). Ситуация в корне изменилась с появлением монографии литовских авторов „Математические основы теории атома" (А.П. Юцис и А.Ю. Савукинас). В этой монографии приведены матричные элементы (правда, в общем виде) операторов энергии магнитных взаимодействий спин–чужая орбита и спин–спин, а также взаимодействия орбита–орбита, причем в двух представлениях: $LSJM$ и несвязанных моментов. Это позволило проверить их формулы и сравнить свои результаты по двум представлениям расчета. Только тогда удалось получить практически нулевые невязки между расчетными и экспериментальными энергиями уровней тонкой структуры для многих исследованных нами систем. Таким образом, дело не в методе расчета, а в матрице оператора энергии, которая должна наиболее полно и правильно описывать энергии уровней тонкой структуры. Построению матрицы оператора энергии конфигураций $npn'h$ и $np^5n'h$ посвящена настоящая и последующие работы.

DOI: 10.21883/OS.2018.10.46691.286-18

Введение

Высоковозбужденные конфигурации с p- и h-электронами на внешних оболочках мало исследованы. Но уже появляются экспериментальные энергии уровней тонкой структуры как наиболее точно измеряемые величины у некоторых элементов, в частности для конфигурации $3p7h$ атома кремния [1]. На примере этой конфигурации рассмотрим энергетический спектр. Он состоит из 6 пар уровней (дублетов), расстояния между которыми в дублете настолько малы, что их не удалось разделить экспериментально. Но нам это не мешает для определения волновых функций промежуточной (реальной) связи и g-факторов, так как в любом приближении векторной связи матрица оператора энергии разделяется по квантовому числу J (полный электронный момент атома). Поэтому одинаковые энергии дублетов попадают в разные матрицы. Дублетная структура свидетельствует о пригодности LK- или jK-связи в рассматриваемых системах, начиная с конфигураций $npn'l$ ($l \geq 3$). Для рассматриваемой конфигурации $3p7h$ Si I классификация уровней в [1] дана в приближении jK-связи. В этом же приближении необходимо производить дальнейший численный расчет параметров тонкой структуры и других характеристик атома.

Выпишем энергии шести дублетов по росту и обсудим полученный спектр.

$$
\begin{array}{lll}
\text{Уровень} & & E,\ \text{cm}^{-1} \\
\frac{1}{2}\left[\frac{11}{2}\right]_{5,6} & ({}^1H_5{}^3H_6) & 63506.698 \\
\frac{1}{2}\left[\frac{9}{2}\right]_{4,5} & ({}^3H_4{}^3H_5) & 63507.05 \\
\frac{3}{2}\left[\frac{11}{2}\right]_{5,6} & ({}^3I_5{}^3I_6) & 63790.813 \\
\frac{3}{2}\left[\frac{9}{2}\right]_{4,5} & ({}^1G_4{}^3G_5) & 63792.328 \\
\frac{3}{2}\left[\frac{13}{2}\right]_{6,7} & ({}^1I_6{}^3I_7) & 63795.677 \\
\frac{3}{2}\left[\frac{7}{2}\right]_{3,4} & ({}^3G_3{}^3G_4) & 63796.24
\end{array}
\tag{1}
$$

Как и в других высоковозбужденных конфигурациях, начиная с $npn'f$, в нижней части спектра находятся два дублета с $j_1 = l_1 + s_1 = 1/2$. Это H-уровни. На значительном расстоянии от них (примерно $300\,\mathrm{cm}^{-1}$) находится группа четырех дублетов с $j_1 = 3/2$. Расстояние между дублетами в разных группах порядка $(1-3)\,\mathrm{cm}^{-1}$, т. е. очень малы по сравнению с конфигурацией $npn'f$ атомов углерода и кремния [2].

Как и во всех 12-уровневых системах $npn'l$ $(l \geq 2)$, мы имеем три группы уровней. В рассматриваемой конфигурации $3p7h$ $L = 4$, 5, 6 — по три триплетных и одному синглетному уровню для каждого значения L. В приближении более наглядной LS-связи это уровни $^3I_{7,6,5}$, $^1I_6$ $(L = 6)$; $^3H_{6,5,4}$, $^1H_5$ $(L = 5)$ и $^3G_{5,4,3}$, $^1G_4$ $(L = 4)$. Наибольшему промежуточному моменту $K = j_1 + l_2$ соответствуют уровни с бóльшим значением L, т. е. I-уровни. Так как уровень $^3I_7$ — единственный в конфигурации с наибольшим значением J, то он записан в 5-й строке сверху выражения (1). Следующий по величине промежуточный момент $K = 11/2$ есть у I-уровней и H-уровней. С H-уровнями мы определились. Поэтому 3-й дублет в (1) — это уровни $^3I_5$ и $^3I_6$. Есть еще промежуточные моменты $K = 9/2$ и 7/2, они относятся к G-уровням. В 4-й строке (1) записана пара $^1G_4$ и $^3G_5$. А в 6-й строке — пара оставшихся G-уровней: $^3G_3$, $^3G_4$.

Как показали наши многочисленные исследования, при одинаковых значениях квантовых чисел L и J синглетный уровень относится к наибольшему значению промежуточного момента K, что и записано в (1) (см. гиромагнитные отношения в [2]).

Отметим, что в промежутках между дублетами конфигураций $3p7h$ Si I находятся уровни конфигурации $3p7h$, которая может взаимодействовать с исследуемой. Если взаимодействие конфигураций значительное, то не удается получить нулевые невязки по энергиям даже при учете в гамильтониане Брейта взаимодействий спин-чужая орбита, спин-спин и орбита-орбита, как это было в конфигурации $2pn'd$ C I [3]. Но это было всего один раз, где пришлось строить двухконфигурационную матрицу оператора энергии. Обычно незначительное наложение конфигураций компенсируется учетом в одноконфигурационном приближении перечисленных выше взаимодействий.

Переводная матрица коэффициентов Клепша–Гордана (К–Г) из представления несвязанных моментов в $LSJM$-представление

Рассмотрение матрицы оператора энергии взаимодействия спин-чужая орбита в двух представлениях начнем с переводной матрицы волновых функций представления несвязанных моментов в $LSJM$-представление. В $LSJM$-представлении матрица оператора энергии разделяется по квантовому числу J (полный электронный момент атома), а в представлении несвязанных моментов она разделяется по магнитному квантовому числу M (как при наложении магнитного поля). В итоге мы имеем следующие матрицы: $M = \pm 7$ — 1-го ранга, $M = \pm 6$ — 4-го ранга, $M = \pm 5$ — 8-го ранга, $M = \pm 4$ — 11-го ранга, $M = \pm 3, \pm 2, \pm 1, 0$ — 12-го ранга.

Для расчета матричных элементов в представлении несвязанных моментов не обязательно использовать все перечисленные матрицы. Достаточно ограничиться одной матрицей с $M = 0$, из которой можно получить все матричные элементы в $LSJM$-представлении (все уровни конфигурации).

Матрица коэффициентов К–Г составляется в три этапа. На первом рассчитываются коэффициенты К–Г $(LSM_LM_S|LSJM)$, на втором этапе — спиновая $(s_1s_2m_{s_1}m_{s_2}|s_1s_2SM_S)$ — матрица, на третьем этапе рассчитываются коэффициенты К–Г $(l_1l_2m_{l_1}m_{l_2}|l_1l_2LM_L)$ — орбитальная матрица. Затем орбитальная и спиновая матрицы последовательно подставляются в первую. В итоге для $M = 0$ имеем матрицу коэффициентов К–Г, представленную в табл. 1. Из 132 волновых функций $[(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)(2s_1 + 1)(2s_2 + 1)]$ имеем только 12 коэффициентов К–Г. Остальные распределяются по матрицам с другими значениями M. В табл. 1 волновые функции пронумерованы от 1 до 12, они различаются только четверкой орбитальных и спиновых проекций и в табл. 1 записаны в следующей последовательности: $m_{l_1}, m_{l_2}, m_{s_1}, m_{s_2}$ (спиновые проекции в табл. 1 отмечены знаками). Индексы 1 и 2 относятся к первому (p) и второму (h) электронам соответственно. Видно, что $M = m_{l_1} + m_{l_2} + m_{s_1} + m_{s_2} = 0$ можно получить единственным способом, указанным в „шапке“ табл. 1. Кроме того, из табл. 1 видно, что волновые функции собираются по парам, где орбитальные и спиновые проекции одинаковы по величине и противоположны по знаку. А результат вычисления матричных элементов оператора энергии при этом одинаков (это проверено). Указанные пары такие: 1–3, 2–4, 5–7, 6–12, 8–10, 9–11, т. е. число вычислений сокращается вдвое. Это основное преимущество матрицы с $M = 0$.

Представление несвязанных моментов

Как говорилось выше, матричные элементы оператора энергии взаимодействия спин-чужая орбита рассчитаны по формулам монографии [4]. Чтобы не отсылать читателя к этому источнику, приведем формулу общего вида для обменного матричного элемента в представлении

Таблица 1. Матрица коэффициентов преобразования волновых функций $LSJM$-представления через волновые функции представления несвязанных моментов $(M = 0)$

Уровень	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
	$1\,0\,-\,-$	$0\,0\,-\,+$	$-1\,0\,+\,+$	$0\,0\,+\,-$	$0\,1\,-\,-$	$1\,-1\,-\,+$	$0\,-1\,+\,+$	$1\,-1\,+\,-$	$-1\,2\,-\,-$	$-1\,1\,-\,+$	$1\,-2\,+\,+$	$-1\,1\,+\,-$
$^3G_5$	$\frac{2}{3\sqrt{11}}$	$\frac{-5}{3\sqrt{22}}$	$\frac{2}{3\sqrt{11}}$	$\frac{-5}{3\sqrt{22}}$	$\frac{-4\sqrt{3}}{3\sqrt{55}}$	$\frac{\sqrt{15}}{3\sqrt{22}}$	$\frac{-4\sqrt{3}}{3\sqrt{55}}$	$\frac{\sqrt{15}}{3\sqrt{22}}$	$\frac{\sqrt{42}}{3\sqrt{55}}$	$\frac{\sqrt{15}}{3\sqrt{22}}$	$\frac{\sqrt{42}}{3\sqrt{55}}$	$\frac{\sqrt{15}}{3\sqrt{22}}$
$^3G_4$	$\frac{1}{\sqrt{11}}$	0	$\frac{-1}{\sqrt{11}}$	0	$\frac{-2\sqrt{3}}{\sqrt{55}}$	0	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{55}}$	0	$\frac{\sqrt{21}}{\sqrt{110}}$	0	$\frac{-\sqrt{21}}{\sqrt{110}}$	0
$^3G_3$	$\frac{\sqrt{5}}{3\sqrt{11}}$	$\frac{\sqrt{10}}{3\sqrt{11}}$	$\frac{\sqrt{5}}{3\sqrt{11}}$	$\frac{\sqrt{10}}{3\sqrt{11}}$	$\frac{-2\sqrt{3}}{3\sqrt{11}}$	$\frac{-\sqrt{6}}{3\sqrt{11}}$	$\frac{-2\sqrt{3}}{3\sqrt{11}}$	$\frac{-\sqrt{6}}{3\sqrt{11}}$	$\frac{\sqrt{42}}{6\sqrt{11}}$	$\frac{-\sqrt{6}}{3\sqrt{11}}$	$\frac{\sqrt{42}}{6\sqrt{11}}$	$\frac{-\sqrt{6}}{3\sqrt{11}}$
$^1G_4$	0	$\frac{\sqrt{5}}{\sqrt{22}}$	0	$\frac{-\sqrt{5}}{\sqrt{22}}$	0	$\frac{-\sqrt{3}}{\sqrt{22}}$	0	$\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{22}}$	0	$\frac{-\sqrt{3}}{\sqrt{22}}$	0	$\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{22}}$
$^3H_6$	$\frac{\sqrt{5}}{2\sqrt{11}}$	0	$\frac{-\sqrt{5}}{2\sqrt{11}}$	0	$\frac{-1}{2\sqrt{33}}$	$\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{22}}$	$\frac{1}{2\sqrt{33}}$	$\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{22}}$	$\frac{-\sqrt{7}}{\sqrt{66}}$	$\frac{-\sqrt{3}}{\sqrt{22}}$	$\frac{\sqrt{7}}{\sqrt{66}}$	$\frac{-\sqrt{3}}{\sqrt{22}}$
$^3H_5$	1/2	0	1/2	0	$\frac{-1}{2\sqrt{15}}$	0	$\frac{-1}{2\sqrt{15}}$	0	$\frac{-\sqrt{7}}{\sqrt{30}}$	0	$\frac{-\sqrt{7}}{\sqrt{30}}$	0
$^3H_4$	$\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{22}}$	0	$\frac{-\sqrt{3}}{\sqrt{22}}$	0	$\frac{-1}{\sqrt{110}}$	$\frac{-\sqrt{5}}{2\sqrt{11}}$	$\frac{1}{\sqrt{110}}$	$\frac{-\sqrt{5}}{2\sqrt{11}}$	$\frac{-\sqrt{7}}{\sqrt{55}}$	$\frac{\sqrt{5}}{2\sqrt{11}}$	$\frac{\sqrt{7}}{\sqrt{55}}$	$\frac{\sqrt{5}}{2\sqrt{11}}$
$^1H_5$	0	0	0	0	0	$-1/2$	0	$1/2$	0	$1/2$	0	$-1/2$
$^3I_7$	$\frac{\sqrt{21}}{\sqrt{13\cdot 22}}$	$\frac{\sqrt{21}}{\sqrt{11\cdot 13}}$	$\frac{\sqrt{21}}{\sqrt{13\cdot 22}}$	$\frac{\sqrt{21}}{\sqrt{11\cdot 13}}$	$\frac{\sqrt{35}}{\sqrt{13\cdot 22}}$	$\frac{\sqrt{35}}{2\sqrt{11\cdot 13}}$	$\frac{\sqrt{35}}{\sqrt{13\cdot 22}}$	$\frac{\sqrt{35}}{2\sqrt{11\cdot 13}}$	$\frac{\sqrt{5}}{\sqrt{11\cdot 13}}$	$\frac{\sqrt{35}}{2\sqrt{11\cdot 13}}$	$\frac{\sqrt{5}}{\sqrt{11\cdot 13}}$	$\frac{\sqrt{35}}{2\sqrt{11\cdot 13}}$
$^3I_6$	$\frac{\sqrt{7}}{2\sqrt{11}}$	0	$\frac{-\sqrt{7}}{2\sqrt{11}}$	0	$\frac{\sqrt{35}}{2\sqrt{33}}$	0	$\frac{-\sqrt{35}}{2\sqrt{33}}$	0	$\frac{\sqrt{5}}{\sqrt{66}}$	0	$\frac{-\sqrt{5}}{\sqrt{66}}$	0
$^3I_5$	$\frac{7}{2\sqrt{11\cdot 13}}$	$\frac{-3\sqrt{2}}{\sqrt{11\cdot 13}}$	$\frac{7}{2\sqrt{11\cdot 13}}$	$\frac{-3\sqrt{2}}{\sqrt{11\cdot 13}}$	$\frac{7\sqrt{5}}{2\sqrt{13\cdot 33}}$	$\frac{-\sqrt{15}}{\sqrt{13\cdot 22}}$	$\frac{7\sqrt{5}}{2\sqrt{13\cdot 33}}$	$\frac{-\sqrt{15}}{\sqrt{13\cdot 22}}$	$\frac{\sqrt{35}}{\sqrt{26\cdot 33}}$	$\frac{-\sqrt{15}}{\sqrt{13\cdot 22}}$	$\frac{\sqrt{35}}{\sqrt{26\cdot 33}}$	$\frac{-\sqrt{15}}{\sqrt{13\cdot 22}}$
$^1I_6$	0	$\frac{-\sqrt{3}}{\sqrt{11}}$	0	$\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{11}}$	0	$\frac{-\sqrt{5}}{2\sqrt{11}}$	0	$\frac{\sqrt{5}}{2\sqrt{11}}$	0	$\frac{-\sqrt{5}}{2\sqrt{11}}$	0	$\frac{\sqrt{5}}{2\sqrt{11}}$

несвязанных моментов, как наиболее сложную:

$$
\begin{aligned}
|H^{so}|_{\text{обм}} = {} & \frac{2\sqrt{2}}{3}\, i\left[s \parallel s^{(1)} \parallel s\right] \sum_{kKx_1x_2x'_1x'_2} \frac{(-1)^{x_2}}{\sqrt{2k+1}} \left[(2x_1+1)\right. \\
& \times \left.(2x_2+1)\right]^{\frac{1}{2}} (2x'_1+1)(2x'_2+1) \\
& \times \left[s_1 x'_1(s_1)x'_2 s_2 | x'_2 x'_1(1) s_1 s_2\right] t_{12}^{x_1x_21} z_{12}^{x'_1x'_21} \\
& \times \left\{ \frac{1}{\sqrt{K+k+1}}\, a(K, l_1, l_2) \left[l_1 \parallel C^{(K)} \parallel l_2\right]\left[l_2 \parallel C^{(K)} \parallel l_1\right] \right. \\
& \times \left[1 - 2(-1)^{x'_1+x'_2}\right]\left[1 + (-1)^{x_1+x_2+x'_1+x'_2}\right] \\
& \times \left[l_1 l_1(x_1), l_2 l_2(x_2), 1 | l_1 l_2(k), l_1 l_2(K), 1\right] N_{k-1}(n_1 l_1, n_2 l_2) \\
& + \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2k(k+1)}} \left[l_1 \parallel C^{(k)} \parallel l_2\right]\left[l_2 \parallel C^{(k)} \parallel l_1\right] \delta(x'_1 + x'_2, 1) \\
& \left. \times [l_1 l_1(x_1), l_2 l_2(x_2), 1 | l_1 l_2(k), l_1 l_2(k), 1] K'_k(n_1 l_1, n_2 l_2) \right\}
\end{aligned}
\quad (2)
$$

— формула (8.41б) из [4].

Здесь есть мнимое число i. Но оно пропадает, так как авторы [4] используют стандартную систему фаз, в которой $[s \parallel s^{(1)} \parallel s] = \frac{\sqrt{3}}{2} i$ (заметим, что в псевдостандартной системе фаз этот спиновый приведенный матричный элемент равен $\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}}$ без i). Второй знак „–“ выносится из-под знака Σ из-за множителя $(-1)^{x_2}$. Из (2) видно, что суммирование проводится по 6 параметрам. Основной из них k, который для каждой конфигурации принимает свое единственное значение. Поэтому его можно вынести из под знака Σ в аналитическом виде $\frac{1}{\sqrt{2k+1}}$. Из (2) также видно, что до фигурной скобки все множители и операторы $t_{12}^{x_1x_21} z_{12}^{x'_1x'_21}$ не зависят от параметров k и K (t — единичные орбитальные, а z — единичные спиновые операторы соответственно).

Определим остальные параметры и начнем с самых простых: x'_1 и x'_2 — спиновые параметры суммирования. Они могут принимать только 2 значения: 0 и 1. То есть здесь возможны следующие варианты:

$$
\begin{array}{ccc}
x'_1 & x'_2 & R \\
0 & 0 & 0 \\
0 & 1 & -1 \\
1 & 0 & -1 \\
1 & 1 & \sqrt{6}/3.
\end{array}
\quad (3)
$$

Справа в (3) выписаны значения коэффициентов Рака ($6j$-символы Вигнера) (2). Так как для значений $x'_1 = 0$, $x'_2 = 0$ и $x'_1 = 1$, $x'_2 = 0$ коэффициенты Рака ($6j$-символы) одинаковы и равны -1, то операторы z_{12}^{001} и z_{12}^{101} можно объединить и вынести за знак Σ с коэффициентом, равным 3: $(2x'_1+1)(2x'_2+1)$. Остается сумма орбитальных операторов $t_{12}^{x_1x_21}$, где параметры $x_1 = 0, 1, \ldots, 2l_1$; $x_2 = 0, 1, \ldots, 2l_2$. Перебираются все пары, но такие, чтобы $|x_1 - x_2| = 1, |x_1 - x_2| + 1 = 1, \ldots, |x_1 + x_2| = 1$ [4]. Следовательно, ранги орбитальных операторов могут быть такими: t_{12}^{011}, t_{12}^{101}, t_{12}^{121}, t_{12}^{211}, t_{12}^{231}, t_{12}^{111}, t_{12}^{221}.

Коэффициенты при орбитальных операторах также понятны из (2). Все выражение до фигурной скобки известно. Обратим внимание на произведение двух сомножителей в фигурной скобке при радиальном интеграле N_{k-1}:

$$\left[1-2(-1)^{x_1'+x_2'}\right]\left[1+(-1)^{x_1+x_1+x_1'+x_2'}\right], \tag{4}$$

которое также не зависит от параметров k и K. Первый сомножитель равен 3, если $x_1'+x_2'$ — нечетное число, и равен -1, если эта сумма — четное число. Второй сомножитель равен нулю, если $x_1+x_2+x_1'+x_2'$ — нечетное число, и 2, если эта сумма — четное число. Следовательно, выражение, полученное нами до фигурной скобки, необходимо умножить на 6. Учитывая сказанное, из (2) до фигурной скобки получаем следующее выражение:

$$\frac{\sqrt{6}}{3}\frac{1}{\sqrt{2k+1}}\Big[18\big(z_{12}^{001}+z_{12}^{101}\big)\big(\sqrt{3}t_{12}^{011}-\sqrt{3}t_{12}^{101}-\sqrt{15}t_{12}^{121}$$
$$+\sqrt{15}t_{12}^{211}+\sqrt{35}t_{12}^{231}\big)+6\sqrt{6}z_{12}^{111}\big(3t_{12}^{111}-5t_{12}^{221}\big)\Big]. \tag{5}$$

Осталось только суммирование по параметрам $K=k\pm1$ (все в фигурной скобке). Для обменных радиальных интегралов N_{k-1} параметр суммирования k принимает следующие значения [4]:

$$k-1=|l_1-l_2|-2,\ |l_1-l_2|,\ldots,l_1+l_2,$$

т.е. $k=3$, 5, 7. Дальше в фигурной скобке (2) мы видим приведенные матричные элементы операторов сферических функций $C^{(K)}$, которые для орбитальных моментов $l_1=1$, $l_2=5$ отличны от нуля только при значениях $K=4$ и $K=6$. Если $k=3$, то $K=2$ и 4, если $k=5$, то $K=4$ и 6, если $k=7$, то $K=6$ и 8. Вариант $k=3$ и $K=2$ не проходит из-за равенства нулю приведенного матричного элемента оператора сферической функции. Вариант $k=3$ и $K=4$ обращается в нуль из-за множителей $a(K,l_1,l_2)$, которые мы выпишем:

$$a(K,l_1,l_2)=-\frac{1}{2\sqrt{3}}$$
$$\times\sqrt{\frac{(2k+1)(l_1+l_2+k+2)(l_1+l_2-k)\times}{\times(-l_1+l_2+k+1)\underline{(l_1-l_2+k+1)}}},\quad (K=k+1),$$
$$a(K,l_1,l_2)=-\frac{1}{2\sqrt{3}}$$
$$\times\sqrt{\frac{(2k+1)(l_1+l_2+k+1)\underline{(l_1+l_2-k+1)}\times}{\times(-l_1+l_2+k)(l_1-l_2+k)}},$$
$$(K=k-1). \tag{6}$$

Из (6) видно, что при $k=3$ и $K=4$ обращается в нуль последний сомножитель под знаком квадратного корня при $K=k+1$, а при $k=7$ и $K=6$ обращается в нуль третий сомножитель под знаком квадратного корня ($K=k-1$) — подчеркнуты. Таким образом, выражение $a(K,l_1,l_2)$ при $k=3$ и $k=7$ обращается в нуль по указанным причинам. Остается одно значение параметра суммирования $k=5$. При этом параметр K принимает два значения: 4 и 6.

Самый сложный этап — провести суммирование по двум параметрам K при радиальном интеграле N_{k-1}, так как здесь есть коэффициент Фано ($9j$-символ), зависящий не только от параметров k и K, но и от орбитальных параметров суммирования x_1 и x_2, которых у нас 7 пар: 5 при $(z_{12}^{011}+z_{12}^{101})$ и 2 при z_{12}^{111} (см. (5)). Выпишем этот коэффициент Фано (F) при N_{k-1} [6]:

$$F=\delta_{jj'}\delta_{MM'}\sqrt{(2x_1+1)(2x_2+1)(2k+1)(2K+1)}$$
$$\times\begin{Bmatrix} l_1 & l_1 & x_1\\ l_2 & l_2 & x_2\\ k & K & 1\end{Bmatrix} \tag{7}$$

Считаются семь $9j$-символов со значениями орбитальных параметров x_1 и x_2, указанных в (5) при $K=4$ и $K=6$. Затем каждый $9j$-символ умножается на коэффициент $\frac{1}{\sqrt{K+k+1}}$, на коэффициент $a(K,l_1,l_2)$ (см. (6)) и приведенные матричные элементы операторов сферических функций отдельно для $K=4$ и $K=6$. Полученные выражения суммируются. Результат суммирования умножается на соответствующий коэффициент в (5). В результате получаем следующую рабочую формулу:

$$\frac{6\sqrt{6}}{\sqrt{11}}\left(z_{12}^{011}+z_{12}^{101}\right)\left(\frac{\sqrt{5}}{10}t_{12}^{011}+\frac{\sqrt{3}}{2}t_{12}^{101}-\frac{21\sqrt{13}}{26}t_{12}^{121}\right.$$
$$\left.-\frac{91\sqrt{5}}{10}t_{21}^{211}-\frac{287\sqrt{130}}{130}t_{12}^{231}\right)+\frac{12\sqrt{5}}{\sqrt{11}}z_{12}^{111}$$
$$\times\left(-9t_{12}^{111}+\frac{10\sqrt{13}}{13}t_{12}^{221}\right) \tag{8}$$

для коэффициента при обменном радиальном интеграле N_{k-1}, последний обозначим S_3. Везде первый верхний ранг орбитальных $t_{12}^{x_1x_2 1}$ и спиновых $z_{12}^{x_1'x_2'1}$ операторов относится к p-электрону, а второй верхний ранг у тех же операторов — к h-электрону.

Обменные интегралы N_{k-1}, так же как и прямые интегралы M_{k-1}, называются радиальными интегралами спиновых взаимодействий Марвина. Из формулы (2) также видно, что в фигурной скобке есть еще один радиальный интеграл $K_k'(n_1l_1,n_2l_2)$, который связан с интегралами Марвина, но здесь все проще по сравнению с интегралом N_{k-1}. Параметр суммирования k принимает значения $k=|l_1-l_2|,|l_1-l_2|+2,\ldots,l_1+l_2$, т.е. $k=4$ и $k=6$. Коэффициент Фано здесь другой:

$$F(\text{при } K_k')=\delta_{jj'}\delta_{MM'}$$
$$\times\sqrt{(2x_1+1)(2x_2+1)(2k+1)(2k+1)}\begin{Bmatrix} l_1 & l_1 & x_1\\ l_2 & l_2 & x_2\\ k & k & 1\end{Bmatrix}. \tag{9}$$

Из (2) также видно, что для радиального интеграла K'_k нет множителей (4), они относятся только к радиальному интегралу N_{k-1}. Поэтому все выражение (5) надо разделить на 6. Кроме того, отсутствуют слагаемые при z_{12}^{111} из-за условия $\delta(x'_1 + x'_2, 1)$.

В (9) для $k = 4$ и $k = 6$ отдельно считаются 5 $9j$-символов при $(z_{12}^{011} + z_{12}^{101})$ со значениями x_1 и x_2, указанными в первом слагаемом (5) (до z_{12}^{111}). Тогда рабочие формулы для расчета этих матричных элементов выглядят так:

$$\frac{\sqrt{6}}{3\sqrt{11}}\left(z_{12}^{011} + z_{12}^{101}\right)\left(\frac{3}{\sqrt{5}}\,t_{12}^{011} + \frac{\sqrt{3}}{2}\,t_{12}^{101} - \sqrt{13}t_{12}^{121} - \frac{3}{\sqrt{5}}\,t_{12}^{211} + \frac{7\sqrt{65}}{10\sqrt{2}}\,t_{12}^{231}\right)K'_k\,(\text{при } k = 4), \tag{10}$$

обозначим K'_k (при $k = 4$) как S_4,

$$\frac{\sqrt{6}}{\sqrt{11\cdot 13}}\,(z_{12}^{011} + z_{12}^{101})\left(\frac{3\sqrt{5}}{2\sqrt{13}}\,t_{12}^{011} - \frac{3\sqrt{3}}{2\sqrt{13}}\,t_{12}^{101} + \frac{45}{26}\,t_{12}^{121} - \frac{3\sqrt{5}}{2\sqrt{13}}\,t_{12}^{211} + \frac{9\sqrt{5}}{12\sqrt{2}}\,t_{12}^{231}\right)K'_k\,(\text{при } k = 6), \tag{11}$$

обозначим K'_k (при $k = 6$) как S'_4.

Формулы (8), (10), (11) — это многочленные выражения, представляющие тензорные произведения орбитальных и спиновых операторов 1-го ранга. К ним сначала применяется формула для тензорного произведения операторов с единственным коэффициентом К–Г для конкретных значений орбитальных и спиновых проекций электронов [5], указанных в шапке табл. 1, а затем применяется формула прямого произведения операторов. Таким образом, все орбитальные и спиновые операторы разделяются. Поскольку все операторы являются неприводимыми тензорами, к ним отдельно к каждому применяется теорема Эккарта–Вигнера, согласно которой матричный элемент неприводимого тензорного оператора есть произведение фазового множителя, приведенного матричного элемента и $3j$-символа Вигнера. Поскольку в [4] все операторы единичные, то приведенный матричный элемент равен 1, и остаются только фазовый множитель и $3j$-символы Вигнера. Поэтому во всех рабочих формулах (8), (10), (11) есть фазовый множитель, равный (-1) в степени $(l_1 + l_2 + s_1 + s_2 - m_{l_1} - m_{l_2} - m_{s_1} - m_{s_2})$, который разный в электронных и дырочных конфигурациях.

Результаты расчета по формулам (8), (10), (11) представлены в табл. 2 для матрицы с $M = 0$. Предварительно эти формулы были проверены на матрицах малых рангов с $M = \pm 1$ и $M = \pm 4$.

Перевод матрицы с $M = 0$ из представления несвязанных моментов в $LSJM$-представление как более компактное осуществлен с помощью матрицы коэффициентов К–Г вручную и по компьютерной программе. Здесь результаты совпали полностью. Результаты такого перевода представлены в табл. 3.

Теперь нужно проверить правильность полученной матрицы сравнением с результатами независимого расчета конфигурации $npn'h$ непосредственно в $LSJM$-представлении.

Обменные матричные элементы оператора энергии взаимодействия спин-чужая орбита непосредственно в $LSJM$-представлении

Непосредственно в $LSJM$-представлении в монографии [4] даны формулы приведенных матричных элементов. Выпишем их:

$$\| H^{so}_{\text{обм}} \| = (-1)^{l_1+l_2+L'+S'} B \sum_{kK} a'(K, l_1, l_2)(l_1 \,\|\, C^{(K)} \,\|\, l_2)^2 \times \left[\begin{Bmatrix} l_1 & l_2 & k \\ l_2 & l_1 & K \\ L & L' & 1 \end{Bmatrix} + (-1)^{S+S'} \begin{Bmatrix} l_1 & l_2 & K \\ l_2 & l_1 & k \\ L & L' & 1 \end{Bmatrix}\right] N_{k-1} + (-1)^{l_1+l_2+L'+S'} \frac{B}{2\sqrt{6}} \sqrt{\frac{2k+1}{k(k+1)}}\,[1 + (-1)^{S+S'}] \times (l_1 \,\|\, C^{(K)} \,\|\, l_2)^2 \begin{Bmatrix} l_1 & l_2 & k \\ l_2 & l_1 & k \\ L & L' & 1 \end{Bmatrix} K'_k. \tag{12}$$

Здесь B — множитель, имеющий вид

$$B = -2\cdot 3[(2L+1)(2S+1)(2L'+1)(2S'+1)]^{\frac{1}{2}} \times [(-1)^{S'} + 2(-1)^{S}] \begin{Bmatrix} s & S & s \\ S' & s & 1 \end{Bmatrix},$$

а также

$$a'(K, l_1, l_2) = [(2K+1)/(K+k+1)]^{\frac{1}{2}} a(K, l_1, l_2).$$

Выражение для множителя $a(K, l_1, l_2)$ приведено в формуле (6).

Обратим внимание, что в табл. 3 коэффициенты в матричных элементах, образованных триплетным и синглетным термами, равны нулю при большинстве радиальных интегралов. Для радиального интеграла K'_k это понятно, так как во втором слагаемом (12) есть множитель $[1 + (-1)^{S+S'}]$ независимо от того $L = L'$ или $L \neq L'$. Что касается коэффициента при интеграле $N_{k-1}(S_3)$, то видим, что в первом слагаемом (12) оба $9j$-символа одинаковы. Так, если в первом $9j$-символе в квадратной скобке (12) переставить местами 1 и 2 столбцы, а затем 1 и 2 строчки, то получим в точности второй $9j$-символ. Поскольку $L = L' = 6$, то вычитаются одинаковые величины из-за множителя $(-1)^{S+S'}$.

Таблица 2. Коэффициенты при обменных радиальных интегралах в матрице оператора энергии взаимодействия спин-чужая орбита с $M = 0$, рассчитанные с волновыми функциями представления несвязанных моментов (см. табл. 1)

Матричный элемент $\lambda_i\lambda_k$	ph			p^5h			$\sqrt{\ }$
	$S_3\,\frac{1}{143}$	$S_4\,\frac{1}{396}$	$S_4'\,\frac{1}{52052}$	$S_3\,\frac{1}{143}$	$S_4\,\frac{1}{396}$	$S_4'\,\frac{1}{52052}$	
$1-1=3-3$	3	2	126	0	0	0	–
$5-5=7-7$	1149/5	−24/5	−210	0	0	0	–
$6-6=12-12$	0	0	0	−120	0	0	–
$8-8=10-10$	0	0	0	120	0	0	–
$9-9=11-11$	−996/5	−9/5	−648	0	0	0	–
$1-2=3-4$	20	5	−378	−20	−5	378	$\sqrt{2}$
$1-4=2-3$	40	5	−378	20	5	−378	$\sqrt{2}$
$1-5=3-7$	−119	0	0	0	0	0	$\sqrt{15}$
$1-6=3-12$	−289/15	3/5	84	−107/6	1	63	$\sqrt{30}$
$1-8=3-10$	286/15	3/5	84	107/6	−1	−63	$\sqrt{30}$
$1-9=3-11$	41/5	−1/5	−6	0	0	0	$\sqrt{210}$
$1-10=3-8$	361/6	1	63	353/6	1	63	$\sqrt{30}$
$1-12=3-6$	353/6	1	63	−353/6	−1	−63	$\sqrt{30}$
$2-5=4-7$	8/3	2	126	4/3	2	126	$\sqrt{30}$
$2-6=4-12$	0	0	0	119	0	0	$\sqrt{15}$
$2-7=4-5$	4/3	2	126	−4/3	−2	−126	$\sqrt{30}$
$2-8=4-10$	−115/3	0	0	−119/3	0	0	$\sqrt{15}$
$2-9=4-11$	206/15	3/5	−48	8/3	−1	36	$\sqrt{105}$
$2-10=4-8$	0	0	0	−119	0	0	–
$2-11=4-9$	166/15	3/5	−48	−8/3	1	−36	$\sqrt{105}$
$2-12=4-6$	115/3	0	0	119/3	0	0	$\sqrt{15}$
$5-6=7-12$	43/2	6	−315	−43/2	−6	315	$\sqrt{2}$
$5-8=7-10$	83/2	6	−315	43/2	6	−315	$\sqrt{2}$
$5-9=7-11$	471/5	−6/5	96	0	0	0	$\sqrt{14}$
$5-10=7-8$	282/5	18/5	−420	−39/2	−6	315	$\sqrt{2}$
$5-12=6-7$	−3/5	18/5	−420	39/2	6	−315	$\sqrt{2}$
$6-9=11-12$	−123	3	90	−123	3	90	$\sqrt{7}$
$6-11=9-12$	−248/5	3/5	216	−41	−3	−90	$\sqrt{7}$
$6-12$	40	0	0	−40	0	0	–
$8-9=10-11$	−123	3	90	123	−3	−90	$\sqrt{7}$
$8-10$	−40	0	0	40	0	0	–
$8-11=9-10$	122/5	3/5	216	41	3	90	$\sqrt{7}$

Примечение. Здесь значки λ в матричных элементах опущены и оставлены только индексы, соответствующие нумерации волновых функций λ_i в табл. 1. Общий для всей строки множитель под корнем вынесен справа.

Зато в дырочной конфигурации $np5n'h$ два матричных элемента триплет-синглет с одинаковыми значениями L отличны от нуля. Это элементы $^3I_6{}^1I_6$ и $^3G_4{}^1G_4$. Вообще говоря, в дырочных конфигурациях всего 6 обменных матричных элементов. Кроме двух названных, это 4 элемента триплет-синглет с разными значениями L.

Поясним, как считаются матричные элементы дырочных конфигураций np^5 [дырка] — почти заполненная оболочка + h-электрон. То есть здесь тоже рассматриваются две частицы. Поэтому формулы (8), (10), (11) одинаковы для электронных и дырочных конфигураций. Также одинаковы переводная матрица в табл. 1 и все коэффициенты К−Г. Для дырочной конфигурации не надо все пересчитывать, а только учесть измененные знаки орбитальных и спиновых проекций p-электрона. Это изменение касается фазового множителя (в электронных конфигурациях он положительный, а в дырочных — отрицательный), орбитального оператора t_1 нечетного ранга и спинового оператора z_1 четного ранга (первый верхний индекс в формулах (8), (10), (11)). Матричные элементы в дырочной конфигурации можно получить только переводом из представления несвязанных моментов (табл. 2) в $LSJM$-представление как более компактное (табл. 3) по сравнению с многочисленными матрицами представления несвязанных моментов. Но и здесь есть косвенные методы проверки правильности полученных величин. Так, при радиальном интеграле $N_{k-1}(S_3)$ рассмотрим отношение коэффициентов $np^5n'l/npn'l$ для трех исследованных конфигура-

Таблица 3. Коэффициенты при обменных радиальных интегралах в матрице оператора энергии взаимодействия спин-чужая орбита в $LSJM$-представлении (результат перевода элементов матрицы с $M = 0$ из табл. 2)

Матричный элемент	ph			p^5h			$\sqrt{}$
	S_3	S_4	$S'_4\ \frac{1}{11\cdot13}$	S_3	S_4	S'_4	
$^3I_7\,^3I_7$	$\frac{204}{143}$	$\frac{1}{11}$	$\frac{6}{91}$	0	0	0	–
$^3I_6\,^3I_6$	$\frac{-34}{143}$	$\frac{-1}{66}$	$\frac{-1}{91}$	0	0	0	–
$^3I_5\,^3I_5$	$\frac{-238}{143}$	$\frac{-7}{66}$	$\frac{-1}{13}$	0	0	0	–
$^3H_6\,^3H_6$	$\frac{-16}{55}$	$\frac{-7}{330}$	1	0	0	0	–
$^3H_5\,^3I_5$	$\frac{16}{275}$	$\frac{7}{1650}$	$\frac{-1}{5}$	0	0	0	–
$^3H_4\,^3H_4$	$\frac{96}{275}$	$\frac{7}{275}$	$\frac{-6}{5}$	0	0	0	–
$^3G_5\,^3G_5$	$\frac{-456}{275}$	$\frac{7}{2475}$	$\frac{36}{5}$	0	0	0	–
$^3G_4\,^3G_4$	$\frac{114}{275}$	$\frac{-7}{9900}$	$\frac{-9}{5}$	0	0	0	–
$^3G_3\,^3G_3$	$\frac{114}{55}$	$\frac{-7}{1980}$	-9	0	0	0	–
$^3I_6\,^3H_6$	$\frac{-476}{715}$	$\frac{1}{330}$	$\frac{1}{26}$	0	0	0	$\sqrt{5}\sqrt{7}$
$^3I_5\,^3H_5$	$\frac{-476}{1573}$	$\frac{1}{726}$	$\frac{5}{286}$	0	0	0	$\sqrt{11}\sqrt{13}$
$^3H_6\,^3G_5$	$\frac{4788}{3025}$	$\frac{-4}{3025}$	$\frac{27}{55}$	0	0	0	$\sqrt{11}$
$^3H_4\,^3G_4$	$\frac{532}{275}$	$\frac{-4}{2475}$	$\frac{3}{5}$	0	0	0	$\sqrt{3}\sqrt{2}$
$^3I_5\,^1H_5$	$\frac{45}{1573}$	0	0	$\frac{12}{143}$	0	0	$\sqrt{11}\sqrt{5}\sqrt{3}\sqrt{2}\sqrt{13}$
$^3H_6\,^1I_6$	$\frac{45}{143}$	0	0	$\frac{-6}{13}$	0	0	$\sqrt{5}\sqrt{3}\sqrt{2}$
$^3G_5\,^1H_5$	$\frac{7}{121}$	0	0	$\frac{4}{11}$	0	0	$\sqrt{11}\sqrt{5}\sqrt{3}\sqrt{2}$
$^3H_4\,^1G_4$	$\frac{7}{33}$	0	0	$\frac{-2}{3}$	0	0	$\sqrt{5}\sqrt{3}\sqrt{2}$
$^3I_6\,^1I_6$	0	0	0	0	0	$\frac{-9}{1183}$	$\sqrt{6}\sqrt{7}$
$^3G_4\,^1G_4$	0	0	0	0	$\frac{-1}{18}$	0	$\sqrt{5}$

Примечание. Не выписанные матричные элементы равны нулю: $^1I_6\,^1I_6$, $^1H_5\,^1H_5$, $^1G_4\,^1G_4$, $^3I_5\,^3G_5$, $^3H_5\,^1H_5$.

ций. Получим следующую картину:

$$\begin{array}{llll} & p^5h/ph & p^5g/pg & p^5f/pf \\ 1) & ^3H_6{}^1I_6 = \frac{-22}{15} & ^3G_5{}^1H_5 = \frac{-18}{13} & ^3F_4{}^1G_4 = \frac{-14}{11} \\ 2) & ^3G_5{}^1H_5 = \frac{44}{7} & ^3F_4{}^1G_4 = \frac{36}{5} & ^3D_3{}^1F_3 = \frac{28}{3} \\ 3) & ^3H_4{}^1G_4\frac{-22}{7} & ^3G_3{}^1F_3 = \frac{-18}{5} & ^3F_2{}^1D_2 = \frac{-14}{3} \\ 4) & ^3I_5{}^1H_5\frac{44}{15} & ^3H_4{}^1G_4 = \frac{36}{13} & ^3G_3{}^1F_3 = \frac{28}{11} \end{array} \qquad (13)$$

Из (13) видно, что приведенные отношения с одинаковым триплетным термом (1–3) или одинаковым синглетным термом (2–4) имеют одинаковые числители во всех конфигурациях. Отношения с разными триплетным и синглетным термами имеют одинаковые знаменатели и разные знаки, (1–4) и (2–3). Качественно картина отношений коэффициентов в дырочной конфигурации к электронной одинакова для трех исследованных конфигураций. Коэффициент при S'_4 в матричном элементе $^3I_6{}^1I_6$ из табл. 3 для дырочной конфигурации полностью совпал с таковым, полученным из матрицы с $M = \pm6$ переводом в $LSJM$-представление.

Таблица 4. Коэффициенты D, учитывающие зависимость приведенного матричного элемента от квантового числа J в (15)

$^3I_7\,^3I_7 = \frac{-1}{\sqrt{91}}$	$^3G_4\,^3G_4 = \frac{1}{6\sqrt{30}}$	$^3H_6\,^1I_6 = \frac{1}{\sqrt{39}}$
$^3I_6\,^3I_6 = \frac{1}{6\sqrt{91}}$	$^3G_3\,^3G_3 = \frac{5}{6\sqrt{30}}$	$^3G_5\,^1H_5 = \frac{1}{\sqrt{33}}$
$^3I_5\,^3I_5 = \frac{\sqrt{7}}{6\sqrt{13}}$	$^3I_6\,^3H_6 = \frac{\sqrt{7}}{6\sqrt{13}}$	$^3H_4\,^1G_4 = \frac{1}{3\sqrt{3}}$
$^3H_6\,^3H_6 = \frac{-5}{6\sqrt{55}}$	$^3I_5\,^3H_5 = \frac{5}{6\sqrt{55}}$	$^3I_6\,^1I_6 = \frac{-1}{\sqrt{39}}$
$^3H_5\,^3H_5 = \frac{1}{6\sqrt{55}}$	$^3H_5\,^3G_5 = \frac{1}{\sqrt{55}}$	$^3H_5\,^1H_5 = \frac{-1}{\sqrt{33}}$
$^3H_4\,^3H_4 = \frac{1}{\sqrt{55}}$	$^3H_4\,^3G_4 = \frac{2}{3\sqrt{30}}$	$^3G_4\,^1G_4 = \frac{-1}{3\sqrt{3}}$
$^3G_5\,^3G_5 = \frac{-2}{3\sqrt{30}}$	$^3I_5\,^1H_5 = \frac{1}{\sqrt{33}}$	$^3I_5\,^3G_5 = 0$

Расчет по формуле (12) дает следующие результаты:

$$\| {}^3I^3I \| = \frac{\sqrt{91}}{11}\left(-\frac{204}{13}S_3 - S_4 - \frac{6}{7\cdot 13\cdot 13}S_4'\right),$$

$$\| {}^3H^3H \| = \frac{\sqrt{55}}{55}\left(\frac{96}{5}S_3 + \frac{7}{5}S_4 - \frac{6}{13}S_4'\right),$$

$$\| {}^3G^3G \| = \frac{\sqrt{30}}{55}\left(-\frac{684}{5}S_3 - \frac{7}{30}S_4 - \frac{54}{13}S_4'\right),$$

$$\| {}^3I^3H \| = \frac{\sqrt{65}}{11}\left(-\frac{2856}{65}S_3 + \frac{1}{5}S_4 + \frac{3}{169}S_4'\right),$$

$$\| {}^3H^3G \| = \frac{\sqrt{5}}{55}\left(\frac{4788}{5}S_3 - \frac{4}{5}S_4 + \frac{27}{13}S_4'\right),$$

$$\| {}^3I^1H \| = \|{}^3H^1I\| = \frac{135\sqrt{130}}{143}S_3,$$

$$\| {}^3H^1G \| = \|{}^3G^1H\| = \frac{21\sqrt{10}}{11}S_3. \quad (14)$$

Не выписанные матричные элементы в (14) равны нулю.

Полный матричный элемент связан с приведенным по формуле

$$(LSJ|H^{SO}|L'S'J) = (-1)^{L'+S+J+1}(LS \parallel H^{SO} \parallel L'S') \times \begin{Bmatrix} L & S & J \\ S' & L' & 1 \end{Bmatrix}. \quad (15)$$

Эти коэффициенты представлены в табл. 4. Если приведенные матричные элементы (14) умножить на соответствующие коэффициенты D из табл. 4, то получим в точности результаты, приведенные в табл. 3. Таким образом, обменные матричные элементы оператора энергии взаимодействия спин-чужая орбита проверены неоднократно и показали полное согласие.

Заключение

Подведем итоги работы. Получены рабочие формулы для расчета обменных матричных элементов в представлении несвязанных моментов. Они проверены на матрицах малых рангов: $M = \pm 6$ 4-го ранга и $M = \pm 7$ 1-го ранга, и проведено сравнение с независимым расчетом в $LSJM$-представлении. В матрице с $M = \pm 6$ нет G-уровней, поэтому все матричные элементы получены из матрицы с $M = 0$ в представлении несвязанных моментов. Составлена переводная матрица коэффициентов К–Г из представления несвязанных моментов в $LSJM$-представление. С ее помощью осуществлен перевод матричных элементов из представления несвязанных моментов табл. 2 в $LSJM$-представление (табл. 3). Для электронных конфигураций $npn'h$ проведено сравнение результатов указанного перевода с независимым расчетом в $LSJM$-представлении. Совпадение оказалось полным. Матричные элементы дырочных конфигураций $np^5n'h$ можно получить только переводом элементов из представления несвязанных моментов в $LSJM$-представление. Правильность полученных результатов для дырочных конфигураций подтверждена косвенными методами проверки (см. (13) и комментарии в тексте).

Таким образом, обменная часть матрицы оператора энергии взаимодействия спин- чужая орбита описывается тремя радиальными интегралами спиновых взаимодействий Марвина (табл. 3 и пояснения в тексте), которые являются физическими параметрами тонкой структуры.

Список литературы

[1] NIST Atomic Spectra Database Levels. Data Si I 585 Lines of Data Found. 2005.

[2] *Anisimova G.P., Dolmanova O.A., Gorbenko A.P., Krylov I.R., Mashek I.Ch., Tchoffo M., Tsygankova G.A.* // Am. J. Mod. Phys. 2015. V. 4. N 6. P. 296.

[3] *Анисимова Г.П., Ефремова Е.А., Цыганкова Г.А., Цыганков М.А.* // Вестник СПбГУ. Сер. 4. 2007. Вып. 1. С. 39.

[4] *Юцис А.П., Савукинас А.Ю.* Математические основы теории атома. Вильнюс, 1973. 479 с.

[5] *Собельман И.И.* Введение в теорию атомных спектров. М.: Изд. физ.-мат. лит., 1963. 640 с.

[6] *Варшалович Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К.* Квантовая теория углового момента. Л.: Наука, 1975. 439 с.