Примеры расчетов *CSF*-состояний.

Первой рассмотрим конфигурацию из двух p-электронов np^2. В этом случае, существует 15 детерминантов. Обозначим их следующим образом.

$$\begin{gathered}
\phi_1 = |det\,-1\!\downarrow, -1\!\uparrow\rangle, \quad \phi_2 = |det\,-1\!\downarrow, 0\!\downarrow\rangle, \quad \phi_3 = |det\,-1\!\downarrow, 0\!\uparrow\rangle, \\
\phi_4 = |det\,-1\!\downarrow, 1\!\downarrow\rangle, \quad \phi_5 = |det\,-1\!\downarrow, 1\!\uparrow\rangle, \quad \phi_6 = |det\,-1\!\uparrow, 0\!\downarrow\rangle, \\
\phi_7 = |det\,-1\!\uparrow, 0\!\uparrow\rangle, \quad \phi_8 = |det\,-1\!\uparrow, 1\!\downarrow\rangle, \quad \phi_9 = |det\,-1\!\uparrow, 1\!\uparrow\rangle, \\
\phi_{10} = |det\,0\!\downarrow, 0\!\uparrow\rangle, \quad \phi_{11} = |det\,0\!\downarrow, 1\!\downarrow\rangle, \quad \phi_{12} = |det\,0\!\downarrow, 1\!\uparrow\rangle, \\
\phi_{13} = |det\,0\!\uparrow, 1\!\downarrow\rangle, \quad \phi_{14} = |det\,0\!\uparrow, 1\!\uparrow\rangle, \quad \phi_{15} = |det\,1\!\downarrow, 1\!\uparrow\rangle.
\end{gathered} \tag{1}$$

Здесь, для краткости, в одноэлектронных состояниях не пишутся главное квантовое число n и орбитальное квантовое число $l = 1$.

Для такого набора определителей существует 15 различных *CSF*-состояний. Запишем их в форме $\Phi_i(L, M_L, S, M_S)$, $i \in [1, 15]$. Значение четности для всех Φ_i равно $P = 0$, так как сумма $l_1 + l_2 = 1 + 1 = 2$ – четна.

$$\begin{gathered}
\Phi_1(0,0,0,0) = \frac{1}{\sqrt{3}}(-\phi_5 + \phi_8 + \phi_{10}), \quad \Phi_2(2,-2,0,0) = \phi_1, \\
\Phi_3(2,-1,0,0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\phi_3 + \phi_6), \quad \Phi_4(2,0,0,0) = \frac{1}{\sqrt{6}}(\phi_5 - \phi_8 + 2\phi_{10}), \\
\Phi_5(2,1,0,0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\phi_{12} + \phi_{13}), \quad \Phi_6(2,2,0,0) = \phi_{15}, \quad \Phi_7(1,-1,1,-1) = \phi_2, \\
\Phi_8(1,0,1,-1) = \phi_4, \quad \Phi_9(1,1,1,-1) = \phi_{11}, \quad \Phi_{10}(1,-1,1,0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_3 + \phi_6), \\
\Phi_{11}(1,0,1,0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_5 + \phi_8), \quad \Phi_{12}(1,1,1,0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{12} + \phi_{13}), \\
\Phi_{13}(1,-1,1,1) = \phi_7, \quad \Phi_{14}(1,0,1,1) = \phi_9, \quad \Phi_{15}(1,1,1,1) = \phi_{14}.
\end{gathered} \tag{2}$$

Эти состояния получаются следующим образом. Поскольку имеется два p электрона, возможные значения проекции полного орбитального момента M_L лежат в диапазоне $[-2, 2]$, значения проекции полного спинового момента $M_S \in [-1, 1]$. Следовательно, может быть не более $5 \times 3 = 15$ различных способов формирования пар (M_L, M_S), каждой из которых соответствует линейная комбинация детерминантов (иногда включающая всего один детерминант), с проекциями M_L и M_S. Фактически, таких пар меньше 15, поскольку, как видно из формулы (1), детерминанта, у которого, например, одновременно $M_L = -2$ и $M_S = -1$ не существует.

Все возможные значения пар (M_L, M_S) получаются из прямого перебора определителей (1). Их получающиеся значение таковы: $(-2, 0)$, $(-1, -1)$, $(-1, 0)$, $(0, -1)$, $(0, 0)$, $(-1, 1)$, $(0, 1)$, $(1, -1)$, $(1, 0)$, $(1, 1)$, $(2, 0)$.

Выпишем теперь все возможные линейные комбинации, соответствующие полученным парам (M_L, M_S), обозначая их $B_i(M_L, M_S)$, $\quad i \in [1, 11]$.

$$\begin{gathered}
B_1(-2,0) = \phi_1, \quad B_2(-1,-1) = \phi_2, \quad B_3(-1,0) = A_1\phi_3 + A_2\phi_6, \quad B_4(0,-1) = \phi_4, \\
B_5(0,0) = A_1\phi_5 + A_2\phi_8 + A_3\phi_{10}, \quad B_6(-1,1) = \phi_7, \quad B_7(0,1) = \phi_9, \\
B_8(1,-1) = \phi_{11}, \quad B_9(1,0) = A_1\phi_{12} + A_2\phi_{13}, \quad B_{10}(1,1) = \phi_{14}, \quad B_{11}(2,0) = \phi_{15},
\end{gathered} \tag{3}$$

Для определения коэффициентов A_k в линейных комбинациях $B_3(-1, 0)$, $B_5(0, 0)$ и $B_9(1, 0)$ необходимо посчитать матричные элементы операторов $\hat{\mathbf{L}}^2$ и $\hat{\mathbf{S}}^2$ между соответствующими детерминантами.

Для случая $B_3(-1, 0)$ получаются следующие матрицы

$$L_3^2 = \begin{pmatrix} 4 & -2 \\ -2 & 4 \end{pmatrix}, \quad S_3^2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{A}^3 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}^{10} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{4}$$

Значение верхнего индекса у собственных векторов $\mathbf{A}^i$ соответствует индексу базисной функции $\Phi_i(L, M_L, S, M_S)$ в формуле (2), и, таким образом, собственным значениям (L, S), равным, соответственно $(2, 0)_3$ и $(1, 1)_{10}$. Те же самые матрицы и собственные векторы получаются в случае $B_9(1, 0)$.

В случае линейной комбинации $B_5(0, 0)$ матрицы операторов $\hat{\mathbf{L}}^2$ и $\hat{\mathbf{S}}^2$ и собственные векторы будут равны

$$L_5^2 = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & -2 \\ 2 & -2 & 4 \end{pmatrix}, \quad S_5^2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{5}$$

$$\mathbf{A}^1 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}^4 = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}^{11} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{6}$$

Собственным векторам $\mathbf{A}^1$, $\mathbf{A}^4$ и $\mathbf{A}^{11}$ отвечают собственные значения $(0, 0)$, $(2, 0)$ и $(1, 1)$.

Вычислим, какие возможные термы существуют для конфигурации из трех p-электронов np^3 с квантовыми числами $M_L = 0$, $M_S = 1/2$ и $P = 1$.

В этом случае волновые функции $\Phi(L, 0, S, 1/2, 1; q)$ строятся из трех детерминантов (квантовые числа n и $l = 1$ не пишем)

$$\phi_1 = |det -1\!\downarrow, 0\!\uparrow, 1\!\uparrow\rangle, \quad \phi_2 = |det -1\!\uparrow, 0\!\downarrow, 1\!\uparrow\rangle, \quad \phi_3 = |det -1\!\uparrow, 0\!\uparrow, 1\!\downarrow\rangle. \tag{7}$$

Матрицы операторов $\hat{\mathbf{L}}^2$ и $\hat{\mathbf{S}}^2$ равны

$$L^2 = \begin{pmatrix} 2 & -2 & 0 \\ -2 & 4 & -2 \\ 0 & -2 & 2 \end{pmatrix}, \quad S^2 = \begin{pmatrix} 7/4 & 1 & 1 \\ 1 & 7/4 & 1 \\ 1 & 1 & 7/4 \end{pmatrix}. \tag{8}$$

Им отвечают следующие собственные значения (L, S) и собственные векторы $\mathbf{A}_{(L,S)}$

$$\mathbf{A}_{(1,\frac{1}{2})} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{A}_{(2,\frac{1}{2})} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{A}_{(0,\frac{3}{2})} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{9}$$

В качестве следующего примера рассмотрим конфигурацию $n_1p^1n_2s^2n_2d^2$, состоящую из

Все возможные базисные состояния $\Phi_i = \sum_{k=1}^{19} A_i^k \phi_k$ будут строиться из этих детерминантов (10). Матрицы операторов $\hat{\mathbf{L}}^2$ и $\hat{\mathbf{S}}^2$ будут, соответственно, равны

$$L^2 = \begin{pmatrix}
8 & 2\sqrt{6} & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\sqrt{2} & 2\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
2\sqrt{6} & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 8 & 0 & 2\sqrt{6} & 0 & 0 & 0 & 2\sqrt{2} & 0 & 2\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 8 & 0 & 2\sqrt{6} & 0 & 0 & 0 & 2\sqrt{2} & 0 & 2\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 2\sqrt{6} & 0 & 12 & -6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\sqrt{3} & 0 & 2\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 2\sqrt{6} & -6 & 12 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\sqrt{3} & -2\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
2\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 6 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
2\sqrt{2} & 2\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 & 12 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\sqrt{2} & 2\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 2\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 6 & 0 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 2\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 6 & 0 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\sqrt{2} & 0 & 0 \\
0 & 0 & 2\sqrt{2} & 0 & 2\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 4 & 0 & 12 & 0 & 6 & 0 & 0 & 2\sqrt{2} & 0 & 2\sqrt{3} & 0 \\
0 & 0 & 0 & 2\sqrt{2} & 0 & 2\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 4 & 0 & 12 & -6 & 0 & 0 & 0 & 2\sqrt{2} & 0 & 2\sqrt{3} \\
0 & 0 & 0 & 0 & 2\sqrt{3} & -2\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 6 & -6 & 14 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\sqrt{3} & -2\sqrt{3} \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\sqrt{2} & 2\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 2\sqrt{6} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\sqrt{6} & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\sqrt{2} & 0 & 2\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 & 2\sqrt{6} & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\sqrt{2} & 0 & 2\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 & 2\sqrt{6} \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\sqrt{3} & 0 & 2\sqrt{3} & 0 & 0 & 2\sqrt{6} & 0 & 12 & -6 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\sqrt{3} & -2\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 2\sqrt{6} & -6 & 12
\end{pmatrix}, \qquad (11)$$

$$S^2 = \begin{pmatrix}
7/4 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 7/4 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
1 & 0 & 7/4 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
1 & 0 & 1 & 7/4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 1 & 0 & 0 & 7/4 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 7/4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 7/4 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 7/4 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 7/4 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 7/4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 7/4 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 7/4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 7/4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 7/4 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 7/4 & 0 & 0 & 1 & 1 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 7/4 & 1 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 7/4 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 7/4 & 1 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 7/4
\end{pmatrix}. \qquad (12)$$

В этом случае существуют следующие наборы $(L,S)_i$ собственных значений: $(1,1/2)_1$, $(2,1/2)_2$, $(3,1/2)_3$, $(3,1/2)_4$, $(2,1/2)_5$, $(0,1/2)_6$, $(1,1/2)_7$, $(5,1/2)_8$, $(4,1/2)_9$, $(1,1/2)_{10}$, $(2,1/2)_{11}$, $(4,1/2)_{12}$, $(3,1/2)_{13}$, $(2,3/2)_{14}$, $(1,3/2)_{15}$, $(3,3/2)_{16}$, $(2,3/2)_{17}$, $(4,3/2)_{18}$, $(0,3/2)_{19}$. Соответствующие значения собственных векторов приводятся в таблицах раздела 1.2.

Для конфигурации $n_1 s^1 n_2 d^2 n_3 f^1$ существует 66 детерминантов с $M_L = 0$, $M_S = 0$ и $P = 1$. В качестве примера в таблицах раздела 1.2 представлены результаты расчетов для $L = 3$, и всех возможных S для данного L.

1.2 Значения коэффициентов A_k для базисных функций.

Волновые функции для конфигурации $n_1 s^1 n_2 d^2 n_3 f^1$.

k	*det*	${}^1F(1)$	${}^1F(2)$	${}^1F(3)$	${}^1F(4)$	${}^1F(5)$	${}^3F(1)$	${}^3F(2)$
1	$\lvert 0^- {-2}^- {-1}^+ 3^+\rangle$	0.160015	−0.157398	0.161405	−0.0716889	−0.108925	0.0301194	−0.035107
2	$\lvert 0^- {-2}^- 0^+ 2^+\rangle$	0.197761	0.0954117	0.00161791	0.016482	0.121013	0.0111734	−0.0081648
3	$\lvert 0^- {-2}^- 1^+ 1^+\rangle$	−0.0449785	0.0987214	−0.0072569	−0.119966	0.0929245	−0.00427644	0.0292791
4	$\lvert 0^- {-2}^- 2^+ 0^+\rangle$	−0.0126273	−0.0439382	−0.206551	−0.0929546	−0.293258	−0.0130554	0.228365
5	$\lvert 0^- {-2}^+ {-1}^- 3^+\rangle$	−0.00435313	0.234089	−0.0910255	0.173941	0.00875073	0.00575637	0.0996022
6	$\lvert 0^- {-2}^+ {-1}^+ 3^-\rangle$	−0.155662	−0.0766906	−0.070379	−0.102252	0.100174	0.235902	−0.10335
7	$\lvert 0^- {-2}^+ 0^- 2^+\rangle$	−0.0420994	−0.018721	0.0687611	0.0857701	−0.221187	0.0247024	0.0726601
8	$\lvert 0^- {-2}^+ 0^+ 2^-\rangle$	−0.155662	−0.0766906	−0.070379	−0.102252	0.100174	0.235902	−0.10335
9	$\lvert 0^- {-2}^+ 1^- 1^+\rangle$	−0.116656	0.00397723	0.0513361	−0.124842	−0.0548011	0.00410856	0.0431916
10	$\lvert 0^- {-2}^+ 1^+ 1^-\rangle$	0.161635	−0.102699	−0.0440792	0.244808	−0.0381235	−0.00535359	0.25118
11	$\lvert 0^- {-2}^+ 2^- 0^+\rangle$	0.0126273	0.0439382	0.206551	0.0929546	0.293258	0.0130554	−0.228365
12	$\lvert 0^- {-2}^+ 2^+ 0^-\rangle$	0	0	0	0	0	0	0
13	$\lvert 0^- {-1}^- {-1}^+ 2^+\rangle$	−0.180435	0.0100203	−0.0104104	0.0925691	−0.185534	0.00331166	0.0769923
14	$\lvert 0^- {-1}^- 0^+ 1^+\rangle$	−0.0820266	−0.0396927	−0.137193	0.13281	0.0567047	−0.0329682	−0.0570282
15	$\lvert 0^- {-1}^- 1^+ 0^+\rangle$	−0.111522	−0.120164	0.308037	0.0845099	0.0373896	0.0275786	−0.204268
16	$\lvert 0^- {-1}^- 2^+ {-1}^+\rangle$	0.116656	−0.00397723	−0.0513361	0.124842	0.0548011	−0.00410856	−0.0431916
17	$\lvert 0^- {-1}^+ 0^- 1^+\rangle$	0.0338653	−0.207346	−0.0280715	0.00534212	0.054993	−0.0235509	−0.133706
18	$\lvert 0^- {-1}^+ 0^+ 1^-\rangle$	0.0481613	0.247038	0.165265	−0.138152	−0.111698	−0.366437	−0.144221
19	$\lvert 0^- {-1}^+ 1^- 0^+\rangle$	0.111522	0.120164	−0.308037	−0.0845099	−0.0373896	−0.0275786	0.204268
20	$\lvert 0^- {-1}^+ 1^+ 0^-\rangle$	0	0	0	0	0	0	0
21	$\lvert 0^- {-1}^+ 2^- {-1}^+\rangle$	0.0449785	−0.0987214	0.0072569	0.119966	−0.0929245	0.00427644	−0.0292791
22	$\lvert 0^- {-1}^+ 2^+ {-1}^-\rangle$	−0.161635	0.102699	0.0440792	−0.244808	0.0381235	0.00535359	−0.25118
23	$\lvert 0^- 0^- 0^+ 0^+\rangle$	0.275418	−0.116933	−0.153715	−0.264777	−0.0398104	−0.0142605	0.0958292
24	$\lvert 0^- 0^- 1^+ {-1}^+\rangle$	−0.0338653	0.207346	0.0280715	−0.00534212	−0.054993	0.0235509	0.133706
25	$\lvert 0^- 0^- 2^+ {-2}^+\rangle$	0.0420994	0.018721	−0.0687611	−0.0857701	0.221187	−0.0247024	−0.0726601
26	$\lvert 0^- 0^+ 1^- {-1}^+\rangle$	0.0820266	0.0396927	0.137193	−0.13281	−0.0567047	0.0329682	0.0570282
27	$\lvert 0^- 0^+ 1^+ {-1}^-\rangle$	−0.0481613	−0.247038	−0.165265	0.138152	0.111698	0.366437	0.144221
28	$\lvert 0^- 0^+ 2^- {-2}^+\rangle$	−0.197761	−0.0954117	−0.00161791	−0.016482	−0.121013	−0.0111734	0.0081648
29	$\lvert 0^- 0^+ 2^+ {-2}^-\rangle$	0.155662	0.0766906	0.070379	0.102252	−0.100174	−0.235902	0.10335
30	$\lvert 0^- 1^- 1^+ {-2}^+\rangle$	−0.180435	0.0100203	−0.0104104	0.0925691	−0.185534	0.00331166	0.0769923
31	$\lvert 0^- 1^- 2^+ {-3}^+\rangle$	0.00435313	−0.234089	0.0910255	−0.173941	−0.00875073	−0.00575637	−0.0996022
32	$\lvert 0^- 1^+ 2^- {-3}^+\rangle$	−0.160015	0.157398	−0.161405	0.0716889	0.108925	−0.0301194	0.035107
33	$\lvert 0^- 1^+ 2^+ {-3}^-\rangle$	0.155662	0.0766906	0.070379	0.102252	−0.100174	−0.235902	0.10335
34	$\lvert 0^+ {-2}^- {-1}^- 3^+\rangle$	−0.155662	−0.0766906	−0.070379	−0.102252	0.100174	−0.235902	0.10335
35	$\lvert 0^+ {-2}^- {-1}^+ 3^-\rangle$	−0.00435313	0.234089	−0.0910255	0.173941	0.00875073	−0.00575637	−0.0996022
36	$\lvert 0^+ {-2}^- 0^- 2^+\rangle$	−0.155662	−0.0766906	−0.070379	−0.102252	0.100174	−0.235902	0.10335
37	$\lvert 0^+ {-2}^- 0^+ 2^-\rangle$	−0.0420994	−0.018721	0.0687611	0.0857701	−0.221187	−0.0247024	−0.0726601
38	$\lvert 0^+ {-2}^- 1^- 1^+\rangle$	0.161635	−0.102699	−0.0440792	0.244808	−0.0381235	0.00535359	−0.25118
39	$\lvert 0^+ {-2}^- 1^+ 1^-\rangle$	−0.116656	0.00397723	0.0513361	−0.124842	−0.0548011	−0.00410856	−0.0431916
40	$\lvert 0^+ {-2}^- 2^- 0^+\rangle$	0	0	0	0	0	0	0
41	$\lvert 0^+ {-2}^- 2^+ 0^-\rangle$	0.0126273	0.0439382	0.206551	0.0929546	0.293258	−0.0130554	0.228365
42	$\lvert 0^+ {-2}^+ {-1}^- 3^-\rangle$	0.160015	−0.157398	0.161405	−0.0716889	−0.108925	−0.0301194	0.035107
43	$\lvert 0^+ {-2}^+ 0^- 2^-\rangle$	0.197761	0.0954117	0.00161791	0.016482	0.121013	−0.0111734	0.0081648
44	$\lvert 0^+ {-2}^+ 1^- 1^-\rangle$	−0.0449785	0.0987214	−0.0072569	−0.119966	0.0929245	0.00427644	−0.0292791
45	$\lvert 0^+ {-2}^+ 2^- 0^-\rangle$	−0.0126273	−0.0439382	−0.206551	−0.0929546	−0.293258	0.0130554	−0.228365
46	$\lvert 0^+ {-1}^- {-1}^+ 2^-\rangle$	0.180435	−0.0100203	0.0104104	−0.0925691	0.185534	0.00331166	0.0769923
47	$\lvert 0^+ {-1}^- 0^- 1^+\rangle$	0.0481613	0.247038	0.165265	−0.138152	−0.111698	0.366437	0.144221
48	$\lvert 0^+ {-1}^- 0^+ 1^-\rangle$	0.0338653	−0.207346	−0.0280715	0.00534212	0.054993	0.0235509	0.133706
49	$\lvert 0^+ {-1}^- 1^- 0^+\rangle$	0	0	0	0	0	0	0
50	$\lvert 0^+ {-1}^- 1^+ 0^-\rangle$	0.111522	0.120164	−0.308037	−0.0845099	−0.0373896	0.0275786	−0.204268
51	$\lvert 0^+ {-1}^- 2^- {-1}^+\rangle$	−0.161635	0.102699	0.0440792	−0.244808	0.0381235	−0.00535359	0.25118
52	$\lvert 0^+ {-1}^- 2^+ {-1}^-\rangle$	0.0449785	−0.0987214	0.0072569	0.119966	−0.0929245	−0.00427644	0.0292791
53	$\lvert 0^+ {-1}^+ 0^- 1^-\rangle$	−0.0820266	−0.0396927	−0.137193	0.13281	0.0567047	0.0329682	0.0570282
54	$\lvert 0^+ {-1}^+ 1^- 0^-\rangle$	−0.111522	−0.120164	0.308037	0.0845099	0.0373896	−0.0275786	0.204268
55	$\lvert 0^+ {-1}^+ 2^- {-1}^-\rangle$	0.116656	−0.00397723	−0.0513361	0.124842	0.0548011	0.00410856	0.0431916
56	$\lvert 0^+ 0^- 0^+ 0^-\rangle$	−0.275418	0.116933	0.153715	0.264777	0.0398104	−0.0142605	0.0958292
57	$\lvert 0^+ 0^- 1^- {-1}^+\rangle$	−0.0481613	−0.247038	−0.165265	0.138152	0.111698	−0.366437	−0.144221
58	$\lvert 0^+ 0^- 1^+ {-1}^-\rangle$	0.0820266	0.0396927	0.137193	−0.13281	−0.0567047	−0.0329682	−0.0570282
59	$\lvert 0^+ 0^- 2^- {-2}^+\rangle$	0.155662	0.0766906	0.070379	0.102252	−0.100174	0.235902	−0.10335
60	$\lvert 0^+ 0^- 2^+ {-2}^-\rangle$	−0.197761	−0.0954117	−0.00161791	−0.016482	−0.121013	0.0111734	−0.0081648
61	$\lvert 0^+ 0^+ 1^- {-1}^-\rangle$	−0.0338653	0.207346	0.0280715	−0.00534212	−0.054993	−0.0235509	−0.133706
62	$\lvert 0^+ 0^+ 2^- {-2}^-\rangle$	0.0420994	0.018721	−0.0687611	−0.0857701	0.221187	0.0247024	0.0726601
63	$\lvert 0^+ 1^- 1^+ {-2}^-\rangle$	0.180435	−0.0100203	0.0104104	−0.0925691	0.185534	0.00331166	0.0769923
64	$\lvert 0^+ 1^- 2^- {-3}^+\rangle$	0.155662	0.0766906	0.070379	0.102252	−0.100174	0.235902	−0.10335
65	$\lvert 0^+ 1^- 2^+ {-3}^-\rangle$	−0.160015	0.157398	−0.161405	0.0716889	0.108925	0.0301194	−0.035107
66	$\lvert 0^+ 1^+ 2^- {-3}^-\rangle$	0.00435313	−0.234089	0.0910255	−0.173941	−0.00875073	0.00575637	0.0996022

Волновые функции для конфигурации $n_1s^1n_2d^2n_3f^1$ (*продолжение*).

k	det	$^3F(3)$	$^3F(4)$	$^3F(5)$	$^3F(6)$	$^3F(7)$	$^5F(1)$	$^5F(2)$
1	$\vert 0^- {-2}^- {-1}^+ 3^+\rangle$	−0.229805	0.212417	0.0405134	0.0990795	−0.0984028	0.160041	0.0465247
2	$\vert 0^- {-2}^- 0^+ 2^+\rangle$	−0.179243	0.0654941	−0.164258	−0.027573	0.162969	0.160041	0.0465247
3	$\vert 0^- {-2}^- 1^+ 1^+\rangle$	−0.0513141	−0.195815	0.106323	−0.175567	0.02946	−0.174933	0.139279
4	$\vert 0^- {-2}^- 2^+ 0^+\rangle$	0.133587	0.201019	0.0893303	−0.0856145	−0.116229	0	0
5	$\vert 0^- {-2}^+ {-1}^- 3^+\rangle$	0.026692	−0.0337644	−0.325659	−0.0443811	0.0371793	0.160041	0.0465247
6	$\vert 0^- {-2}^+ {-1}^+ 3^-\rangle$	0.0518033	0.0495753	−0.0159606	−0.106159	−0.0183467	0.160041	0.0465247
7	$\vert 0^- {-2}^+ 0^- 2^+\rangle$	−0.0238701	0.113158	−0.120888	0.0822714	−0.224193	0.160041	0.0465247
8	$\vert 0^- {-2}^+ 0^+ 2^-\rangle$	0.0518033	0.0495753	−0.0159606	−0.106159	−0.0183467	0.160041	0.0465247
9	$\vert 0^- {-2}^+ 1^- 1^+\rangle$	−0.024252	−0.145573	0.170393	−0.114504	−0.137991	−0.174933	0.139279
10	$\vert 0^- {-2}^+ 1^+ 1^-\rangle$	−0.0677534	−0.115037	0.0600832	0.240941	0.0859866	−0.174933	0.139279
11	$\vert 0^- {-2}^+ 2^- 0^+\rangle$	−0.133587	−0.201019	−0.0893303	0.0856145	0.116229	0	0
12	$\vert 0^- {-2}^+ 2^+ 0^-\rangle$	0	0	0	0	0	0	0
13	$\vert 0^- {-1}^- {-1}^+ 2^+\rangle$	0.147503	−0.0210634	−0.0481859	0.0379819	−0.209412	0	0
14	$\vert 0^- {-1}^- 0^+ 1^+\rangle$	0.279967	0.0132005	−0.0274428	0.109048	0.116411	−0.0387996	−0.244143
15	$\vert 0^- {-1}^- 1^+ 0^+\rangle$	−0.0867142	−0.113997	0.021642	0.191379	−0.173805	0	0
16	$\vert 0^- {-1}^- 2^+ {-1}^+\rangle$	0.024252	0.145573	−0.170393	0.114504	0.137991	0.174933	−0.139279
17	$\vert 0^- {-1}^+ 0^- 1^+\rangle$	0.133733	0.122438	0.139391	0.15973	0.113315	−0.0387996	−0.244143
18	$\vert 0^- {-1}^+ 0^+ 1^-\rangle$	0.00107234	0.0625059	−0.0483506	−0.127238	−0.076303	−0.0387996	−0.244143
19	$\vert 0^- {-1}^+ 1^- 0^+\rangle$	0.0867142	0.113997	−0.021642	−0.191379	0.173805	0	0
20	$\vert 0^- {-1}^+ 1^+ 0^-\rangle$	0	0	0	0	0	0	0
21	$\vert 0^- {-1}^+ 2^- {-1}^+\rangle$	0.0513141	0.195815	−0.106323	0.175567	−0.02946	0.174933	−0.139279
22	$\vert 0^- {-1}^+ 2^+ {-1}^-\rangle$	0.0677534	0.115037	−0.0600832	−0.240941	−0.0859866	0.174933	−0.139279
23	$\vert 0^- 0^- 0^+ 0^+\rangle$	−0.120092	0.268482	0.214296	−0.119705	0.169425	0	0
24	$\vert 0^- 0^- 1^+ {-1}^+\rangle$	−0.133733	−0.122438	−0.139391	−0.15973	−0.113315	0.0387996	0.244143
25	$\vert 0^- 0^- 2^+ {-2}^+\rangle$	0.0238701	−0.113158	0.120888	−0.0822714	0.224193	−0.160041	−0.0465247
26	$\vert 0^- 0^+ 1^- {-1}^+\rangle$	−0.279967	−0.0132005	0.0274428	−0.109048	−0.116411	0.0387996	0.244143
27	$\vert 0^- 0^+ 1^+ {-1}^-\rangle$	−0.00107234	−0.0625059	0.0483506	0.127238	0.076303	0.0387996	0.244143
28	$\vert 0^- 0^+ 2^- {-2}^+\rangle$	0.179243	−0.0654941	0.164258	0.027573	−0.162969	−0.160041	−0.0465247
29	$\vert 0^- 0^+ 2^+ {-2}^-\rangle$	−0.0518033	−0.0495753	0.0159606	0.106159	0.0183467	−0.160041	−0.0465247
30	$\vert 0^- 1^- 1^+ {-2}^+\rangle$	0.147503	−0.0210634	−0.0481859	0.0379819	−0.209412	0	0
31	$\vert 0^- 1^- 2^+ {-3}^+\rangle$	−0.026692	0.0337644	0.325659	0.0443811	−0.0371793	−0.160041	−0.0465247
32	$\vert 0^- 1^+ 2^- {-3}^+\rangle$	0.229805	−0.212417	−0.0405134	−0.0990795	0.0984028	−0.160041	−0.0465247
33	$\vert 0^- 1^+ 2^+ {-3}^-\rangle$	−0.0518033	−0.0495753	0.0159606	0.106159	0.0183467	−0.160041	−0.0465247
34	$\vert 0^+ {-2}^- {-1}^- 3^+\rangle$	−0.0518033	−0.0495753	0.0159606	0.106159	0.0183467	0.160041	0.0465247
35	$\vert 0^+ {-2}^- {-1}^+ 3^-\rangle$	−0.026692	0.0337644	0.325659	0.0443811	−0.0371793	0.160041	0.0465247
36	$\vert 0^+ {-2}^- 0^- 2^+\rangle$	−0.0518033	−0.0495753	0.0159606	0.106159	0.0183467	0.160041	0.0465247
37	$\vert 0^+ {-2}^- 0^+ 2^-\rangle$	0.0238701	−0.113158	0.120888	−0.0822714	0.224193	0.160041	0.0465247
38	$\vert 0^+ {-2}^- 1^- 1^+\rangle$	0.0677534	0.115037	−0.0600832	−0.240941	−0.0859866	−0.174933	0.139279
39	$\vert 0^+ {-2}^- 1^+ 1^-\rangle$	0.024252	0.145573	−0.170393	0.114504	0.137991	−0.174933	0.139279
40	$\vert 0^+ {-2}^- 2^- 0^+\rangle$	0	0	0	0	0	0	0
41	$\vert 0^+ {-2}^- 2^+ 0^-\rangle$	0.133587	0.201019	0.0893303	−0.0856145	−0.116229	0	0
42	$\vert 0^+ {-2}^+ {-1}^- 3^-\rangle$	0.229805	−0.212417	−0.0405134	−0.0990795	0.0984028	0.160041	0.0465247
43	$\vert 0^+ {-2}^+ 0^- 2^-\rangle$	0.179243	−0.0654941	0.164258	0.027573	−0.162969	0.160041	0.0465247
44	$\vert 0^+ {-2}^+ 1^- 1^-\rangle$	0.0513141	0.195815	−0.106323	0.175567	−0.02946	−0.174933	0.139279
45	$\vert 0^+ {-2}^+ 2^- 0^-\rangle$	−0.133587	−0.201019	−0.0893303	0.0856145	0.116229	0	0
46	$\vert 0^+ {-1}^- {-1}^+ 2^-\rangle$	0.147503	−0.0210634	−0.0481859	0.0379819	−0.209412	0	0
47	$\vert 0^+ {-1}^- 0^- 1^+\rangle$	−0.00107234	−0.0625059	0.0483506	0.127238	0.076303	−0.0387996	−0.244143
48	$\vert 0^+ {-1}^- 0^+ 1^-\rangle$	−0.133733	−0.122438	−0.139391	−0.113315	−0.0387996	−0.244143	
49	$\vert 0^+ {-1}^- 1^- 0^+\rangle$	0	0	0	0	0	0	0

0 $\vert 0^+ {-1}^- 1^+ 0^-\rangle$ −0.0867142 0.11399 0 .02164 0 .191379 −0.173805 0 0

1 $\vert 0^+ {-1}^- 2^- {-1}^+\rangle$ −0.0677534 0.115037 0.0600832 0.240941 0.0859866 0.174933 −0.139279

$\vert 0^+ {-1}^- 2^+ {-1}^-\rangle$ −0.0513141 0.195815 0.106323 −0.175567

4 $\vert 0^+ {-1}^+ 1^- 0^-\rangle$ 0.0867142 0.11399 −0.02164 −0.191379 0.173805 0 0

5 $\vert 0^+ {-1}^+ 2^- {-1}^-\rangle$ 0.024252 .170393 −0.114504 −0.137991 0.174933 −0.139279

6 $\vert 0^+ 0^- 0^+ 0^-\rangle$ 0.120090 .26840 .214296 −0.119705 0.19425 0 0

7 $\vert 0^+ 0^- 1^- {-1}^+\rangle$ .00107234

9 $\vert 0^+ 0^- 2^- {-2}^+\rangle$ 0.0518033 0.0495753 −0.0159606 −0.0183467 −0.160041 −0.0465247

60 $\vert 0^+ 0^- 2^+ {-2}^-\rangle$ −0.179243 0.0654941 −0.164258 −0.027573 0.12969 −0.160041 −0.0465247

61 $\vert 0^+ 0^+ 1^- {-1}^-\rangle$ 0.133733 0.122438 0.139391 0. .113315 0.0387996 0.244143

62 $\vert 0^+ 0^+ 2^- {-2}^-\rangle$ −0.0238701 0−0.12088 0 .022714 −0.224193 −0.160041 −0.0465247

63 $\vert 0^+ 1^- 1^+ {-2}^-\rangle$ 0.147503 −0.0210134 −0. .0379819 −0.209412 0 0

64 $\vert 0^+ 1^- 2^- {-} {}^+\rangle$ 0.0518033 0.0495753 −0.0159606 −0.0183467 −0.160041 −0.0465247

${}^- 2^+ {-} {}^-\rangle$ −0.229805 .21241 0 .04

Волновые функции для конфигурации $n_1s^1n_2d^2n_3f^1$.

k	$\Phi_1(1,1/2)$	$\Phi_2(2,1/2)$	$\Phi_3(3,1/2)$	$\Phi_4(3,1/2)$	$\Phi_5(2,1/2)$	$\Phi_6(0,1/2)$	$\Phi_7(1,1/2)$	$\Phi_8(5,1/2)$	$\Phi_9(4,1/2)$	$\Phi_{10}(1,1/2)$
1	−0.332784	−0.0103279	0.153411	0.395769	−0.306067	0.298142	−0.146166	0	−0.2861594	0.03498228
2	0.407575	−0.357335	0.125259	0.323144	−0.122802	−0.365148	0.179016	0	−0.2336482	−0.04284437
3	0.297446	−0.103571	−0.233024	−0.0505581	0.443111	−0.149071	−0.247511	−0.1259882	0.1830124	−0.1103119
4	0.0353375	0.113899	0.0796136	−0.345211	−0.137044	−0.149071	0.393677	0.1259882	0.1031469	0.07532961
5	−0.25729	0.223059	0.209853	−0.180977	−0.0570228	0.182574	0.041374	−0.3086067	0.2146389	0.0593161
6	−0.150285	0.134277	−0.335113	−0.142168	0.179824	0.182574	−0.22039	0.3086067	0.01900923	−0.01647173
7	0	0.61162	0	0	−0.00372337	−0.421637	0	0	−0.2697936	0
8	0	0.0146059	0	0	0.432844	0.210819	0	0	−0.5395873	0
9	−0.208207	−0.30581	−0.365636	0.180125	0.00186168	0.210819	0.392106	−0.08908708	0.1348968	−0.3423275
10	0.208207	−0.30581	0.365636	−0.180125	0.00186168	0.210819	−0.392106	0.08908708	0.1348968	0.3423275
11	0.0228681	−0.00730294	−0.327386	0.0618358	−0.216422	−0.105409	0.0612819	−0.3563483	0.2697936	0.4735958
12	−0.0228681	−0.00730294	0.327386	−0.0618358	−0.216422	−0.105409	−0.0612819	0.3563483	0.2697936	−0.4735958
13	0.0389115	0	0.0765003	−0.236578	0	0	−0.212411	−0.5345225	0	−0.5173519
14	0.332784	−0.0103279	−0.153411	−0.395769	−0.306067	0.298142	0.146166	0	−0.2861594	−0.03498228
15	−0.407575	−0.357335	−0.125259	−0.323144	−0.122802	−0.365148	−0.179016	0	−0.2336482	0.04284437
16	−0.0353375	0.113899	−0.0796136	0.345211	−0.137044	−0.149071	−0.393677	−0.1259882	0.1031469	−0.07532961
17	−0.297446	−0.103571	0.233024	0.0505581	0.443111	−0.149071	0.247511	0.1259882	0.1830124	0.1103119
18	0.150285	0.134277	0.335113	0.142168	0.179824	0.182574	0.22039	−0.3086067	0.01900923	0.01647173
19	0.25729	0.223059	−0.209853	0.180977	−0.0570228	0.182574	−0.041374	0.3086067	0.2146389	−0.0593161

Волновые функции для конфигурации $n_1s^1n_2d^2n_3f^1$ (*продолжение*).

k	$\Phi_{11}(2,1/2)$	$\Phi_{12}(4,1/2)$	$\Phi_{13}(3,1/2)$	$\Phi_{14}(2,3/2)$	$\Phi_{15}(1,3/2)$	$\Phi_{16}(3,3/2)$	$\Phi_{17}(2,3/2)$	$\Phi_{18}(4,3/2)$	$\Phi_{19}(0,3/2)$
1	0.2548459	0.06186354	0.1408253	−0.2764307	−0.2581989	−0.3162278	−0.05432463	−0.2070197	−0.2108185
2	−0.009398951	0.05051137	0.1149834	−0.01792206	0.3162278	−0.2581989	−0.2666597	−0.1690309	0.2581989
3	0.2165501	0.1537833	−0.3141642	−0.2764307	−0.2581989	−0.3162278	−0.05432463	−0.2070197	−0.2108185
4	−0.471396	−0.2156469	0.1733389	−0.2764307	−0.2581989	−0.3162278	−0.05432463	−0.2070197	−0.2108185
5	−0.1357269	0.427202	−0.2997929	−0.01792206	0.3162278	−0.2581989	−0.2666597	−0.1690309	0.2581989
6	0.1451259	−0.4777134	0.1848095	−0.01792206	0.3162278	−0.2581989	−0.2666597	−0.1690309	0.2581989
7	0.1964827	0.05832551	0	−0.1644241	0	0	0.4234548	−0.19518	0.2981424
8	−0.3604066	0.116651	0	0.390932	0	0	0.07682664	−0.39036	−0.1490712
9	−0.09824137	−0.02916275	−0.1079022	−0.1644241	0	0	0.4234548	−0.19518	0.2981424
10	−0.09824137	−0.02916275	0.1079022	−0.1644241	0	0	0.4234548	−0.19518	0.2981424
11	0.1802033	−0.05832551	0.1828634	0.390932	0	0	0.07682664	−0.39036	−0.1490712
12	0.1802033	−0.05832551	−0.1828634	0.390932	0	0	0.07682664	−0.39036	−0.1490712
13	0	0	0.5815313	0	0	0	0	0	0
14	0.2548459	0.06186354	−0.1408253	−0.2764307	0.2581989	0.3162278	−0.05432463	−0.2070197	−0.2108185
15	−0.009398951	0.05051137	−0.1149834	−0.01792206	−0.3162278	0.2581989	−0.2666597	−0.1690309	0.2581989
16	−0.471396	−0.2156469	−0.1733389	−0.2764307	0.2581989	0.3162278	−0.05432463	−0.2070197	−0.2108185
17	0.2165501	0.1537833	0.3141642	−0.2764307	0.2581989	0.3162278	−0.05432463	−0.2070197	−0.2108185
18	0.1451259	−0.4777134	−0.1848095	−0.01792206	−0.3162278	0.2581989	−0.2666597	−0.1690309	0.2581989
19	−0.1357269	0.427202	0.2997929	−0.01792206	−0.3162278	0.2581989	−0.2666597	−0.1690309	0.2581989