Доклады Академии наук СССР
1975. Том 220, № 1

УДК 539.01 **ФИЗИКА**

Б. А. МЕНЬ, А. Н. МЕНЬ

СЕНЬОРИТИ-КЛАССИФИКАЦИЯ В ТЕОРИИ МАГНЕТИЗМА МОЛЕКУЛ И ПРИМЕСНЫХ КОМПЛЕКСОВ В КРИСТАЛЛЕ

(Представлено академиком С. В. Вонсовским 12 IV 1974)

Классификация по квантовому числу Сеньорити, использованная впервые Рака [1], сыграла существенную роль при анализе спектров атомов. В последние годы в работах Джадда и Вайборна [2] этот подход нашел свое дальнейшее развитие в теории сложных атомных спектров [2] и теории ядра [3], благодаря использованию аппарата плетизмов Литтлвуда.

В работах [4–6] был развит метод плетизмов для классификации разрешенных термов молекул и примесных комплексов в кристалле.

В настоящей работе предложен метод Сеньорити-классификации не только разрешенных термов молекул и примесных комплексов, но и спин-тензоров различных рангов одноатомных и многоатомных спиновых операторов, которые играют важную роль в теории магнетизма. Сеньорити-классификация разрешенных термов базируется на редукциях (1) или (2) от унитарной группы U к группе вращений R_3 через ортогональную R или симплектическую Sp подгруппу

$$U_{2s_i+1} \to R_{2s_i+1} \to R_3 \quad s_i \text{ целое,} \tag{1}$$

$$U_{2s_i+1} \to Sp_{2s_i+1} \to R_3 \quad s_i \text{ полуцелое,} \tag{2}$$

где s_i — спин каждого из N атомов комплекса или молекулы.

Изложим процедуру проведения Сеньорити-классификации в случае, когда состояние атомов комплекса орбитально-невырожденное:

1) берем схему Юнга $[\lambda]$ симметрической группы π_N;

2) разлагая представление $\{\lambda\}$ унитарной группы U_{2s_i+1} на ортогональной группе R_{2s_i+1} или симплектической группе Sp_{2s_i+1} в зависимости от того, целый или полуцелый спин s_i, получаем Сеньорити-классификацию термов;

3) проводим дальнейшее разложение на группе R_3, получаем спиновые состояния комплекса с данным Сеньорити-числом;

Таблица 1

Сеньорити-классификация разрешенных термов триады одинаковых атомов

№	Спин атома	[3]			[21]				[1³]		
		A_2	A_1		E		E		A_1		A_2
		⟨3⟩	(3)	(1)	⟨21⟩	⟨1⟩	(21)	(1)	⟨1³⟩	⟨1⟩	(1³)
1	$1/2$	$3/2$				$1/2$					
2	1		3	1			2	1			0
3	$3/2$	$3/2$, $5/2$, $9/2$			$1/2$, $5/2$, $7/2$	$3/2$				$3/2$	
4	2		0, 3, 4, 6	2			1, 2, 3, 4, 5	2			1, 3
5	$5/2$	$3/2$, $5/2$, $1/2$, $9/2$, $11/2$, $15/2$			$1/2$, $3/2$, $5/2$, $(7/2)^2$, $9/2$, $11/2$, $13/2$	$5/2$			$3/2$ $9/2$	$5/2$	
6	3		1, 3, 4, 5, 6, 7, 9	3			1, 2^2, 3, 4^2, 5^2, 6, 7, 8	3			0, 2, 3, 4, 6
7	$7/2$	$3/2$, $5/2$, $7/2$, $(9/2)^2$, $11/2$, $13/2$, $15/2$, $17/2$, $21/2$			$1/2$, $3/2$, $(5/2)^2$, $(7/2)^2$, $(9/2)^2$, $(11/2)^2$, $(13/2)^2$, $15/2$, $17/2$, $19/2$	$7/2$			$3/2$, $5/2$, $9/2$, $11/2$, $15/2$	$7/2$	

Таблица 2

Сеньорити-классификация спин-тензоров различных рангов двухатомных спиновых операторов

№	Спин атома	R_{2s+1}								Sp_{2s+1}							
		Симметричный обмен					Антисимметричный обмен			Симметричный обмен					Антисимметричный обмен		
		(4)	$(22)^2$	(1111)	$(2)^2$	$(0)^2$	(31)	(211)	$(11)^2$	⟨4⟩	$\langle 22\rangle^2$	⟨1111⟩	$\langle 11\rangle^2$	$\langle 0\rangle^2$	⟨31⟩	⟨211⟩	$\langle 2\rangle^2$
1	$^1/_2$									2				0			1
2	1	4			2		3		1								
3	$^3/_2$									0, 2, 3, 4, 6	2, 4		2	0	1, 2, 3, 4, 5		1, 3
4	2	2, 4, 5, 6, 8	0, 2, 3, 4, 6	2	2, 4	0	$1, 2, 3^2, 4, 5^2, 6, 7$	1, 2, 3, 4, 5	1, 3								
5	$^5/_2$									$0, 2^2, 3, 4^2, 5, 6^2, 7, 8, 10$	$0, 2^2, 3, 4^2, 5, 6^2, 8$		2, 4	0	$1^2, 2^2, 3^3, 4^3, 5^3, 6^2, 7^2, 8, 9$	$1, 2, 3^2, 4, 5, 6, 7$	1, 3, 5
6	3	$0, 2, 3, 4^2, 5, 6^2, 7, 8^2, 9, 10, 12$	$0, 2^3 3, 4^3, 5^2, 6^2, 7, 8^2, 10$	0, 2, 3, 4, 6	2, 4, 6	0	$1^2, 2^2, 3^4, 4^3, 5^4, 6^3, 7^4, 8^2, 9^3, 10, 11$	$1^2, 2^2, 3^3, 4^3, 5^3, 6^2, 7^2, 8, 9$	1, 3, 5								
7	$^7/_2$									$0, 2^3, 3, 4^3, 5^2, 6^3, 7^2, 8^3, 9, 10^2, 11, 12, 14$	$0^2, 2^3, 3^2, 4^4, 5^2, 6^4, 7^2, 8^3, 9, 10^2, 12$	2, 4, 5, 8	2, 4, 6	0	$1^3, 2^3, 3^5, 4^5, 5^6, 6^5, 7^5, 8^4, 9^4, 10^2, 11^2, 12, 13$	$1^2, 2^2, 3^4, 4^3, 5^4, 6^3, 7^3, 8^2, 9^2, 10, 11$	1, 3, 5, 7

4) если точечная симметрия комплекса допускает не все перестановки атомов, а только некоторые, образующие подгруппу G группы π_N, то, разлагая $[\lambda]$ на подгруппе G, получаем орбитальные состояния комплекса.

Если применить описанную выше процедуру к триаде одинаковых атомов (равносторонний треугольник), каждый из которых находится в состоянии A^{2s+1}, $s={}^1/_2-{}^7/_2$, то соответствующие колонки таблиц I и II работы ([6]) примут вид, представленный в табл. 1. В табл. 1, например, в третьей колонке под № 7 (среди прочих) $({}^9/_2)^2$ означает термы $2A_2^{10}$, у которых Сеньорити-число характеризуется представлением симплектической подгруппы $\langle 3\rangle$.

Классификация многоатомных спиновых операторов проводится следующим образом:

1) берем произвольную схему Юнга $[\lambda]$ группы π_N;

2) если спин атома s_i целый (полуцелый), то, раскрывая представление R_{2s_i+1} (Sp_{2s_i+1}): $((0)+(11)+(2))\otimes[\lambda]$ $(\langle 0\rangle+\langle 11\rangle+\langle 2\rangle)\otimes[\lambda]$ по формуле плетизма суммы (([2], стр. 144) с ограничением, что схема Юнга $[\mu]$, по которой выполняется плетизм $(11)\otimes[\mu]$ $(\langle 2\rangle\otimes[\mu])$, должна иметь четное число клеток, получаем неприводимые представления R_{2s_i+1} (Sp_{2s_i+1}), по которым преобразуются спиновые операторы, т. е. Сеньорити-классификацию;

3) проводим дальнейшее разложение представлений группы R_{2s_i+1} (Sp_{2s_i+1}) на группе R_3, получаем тензорные ранги спиновых операторов с данным Сеньорити-числом;

4) разлагая $[\lambda]$ на группе G, получаем представления Γ орбитальной группы, по которым преобразуются спиновые операторы;

5) после этого надо запретить те операторы, у которых $D^{(k)}\times\Gamma$ не содержит единичного представления Γ_1.

В табл. 2 приведены ранги двухатомных спиновых тензорных операторов, имеющих данную Сеньорити-классификацию. В табл. 2, например, в одиннадцатой колонке под № 7 (среди прочих) 2^3, означает тот факт, что при спине атома $s={}^7/_2$ существует три двухатомных спиновых оператора ранга 2, характеризующих симметричный обмен, у которых Сеньорити-число классифицируется представлением симплектической группы $\langle 4\rangle$.

При конкретной классификации для разных спинов следует:

1) для $s={}^1/_2$ надо брать только одно Сеньорити-число $\langle 0\rangle$;

2) для $s=1$ все справедливо, но в стандартных символах $(31)=(3)$, $(11)=(1)$;

3) для $s={}^3/_2$ надо брать только одно Сеньорити-число $\langle 11\rangle$;

4) для $s=2$ все справедливо, но в стандартных символах $(1111)=(1)$, $(211)=(21)$;

5) для $s={}^5/_2$ все справедливо;

6) для $s=3$ все справедливо, но в стандартных символах $(1111)=(111)$;

7) для $s={}^7/_2$ все справедливо.

Приведенная классификация может быть легко обобщена на случай, когда не все атомы одинаковы. Обобщение же на случай орбитально-вырожденных атомов более сложно и требует специального рассмотрения.

Свердловский институт народного хозяйства
Институт металлургии
Уральского научного центра Академии наук СССР
Свердловск

Поступило
18 III 1974

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] *G. Racah*, Phys. Rev., v. 63, 367 (1943) (пер. в кн. И. Б. Левинсон, А. А. Никитин, Руководство по теоретическому вычислению интенсивностей линий в атомных спектрах, Л., 1962). [2] *Б. Джадд, Б. Вайборн*, Теория сложных атомных спектров, М., 1973. [3] *В. Ванагас*, Алгебраические методы в теории ядра, Вильнюс, 1971. [4] *Б. А. Мень*, Кандидатская диссертация, Свердловск, 1973. [5] *Б. А. Мень, А. Н. Мень, В. И. Черепанов*, ДАН, т. 209, 333 (1973). [6] *B. A. Men, V. I. Cherepanov, A. N. Men*, Intern. J. Quant. Chem., v. 7, 739 (1973).