Парное описание взаимодействия элементарных частиц

описывает их волновую функцию

Якубовский Е.Г.

e-mail salosinevgeniy@rambler.ru

Я уже описал траектории небесных тел с помощью парного взаимодействия см. [1]. Теперь надо реализовать эту идею для многомерного взаимодействия элементарных частиц. Взаимодействие двух тел описано в случае гравитационного поля и описания электрона в атоме. Но в случае одинакового знака взаимодействующих тел собственная энергия не вычислена, хотя в атоме взаимодействие электронов имеет вполне определенное значение. Значит надо развивать теорию взаимодействия одинаково заряженных частиц. Это надо делать с мнимым эксцентриситетом.

Начну с суммирования импульса и получения волновой функции суммы. Имеем собственное значение импульса

$$p_{kn}\psi_{kn} = -i\hbar\frac{\partial\psi_{kn}}{\partial x_k} \qquad (1)$$

Расписывая это уравнение для действительной и мнимой части волновой функции разбиваем его на два формальных в рамках действительного импульса и координаты

$$p_{kn}Re\psi_{kn} = \hbar\frac{\partial Im\psi_{kn}}{\partial x_k}$$

$$p_{kn}Im\psi_{kn} = -\hbar\frac{\partial Re\psi_{kn}}{\partial x_k} \qquad (2)$$

Умножаю первую формулу (2) на величину $Re\psi_{kn}$ а вторую на $Im\psi_{kn}$ и суммирую по индексу состояния n, получаю

$$P_k \sum_{n=1}^{N} (Re\psi_{kn})^2 = \sum_{n=1}^{N} p_{kn}(Re\psi_{kn})^2 = \hbar \sum_{\boldsymbol{n=1}}^{\boldsymbol{N}} \frac{\boldsymbol{\partial Im\psi_{kn}}}{\boldsymbol{\partial x_k}} Re\psi_{kn}$$

$$P_k \sum_{n=1}^{N} (Im\psi_{kn})^2 = \sum_{n=1}^{N} p_{kn}(Im\psi_{kn})^2 = -\hbar \sum_{\boldsymbol{n=1}}^{\boldsymbol{N}} \frac{\boldsymbol{\partial Re\psi_{kn}}}{\boldsymbol{\partial x_k}} Im\psi_{kn}$$

Вычитаем эти два уравнения, получаем

$$P_k \sum_{n=1}^{N} Re(\psi_{kn}^2) = \sum_{n=1}^{N} p_{kn} Re(\psi_{kn}^2) = \hbar \frac{\boldsymbol{\partial \sum_{n=1}^{N} Re\psi_{kn} Im\psi_{kn}}}{\boldsymbol{\partial x_k}} \qquad \textbf{(3)}$$

Получаем формулу для суммарного импульса и энергии

$$P_k = \frac{\int \sum_{n=1}^{N} p_{kn} Re(\psi_{kn}^2)\, d^3x}{\int \sum_{n=1}^{N} Re(\psi_{kn}^2)\, d^3x}$$

Разделим уравнение (3) на величину $\sum_{n=1}^{N} \boldsymbol{Re}\psi_{kn} Im\psi_{kn}$ где мнимая часть волновой функции не равна нулю

$$P_k = \frac{\sum_{n=1}^{N} p_{kn} Re(\psi_{kn}^2)}{\sum_{n=1}^{N} Re(\psi_{kn}^2)} = \hbar \frac{\boldsymbol{\partial ln\psi_\Sigma}}{\boldsymbol{\partial x_k}}; \boldsymbol{\psi_\Sigma} = \sum_{n=1}^{N} \boldsymbol{Re}\psi_{kn} Im\psi_{kn}$$

$$= \sum_{n=1}^{N} \boldsymbol{Im}(\psi_{kn}^2)\,/2$$

Или формулу

$$P_k \boldsymbol{\psi_\Sigma} = \frac{\sum_{n=1}^{N} p_{kn} Re(\psi_{kn}^2)}{\sum_{n=1}^{N} Re(\psi_{kn}^2)} \boldsymbol{\psi_\Sigma} = \hbar \frac{\boldsymbol{\partial \psi_\Sigma}}{\boldsymbol{\partial x_k}}; \boldsymbol{\psi_\Sigma} = \sum_{n=1}^{N} \boldsymbol{Im}(\psi_{kn}^2)/2$$

Представим это уравнение в виде определения суммарного, локального импульса

$$P_k = \frac{\sum_{n=1}^{N} p_{kn} Re(\psi_{kn}^2)}{\sum_{n=1}^{N} Re(\psi_{kn}^2)} = \hbar \frac{\boldsymbol{\partial} \ln\,[\sum_{n=1}^{N} \boldsymbol{Im}(\psi_{kn}^2)/2]}{\boldsymbol{\partial x_k}};$$

Умножаем первую формулу (2) на величину $\mathrm{Im}\psi_{kn}$ а вторую на $Re\psi_{kn}$ и суммирую по индексу состояния n, получаем

$$P_k \sum_{n=1}^{N} Re\psi_{kn} Im\psi_{kn} = \sum_{n=1}^{N} p_{kn} Re\psi_{kn} Im\psi_{kn} = \hbar \sum_{\boldsymbol{n=1}}^{\boldsymbol{N}} \frac{\partial Im\psi_{kn}}{\boldsymbol{\partial x_k}} \boldsymbol{Im}\psi_{kn}$$

$$P_k \sum_{n=1}^{N} Re\psi_{kn} Im\psi_{kn} = \sum_{n=1}^{N} p_{kn} Re\psi_{kn} Im\psi_{kn} = -\hbar \sum_{\boldsymbol{n=1}}^{\boldsymbol{N}} \frac{\boldsymbol{\partial Re}\psi_{kn}}{\boldsymbol{\partial x_k}} Re\psi_{kn}$$

Сложим эти два уравнения, еполучим

$$P_k \sum_{n=1}^{N} Im(\psi_{kn}^2) = \sum_{n=1}^{N} p_{kn} Im(\psi_{kn}^2) = -\hbar \frac{\boldsymbol{\partial} \sum_{n=1}^{N} Re(\psi_{kn}^2)/2}{\boldsymbol{\partial x_k}} \qquad \textbf{(4)}$$

Сложим уравнения (3) и (4), получим

$$P_k \sum_{n=1}^{N} |\psi_{kn}|^2 = \sum_{n=1}^{N} p_{kn} |\psi_{kn}|^2 = -\hbar \frac{\boldsymbol{\partial} \sum_{n=1}^{N} [Re(\psi_{kn}^2) - Im(\psi_{kn}^2)]/2}{\boldsymbol{\partial x_k}} \qquad \textbf{(5)}$$

Вычтем из уравнения (4) уравнение (3), получим

$$P_k \sum_{n=1}^{N} [Re(\psi_{kn}^2) - Im(\psi_{kn}^2)] = \sum_{n=1}^{N} p_{kn} [Re(\psi_{kn}^2) - Im(\psi_{kn}^2)] =$$

$$= -\hbar \frac{\boldsymbol{\partial} \sum_{n=1}^{N} |\psi_{kn}|^2/2}{\boldsymbol{\partial x_k}} \qquad \textbf{(6)}$$

Продифференцируем уравнение (6) по координате и подставим значение (5), получим

$$P_k^2 \sum_{n=1}^{N} |\psi_{kn}|^2 = P_k \sum_{n=1}^{N} p_{kn} |\psi_{kn}|^2 = \hbar^{\boldsymbol{2}} \frac{\boldsymbol{\partial^2} \sum_{n=1}^{N} |\psi_{kn}|^2/2}{\boldsymbol{\partial x_k^2}}$$

Откуда получаем глобальное значение импульса

$$P_k = \frac{\int \sum_{n=1}^{N} p_{kn} |\psi_{kn}|^2 \, d^3x}{\int \sum_{n=1}^{N} |\psi_{kn}|^2 \, d^3x} = \hbar \sqrt{\frac{\int \frac{\boldsymbol{\partial^2} \sum_{n=1}^{N} |\psi_{kn}|^2/2}{\boldsymbol{\partial x_k^2}} d^3x}{\int \sum_{n=1}^{N} |\psi_{kn}|^2 \, d^3x}}$$

Локальное значение импульса определяется по формуле

$$P_k = \frac{\sum_{n=1}^{N} p_{kn} |\psi_{kn}|^2}{\sum_{n=1}^{N} |\psi_{kn}|^2}; P_k = \hbar \sqrt{\frac{\boldsymbol{\partial^2} \sum_{n=1}^{N} |\psi_{kn}|^2/2}{\sum_{n=1}^{N} |\psi_{kn}|^2 \, \boldsymbol{\partial x_k^2}}}$$

Отмечу, что собственные значения получаются действительными в отличии от существующих формул для импульса (1), когда при действительных волновых функциях $R_{nl}(r)P_l(cos\theta)$ импульс мнимый, и только число Рейнольдса действительное. Причем действительное решение ламинарное, а получаются мнимые значения импульса и мнимая скорость.

Но я пользуюсь обратными функциями, в частности действительными волновыми функциями, и для них эти формулы выглядят таким образом. Умножаю формулу (1) на величину ψ_{kn} и суммирую по индексу состояния n, получаю

$$P_k \sum_{n=1}^{N} \boldsymbol{\psi_{kn}^2} = \sum_{n=1}^{N} p_{kn} \boldsymbol{\psi_{kn}^2} = -\boldsymbol{i}\hbar \frac{\boldsymbol{\partial} \sum_{n=1}^{N} \frac{\boldsymbol{\psi_{kn}^2}}{2}}{\boldsymbol{\partial x_k}}$$

Получаю определение среднего импульса и могу его вычислить по волновым функциям

$$P_k = \frac{\sum_{n=1}^{N} p_{kn}\psi_{kn}^2}{\sum_{n=1}^{N} \psi_{kn}^2} = -i\hbar \frac{\partial ln\sqrt{\sum_{n=1}^{N} \psi_{kn}^2}}{\partial x_k}$$

Эту формулу можно расписать для определения суммарной волновой функции и собственного значения суммарного импульса

$$P_k\sqrt{\sum_{n=1}^{N} \psi_{kn}^2} = \frac{\sum_{n=1}^{N} p_{kn}\psi_{kn}^2}{\sum_{n=1}^{N} \psi_{kn}^2}\sqrt{\sum_{n=1}^{N} \psi_{kn}^2} = -i\hbar \frac{\partial \sqrt{\sum_{n=1}^{N} \psi_{kn}^2}}{\partial x_k}$$

Аналогичную процедуру можно проделать с энергией, и моментом импульса

$$E_k = \frac{\sum_{n=1}^{N} E_{kn}\psi_{kn}^2}{\sum_{n=1}^{N} \psi_{kn}^2} = i\hbar \frac{\partial ln\sqrt{\sum_{n=1}^{N} \psi_{kn}^2}}{\partial t}$$

$$L_z = \frac{\sum_{n,m} l_{zn,m}\psi_{zn,m}^2}{\sum_{n,m} \psi_{zn,m}^2} = -i\frac{\partial ln\sqrt{\sum_{n,m} \psi_{zn,m}^2}}{\partial \varphi}; \psi_{zm} = P_n^m(cos\theta)exp(im\varphi)$$

$$L_\pm = \frac{\sum_{n,m} l_{\pm nm}\psi_{\pm nm}^2}{\sum_{n,m} \psi_{\pm nm}^2} = exp(\pm i\varphi)(\pm \frac{\partial ln \sum_{n,m} \psi_{\pm nm}^2}{\partial \theta} - icot\theta \frac{\partial ln \sum_{n,m} \psi_{\pm nm}^2}{\partial \varphi})$$

$$\psi_{n,m}(\theta,\varphi) = P_n^m(\theta,\varphi) \;\; \widehat{\boldsymbol{L^2}} = \hat{L}_-\hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hat{L}_z$$

Докажем возможность одновременно определять оба угла и операторы момента инерции. Оператор спина с целым индексом описывается шаровой функцией см. [3] §57. Собственная функция у них шаровая

$$l_{\pm} = \exp(\pm i\varphi)\left(\pm \frac{\partial lnP_l^m(\theta,\varphi)}{\partial\theta} - icot\theta \frac{\partial lnP_l^m(\theta,\varphi)}{\partial\varphi}\right)$$

$$= \exp(\pm i\varphi)\left(\pm \sum_k \frac{1}{x-\alpha_k} + \frac{mx}{\sqrt{1-x^2}}\right); x = cos\theta$$

$$\rightarrow l_{\pm} - \exp(\pm i\varphi)\,(\pm \sum_{k,k\neq p} \frac{1}{\alpha_p-\alpha_k} - \frac{m\alpha_p}{\sqrt{1-\alpha_p^2}}) = \frac{\exp(\pm i\varphi_{\pm})}{x-\alpha_p} = \left(l_{\pm} - l_p\right) =$$

$$= \frac{\exp(\pm i\varphi_{\pm})}{i\delta}; x-\alpha_p = i\delta; l_{\pm} = l_x \pm il_y$$

$$l_{\pm} - m_{\pm} = \frac{\exp(\pm i\varphi_{\pm})}{x-\alpha_p} = \left(l_{\pm} - l_p\right) = \frac{\exp(\pm i\varphi)}{i\delta};$$

$$\hbar\,(l_x - l_p)|cos\varphi_x|(\,x-\alpha_{px}) = \hbar|cos\varphi_x| > \hbar/2$$

$$\hbar\,(l_y - l_p)|sin\varphi_y|(\,x-\alpha_{py}) = \hbar|sin\varphi_y| > \hbar/2$$

Комплексные углы будут вычислены, и две проекции удовлетворяют соотношению неопределенности, так как синус и косинус комплексного угла больше 1

$$m_{\pm} = l_p = \exp(\pm i\varphi)\,(\pm \sum_{k,k\neq p} \frac{1}{\alpha_p-\alpha_k} + \frac{m_{\pm}\alpha_p}{\sqrt{1-\alpha_p^2}}); x = \alpha_p$$

Для компоненты z получаются действительные собственные значения $l_z = -i\frac{\partial lnP_l^m(\theta)exp(im\varphi)}{\partial\varphi} = m$ без всяких добавок. Если угол комплексный, то и проекция будет комплексная. В комплексном пространстве проекция комплексная, то получим возможно комплексные, разные значения угла φ для оси x и оси y. Причем комплексный угол меняется вдоль одного направления.

$$m_{\pm} = m_x \pm im_y = \exp(\pm i\varphi_{\pm}) \, (\pm \sum_{k,k\neq p} \frac{1}{\alpha_p - \alpha_k} + \frac{m_{\pm}\alpha_p}{\sqrt{1-\alpha_p^2}})$$

$$\cos(\varphi_x) = \frac{1}{\sum_{k,k\neq p} \frac{1}{m_x(\alpha_p - \alpha_k)} + \frac{\alpha_p}{\sqrt{1-\alpha_p^2}}}$$

$$\sin(\varphi_y) = \frac{1}{\sum_{k,k\neq p} \frac{1}{-m_y(\alpha_p - \alpha_k)} + \frac{\alpha_p}{\sqrt{1-\alpha_p^2}}}$$

Получается, что соотношение неопределенности выполняется для двух операторов момента импульса, для Z компоненты оно не выполняется, эта компонента вырожденная. Но в комплексном пространстве и Z компонента удовлетворяет соотношению неопределенности. Формулы почти одинаковые, только у оси x проекция положительная, а у оси y проекция отрицательная, или наоборот. Кроме того, в одной формуле используется косинус, а в другой синус. Выбираем наименьшее по модулю значение угла и считаем его периодом, тогда направление угла определится см. описание полуцелого спина.

Спин электрона также можно описать с помощью координатной функции с телесным углом, имеющим период 4π. Определение проекций момента импульса у спина надо описывать аналогично проекции момента импульса у орбитального квантового числа

$$S_z = \frac{\sum_{\boldsymbol{m}} s_{zm} \boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{zm}}^{\boldsymbol{2}}}{\sum_{\boldsymbol{m}} \boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{zm}}^{\boldsymbol{2}}} = -\boldsymbol{i} \frac{\partial ln\sqrt{\sum_m \psi_{zm}^2}}{\partial \Omega/2}; \psi_{zm} = P_n^m(cos\Phi/2) exp(im\Omega/2)$$

$$S_{\pm} = \frac{\sum_{\boldsymbol{n},\boldsymbol{m}} s_{\pm nm} \boldsymbol{\psi}_{\pm \boldsymbol{nm}}^{\boldsymbol{2}}}{\sum_{n,m} \boldsymbol{\psi}_{\pm \boldsymbol{nm}}^{\boldsymbol{2}}} = exp(\pm \boldsymbol{\Omega/2})(\pm \frac{\partial ln\sqrt{\sum_{n,m} \psi_{\pm nm}^2}}{\partial \Phi/2} - icot\Phi/2 \frac{\partial ln\sqrt{\sum_{n,m} \psi_{\pm nm}^2}}{\partial \Omega/2})$$

$$\psi_{n,m}(\Phi/2, \Omega/2) = P_n^m(\Phi/2, \Omega/2) \;\; \widehat{\boldsymbol{S}^{\boldsymbol{2}}} = \hat{S}_- \hat{S}_+ + \hat{S}_z^2 + \hat{S}_z$$

Для произвольной проекции спина и орбитального момента используются сферические проекции $\frac{\Omega_m}{\alpha} = \pm 2\pi m; 0 \leq \frac{\Phi_n}{\alpha} \leq \pi; -N \leq m \leq N$. Где угол Ω_n

имеет период $2\pi\alpha$, а угол $0 \leq \Phi_n \leq \pi\alpha$ изменяется на полупериоде. Для орбитального момента импульса $\alpha = 1$, а для спина фермиона $\alpha = 2$. В комплексном пространстве все три проекции орбитального момента могут существовать одновременно. В комплексном пространстве период может быть комплексный, и угол изменяется вдоль периода. Но соотношения неопределенности выполняются и для целого и полуцелого спина см. [2] и для комплексного угла, где мнимая часть – это среднеквадратичное отклонение.

Углы должны быть комплексные для удовлетворения соотношению неопределенности, если все углы действительные, то справедливы соотношения классической квантовой механики.

Где можно применить данную теорию. При вычислении энергии многоэлектронного атома. Тогда волновая функция состоит из Z волновых функций взаимодействия электрона с ядром и Z-1 функция взаимодействия между собой

$$E_k = \frac{E_n Z R_{nl}^2 + e_k (Z-1)\mathfrak{R}_{kl}^2}{Z R_{nl}^2 + (Z-1)\mathfrak{R}_{kl}^2} = i\hbar \frac{\partial ln\sqrt{Z R_{nl}^2 + (Z-1)\mathfrak{R}_{kl}^2}}{\partial t}$$

$$E_n = -\frac{Z^2 m_e c^2}{2 \cdot 137^2 n^2}; e_k = \frac{\hbar^2 k^2}{m_e} = \frac{\pi^2 J(J+1) m_e c^2}{137^2}; k = \frac{2\pi}{a_0}$$

Но величина J у электронов неизвестная.

Пытаемся определить энергию одного электрона в атоме по точным формулам,

$$E_k \int_0^\infty \sum_{n=1}^{N} \psi_{kn}^2 r^2 dr = \int_0^\infty \sum_{n=1}^{N} E_n \psi_{kn}^2 r^2 dr$$

$$E_{nZ} = \frac{\int_0^\infty [E_n Z R_{nl}^2 + e_k (Z-1)\mathfrak{R}_{kl}^2] r^2 dr}{\int_0^\infty [Z R_{nl}^2 + (Z-1)\mathfrak{R}_{kl}^2] r^2 dr}$$

$$= -\frac{m_e c^2}{137^2}\left[\frac{Z^3}{2n^2} - \frac{(Z-1)J(J+1)\pi^2}{16n^2}\right] / (2Z-1)$$

$$E_n = -\frac{Z^2 m_e c^2}{2\cdot 137^2 n^2}; e_k = \frac{\hbar^2 k^2}{m_e} = \frac{\pi^2 J(J+1) m_e c^2}{16 n^2 \cdot 137^2}; k = \frac{\pi}{2 n a_0} \quad (1)$$

Но дело в том, что при суммарном квантовом взаимодействии одинаково заряженных частиц величина J неизвестная, и может оказаться комплексной, что для взаимодействия электронов является правильным. Действительная положительная энергия электронов приведет к неизвестной энергии взаимодействия электронов, принимающей произвольное значение, что для атома невозможно. Или к расталкиванию электронов как классических частиц, и удалению одной из них на бесконечность. Поэтому парная энергия взаимодействия электронов между собой должна быть комплексная, тогда эксцентриситет будет комплексный и имеем конечный радиус орбиты взаимодействия. Простейший комплексный эксцентриситет с положительной действительной частью имеет вид

$$\varepsilon = \sqrt{1 + \frac{(L_{eff}+1)(L_{eff}+2)}{n^2}} = \sqrt{1 + \frac{(L+1)(L+2) + iS(S+1)\alpha^{\frac{L_{eff}!}{2}}}{4n^2}} =$$

$$= \sqrt{1 + \frac{2EM^2}{m_e e^4}} = \sqrt{1 + \frac{2E\hbar^2 (L+1)(L+2)}{m_e e^4}}; \alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$$

Орбитальный момент увеличился на 1 из-за пропорциональности волновой функции радиусу. Действительный физический смысл эффективного орбитального квантового числа равен

$$(L_{eff}+1)(L_{eff}+2) = (L+1)(L+2) + i(S+1)(S+2)\alpha^{\frac{L_{eff}!}{2}} sin\omega t =$$

$$= (L+1)(L+2) \pm i(S+1)(S+2)\alpha^{\frac{L_{eff}!}{2}} < \sqrt{\frac{1 - cos2\omega t}{2}} >$$

Эффективный орбитальный момент равен

$$L_{eff} = -1{,}5 + \sqrt{0.25 + (L+1)(L+2) \pm i(S+1)(S+2)\alpha^{\frac{L_{eff}!}{2}} 0.637}$$

При этом волновая функция зависит от энергии по закону с действительной постоянной Планка с положительной действительной частью

$$\psi = \exp\left(\frac{Et}{\hbar}\right) R_{n(L+1)S}(\boldsymbol{r})$$

Причем растущая экспонента при нормировке пропадает. Действительная энергия взаимодействия положительно заряженной частицы равняется (используется половина массы частицы)

$$e_{n(L+1)S} = \frac{m_e e^4}{16\hbar^2 n^2}\frac{(L_{eff}+1)\left(L_{eff}+2\right)}{(L+1)(L+2)} =$$

$$= \frac{m_e e^4}{16\hbar^2 n^2}\left[1 \pm i\frac{(S+1)(S+2)[0.26+(S+7)(S+8)]}{(L+1)(L+2)}\alpha^{\frac{L_{eff}!}{2}} \cdot \cdot < \sqrt{\frac{1-cos2\omega t}{2}} > \right]$$

Данная формула аппроксимирует формулу для атома гелия, которая определяется по правилу Лопиталя при суммарном нулевом спине и орбитальном моменте. Итого получается равенство энергии Z электронов величине

$$E_k \int_0^\infty \sum_{n=1}^{N} \psi_{kn}^2 r^2 dr = Z \int_0^\infty \sum_{n=1}^{N} E_n \psi_{kn}^2 r^2 dr$$

$$E_{nZ} = Z\frac{\int_0^\infty [E_n Z R_{nl}^2 + e_k(Z-1)\mathfrak{R}_{kl}^2] r^2 dr}{\int_0^\infty [Z R_{nl}^2 + (Z-1)\mathfrak{R}_{kl}^2] r^2 dr} =$$

$$= -\frac{m_e c^2}{137^2}\left[\frac{Z^4}{2n^2} - \frac{Z(Z-1)}{16n^2}\left[1 \pm i\frac{(S+1)(S+2)}{(L+1)(L+2)}\alpha^{\frac{L_{eff}!}{2}} 0.637\right]\right] / (2Z-1)$$

Формула имеет асимптотику при большой величине заряда

$$E_{nZ} = -\frac{m_e c^2}{137^2}\frac{Z^4}{2n^2(2Z-1)}[1 + O\left(\frac{1}{8Z^2}\right)]$$

Дополнительное деление члена на 4 ответственного за вклад электронов взаимодействовать между собой получается из-за квадрата обратной пропорциональности от радиуса Бора с приведенной массой см. формулу (1).

Получается полная энергия атома гелия равна $E_{nLS} = -2.623\,\text{ат. ед.}$ при экспериментальном значении $E_{nLS} = -2.901\,\text{ат. ед.}$ На самом деле аппроксимация модуля орбитального момента $(L+1)(L+2)$ это приближение и имеется особенность 0/0, в результате которой получается большая мнимая часть $i\frac{S(S+1)}{L(L+1)} = (0.26 + 7 \cdot 8)i$ и тогда $|E_{nLS}| = -|2.492 + 1.485i| = -2.901\,\text{ат. ед.}$ В формуле вычислен предел по правилу Лопиталя для атома гелия, которая как я надеюсь будет справедлива и в общем случае. Предел отношения спиновой проекции и орбитальной определяется множителем у модуля спина.

$$E_{nLS} = -\frac{m_e c^2}{137^2}\left[\begin{array}{c}\frac{Z^4}{2n^2} - \frac{Z(Z-1)}{16n^2} \times \\ \times \left[1 + i\frac{(S+1)(S+2)[0.26 + (S+7)(S+8)]}{(L+1)(L+2)}\alpha^{\frac{L_{eff}!}{2}} 0.637\right]\end{array}\right]$$

$$= -2.492 + 1.485i$$

Приведу вычисленную полную энергию атома. Значений экспериментальных данных об этих значениях полной энергии атомов я не нашел в интернете

Z	1	2	3	4	5	6	7	8	9
E	-0.5	-2.901	-2.258	-4.596	-8.639	-14.66	-21.	-34.08	-48.13
Z	10	11	12	13	14	15	16	17	18
E	-65.53	-38.32	-49.94	-63.41	-78.97	-92.96	-117.4	-140.5	-166.5

В [1] независимым способом вычислен спектр атомов в атомных единицах. Выведенные на печать данные прилагаю

$E =$

1	−0.5
2	−2.901
3	−2.796
4	−5.387
5	−7.962
6	−13.012
7	−21.287
8	−33.537
9	−50.512
10	−72.963
11	−38.757
12	−51.941
13	−62.638
14	−76.553
15	−94.019
16	−115.369
17	−140.938
18	−171.058

Имеется совпадение по порядку величины значений 1, 2, 3 периода с точностью 5%. Какой-то из алгоритмов врет. Скорее на одном участке правилен один алгоритм, а на другом другой алгоритм.

Литература

1. Салосин Е.Г. Вычисление энергии многоэлектронного атома, учитывая взаимодействие электронов между собой «Энциклопедический фонд России», 2022, 11 стр. http://russika.ru/userfiles/1691_1676914349.pdf