

ИНСТИТУТ ФИЗИКИ АКАДЕМИИ НАУК ЛИТОВСКОЙ ССР
ОТДЕЛ ТЕОРИИ АТОМА

На правах рукописи

Гайгалас Гедиминас Альгирдович

ТЕНЗОРНАЯ ФОРМА РЯДА СТАЦИОНАРНОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ
ПРИМЕНИТЕЛЬНО К АТОМАМ И ИОНАМ С НЕЗАПОЛНЕННЫМИ
ОБОЛОЧКАМИ

01.04.02 – теоретическая и математическая физика

Д и с с е р т а ц и я

на соискание ученой степени кандидата
физико-математических наук

Научный руководитель:
Заслуженный деятель науки ЛитССР,
член-корр. АН ЛитССР, доктор
физико-математических наук,
профессор

З.Б.Рудзикас

Вильнюс – 1989

О Г Л А В Л Е Н И Е

ВВЕДЕНИЕ ..	3
1. Формальные методы стационарной теории возмущений в атомах	17
2. Расширенная графическая техника теории момента количества движения и вторичное квантование [57]	28
3. Графическое изображение одночастичных и двухчастичных неприводимых тензорных операторов и диаграммные методы определения их матричных элементов [58-60]	42
4. Графический аналог теоремы Вика [57,61-63]	61
5. Графический вид эффективного гамильтониана атома в первых двух порядках стационарной теории возмущений [60,64-67]	74
6. Неприводимый тензорный вид оператора [60,66] ...	91
7. Спин-угловая часть эффективного гамильтониана атома в пространстве двух и трех незаполненных оболочек [60,68-69]	102
8. Неприводимый тензорный вид двухэлектронных и трехэлектронных операторов и их субматричные элементы [69]	115
9. Краткое описание системы программ для расчета энергетического спектра эффективного гамильтониана атома [70]	135
10. Применение метода эффективных операторов для теоретического исследования энергетических спектров изоэлектронной последовательности углерода [71]	145
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	156
ЛИТЕРАТУРА	158
ПРИЛОЖЕНИЕ	176

В В Е Д Е Н И Е

Актуальность темы. Перед теоретической атомной спектроскопией стоит задача разработки универсальных методов описания структуры и свойств многоэлектронных атомов и ионов. Эффективность этих методов определяется полнотой учета релятивистских и корреляционных эффектов. Существует целый ряд методов учета корреляционных эффектов в многоэлектронных атомах и ионах: различные варианты теории возмущений [1-5], метод наложения конфигураций [6, 7], метод случайных фаз с обменом (обычно применяется в случае заполненных или полузаполненных оболочек эквивалентных электронов [8], хотя и делаются попытки его применения для незаполненных атомных оболочек [9]), метод неполного разделения переменных (разработанна методика для двухвалентных атомов [10], а позже и для большего числа электронов [11]), многоконфигурационное приближение (уравнения Хартри-Фока-Юциса [12], упрощенные уравнения Хартри-Фока-Юциса [13]), разработаны методы учета релятивистских эффектов [6, 14]). Краткий сравнительный анализ этих методов можно найти, например в [6, 7], здесь же отметим, что только первые два метода — суперпозиция конфигураций и теория возмущений — применяются в настоящее время с целью учета корреляционных эффектов при массовых расчетах спектральных характеристик атомов и ионов.

Метод суперпозиции конфигураций является асимптотически точным, однако слабая сходимость, отсутствие точных критериев выбора из большого числа возможных конфигураций наиболее важных, а также технические трудности, быстро возрастающие при расширении базиса, значительно ограничивают возможности его применения [15-17].

В рамках теории возмущений (ТВ) корреляционные эффекты можно учесть достаточно последовательно, однако практическое применение методов ТВ в атомной спектроскопии до настоящего времени в основном ограничивается расчетом спектральных характеристик только легких атомов [4] и высокозарядных ионов с числом электронов $N \leq 10$ [1].

Значительная часть расчетов атомных характеристик методом ТВ выполняется либо с конечным базисом одноэлектронных функций [18,19], либо с полным базисом водородоподобных функций [4]. Полный базис хартри-фоковских функций используется только к атомам и ионам с заполненными оболочками или с одним (двумя) электронами сверх заполненных. В этой области следует отметить работы, выполняемые в Ленинграде [20], в Новосибирске [21] и в Лунде [22,23].

Одна из основных трудностей применения методов ТВ для исследования более сложных атомных систем состоит в том, что в теории многоэлектронных атомов в качестве базиса обычно используются волновые функции, определенные в приближении центрального поля. Энергетические уровни отдельного электрона, движущегося в центральном поле, вырождены по проекциям орбитального и спинового моментов количества движения. Это, в свою очередь, приводит в случае незаполненных оболочек к очень высокой степени вырождения многоэлектронной задачи в нулевом приближении, а, как известно [24], формулировка ТВ для вырожденных состояний значительно сложнее, чем в невырожденном случае.

Кроме того, для атомов с незаполненными оболочками в каждом следующем порядке ТВ значительно усложняется процедура расчета спин-угловых частей членов разложения ряда ТВ [25]. Методы же расчета таких величин в ТВ (в отличие от обычного мате-

матического аппарата теории атомных спектров) развиты еще недостаточно.

Необходимо отметить, что специфика атома в значительной мере учитывалась в работах по применению полевой (нестационарной) формы ТВ в атомной спектроскопии [1,26-28]. Именно в рамках этого метода были проведены массовые расчеты спектральных характеристик высокозарядных ионов, принадлежащих изоэлектронным последовательностям легких элементов [4,29], получены различные релятивистские обобщения, позволяющие учесть тонкие квантовоэлектродинамические эффекты [5,30], и т.д.

Полевая форма ТВ обычно формулируется в терминах матрицы рассеяния - S - матрицы, а искомые величины (сдвиги энергии, например) определяются несколько другим путем - с помощью некоторого предельного перехода (адиабатическая формула Гелл-Мана и Лоу [31]) и многократных интегрирований по временным переменным [32]. Более прямым и естественным подходом к проблеме определения стационарных состояний системы многих тел в квантовой механике являются методы стационарной ТВ. Более же широкое применение до настоящего времени полевой формы ТВ обусловлено тем, что именно в нестационарной ТВ был развит ряд эффективных методов (диаграммная техника, разложение по связным диаграммам и т.д.), позволяющих учитывать более высокие порядки ТВ, а некоторые типы диаграмм - полностью просуммировать.

Однако в последние десятилетия соответствующие методы были развиты и в рамках ТВ Рэлея-Шредингера [2,33-35], поэтому в настоящее время применению методов стационарной теории возмущений к различным проблемам квантовой теории ядер, атомов и молекул уделяется все больше внимания. Среди них особо следует

отметить методы эффективных операторов [36]. Так, при исследовании энергетических спектров систем с незаполненными оболочками именно разложение эффективного гамильтониана в ряд Рэлея-Шредингера оказалось очень плодотворным [37]. Такое разложение может производиться разными методами теории многих тел [1,38], при этом обычно привлекается графическое представление членов ряда ТВ (диаграммы Фейнмана, Гугенгольца).

Для систем с незаполненными оболочками, кроме проблем, возникающих при построении ряда ТВ по связным диаграммам [33], уже во втором порядке появляются дополнительные трудности, обусловленные громоздкостью расчета спин-угловых частей членов разложения. В работе [39] было показано, что в приближении центрального поля диаграммы Фейнмана топологически эквивалентны диаграммам теории момента количества движения. Последнее обстоятельство позволяет применять графические методы теории момента количества движения [40], что в значительной степени облегчает нахождение оптимальных выражений и расчет спин-угловых частей ряда ТВ.

В ранних работах [41-43] по применению графической техники теории момента количества движения для графического представления многоэлектронных матричных элементов членов ряда ТВ использовались диаграммы обобщенных коэффициентов Клебба-Гордана (К.-Г.) [41,42], которые в работах [43,44] были дополнены графическим изображением генеалогических коэффициентов. В более поздних работах [34,45,46] рассматривалось представление спин-угловых частей диаграмм Фейнмана через матричные элементы неприводимых тензорных операторов. Следует заметить, что в этих работах обычно графически изображаются

либо субматричные элементы эффективного оператора, либо его отдельные члены, представляющие операторы, действующие на одноэлектронные или двухэлектронные состояния. Однако при изучении операторного ряда эффективного гамильтониана для атомов с незаполненными оболочками более удобно иметь графический вид самого многоэлектронного оператора, а не его матричного элемента. При этом целесообразно также представить изучаемые операторы в неприводимом тензорном виде.

В последние годы в теории многих тел широкое применение получил метод вторичного квантования [45,47,48]. Для атомных систем в таком подходе важную роль играют неприводимые тензорные свойства операторов рождения и уничтожения электронов, позволяющие просуммировать сложные операторные выражения по проекциям момента количества движения отдельных электронов и тем самым представить их через неприводимые тензоры [45,48]. Такой же подход находит все большее применение и в стационарной теории возмущений для атомных систем [2]. Применение метода вторичного квантования в неприводимом тензорном виде вызывает необходимость развития соответствующей этому методу графической техники момента количества движения, так как использование графической техники существенно упрощает проведение различных алгебраических выкладок и вычислений. Однако наиболее эффективно эти преимущества удастся использовать только в том случае, когда графический метод полностью учитывает особенности тех величин теории, для изучения свойств которых он применяется.

Так, широко известный графический метод [49], основанный на использовании коэффициентов Вигнера, наиболее полно отражает как свойства симметрии этих коэффициентов, так и их сумм (3-х коэффициентов). Однако ввиду того, что исходными величинами

теории момента количества движения являются коэффициенты Клебша-Гордана и их суммы (матрицы преобразования), поэтому при использовании графической техники [49] уже на первых этапах расчета помимо диаграмм появляются дополнительные весовые и фазовые множители, значительно усложняющие выкладки. Именно это обстоятельство стало главной причиной создания графического метода, основанного на использовании коэффициентов Клебша-Гордана [40]. Поскольку главными объектами этого метода являются обобщенные коэффициенты Клебша-Гордана и матрицы преобразования, то преимущества графической техники Юциса и Бандзайтиса [40] проявляются в полной мере именно при рассмотрении этих величин. Графические методы [40,49] формулируются вне зависимости друг от друга и являются полностью самостоятельными. Существует возможность перехода от диаграмм Юциса и Бандзайтиса к диаграммам Юциса, Левинсона и Ванагаса, однако в общем случае такой переход достаточно сложен, так как требует формулировки целого ряда дополнительных правил [50,51].

За последние годы круг задач, в которых применяются математические методы теории момента количества движения, значительно возрос, что, в свою очередь, потребовало соответствующего расширения возможностей графической техники. С этой целью было предложено несколько различных модификаций графического метода [43,52-56], причем некоторые из них могут быть использованы и для случая непрерывных переменных [54,55].

Однако ни один из вышеизложенных методов не может быть перенесен непосредственно на вторичноквантованные операторы ввиду необходимости учета известных антикоммутиационных соотношений между ними. Ввиду этого актуальной является задача такого

расширения графической техники теории момента количества движения, которое учитывало бы особенности метода вторичного квантования в неприводимом тензорном виде.

Из всего вышеизложенного следует, что для успешного применения ТВ в атомной спектроскопии необходимо дальнейшее развитие методов ТВ с учетом всех тех специфических особенностей, которые имеют место в теории сложных атомов и ионов.

Цель работы. Разработать графическую технику, объединяющую методы теории момента количества движения с теоретико-полевыми методами исследования многоэлектронных систем. Используя эту технику, создать методику, позволяющую находить разложение эффективных операторов в ряд ТВ. Найти разложения эффективного гамильтониана атома во втором порядке стационарной ТВ по неприводимым тензорным операторам. На основе предложенной методики разработать алгоритм и создать комплекс программ, позволяющий рассчитывать энергетический спектр атомов и ионов с учетом корреляционных поправок по кулоновскому взаимодействию до второго порядка, а также опробовать его в конкретных расчетах.

Научная новизна. На основе формализма вторичного квантования разработан общий графический метод построения диаграмм для неприводимых тензорных операторов. Определен графический аналог теоремы Вика для операторов, представленных неприводимыми тензорными произведениями. Сформулированы правила, позволяющие получить только топологически неэквивалентные диаграммы с соответствующим топологическим множителем в операторном разложении. В развиваемом формализме описана рекуррентная процедура построения диаграмм, дающих только ненулевые вклады в вакуумные средние операторных выражений.

На основе предложенной методики впервые разработана техника построения ряда ТВ, в которой отдельные члены (диаграммы) представляют собой многоэлектронные операторы, действующие только в пространстве волновых функций незаполненных оболочек, и не зависят явно от одноэлектронных магнитных квантовых чисел.

Впервые получены замкнутые операторные выражения для $H_{эф}^{(2)}$ в случае неограниченного числа незаполненных оболочек, причем соответствующие матричные элементы определены в формализме квазиспина в случае трех незаполненных оболочек.

Научная и практическая ценность работы. Разработанная в диссертации графическая техника позволяет сформулировать простой диаграммный метод преобразования сложных тензорных произведений операторов вторичного квантования. Применяя эту методику, получен эффективный гамильтониан атома $H_{эф}$ в связанном тензорном виде до второго порядка ТВ включительно. Предложенный в диссертации вид $H_{эф}^{(2)}$ удобен в практических расчетах энергетических спектров атомов и ионов, так как матричные элементы соответствующих операторов в случае сложных электронных конфигураций, содержащих несколько незаполненных оболочек, выражаются через стандартные величины теории атома.

Изученный случай модельного пространства, определенного на волновых функциях, характеризуемых квантовыми числами трех незаполненных оболочек $n_1 l_1^{N_1} n_2 l_2^{N_2} n_3 l_3^{N_3}$ со всевозможными распределениями чисел электронов между оболочками, охватывает практически почти все встречаемые конфигурации.

В диссертации применяется методика квазиспина, причем спин-угловые части нерелятивистского эффективного гамильтониана вы-

ражены через неприводимые тензорные произведения тройных тензоров $\alpha^{(q\ell s)}$ и $W_{(\ell)}^{(k_1 k_2 k_3)}$, действующих в пространстве состояний оболочки эквивалентных электронов. Это позволяет всю зависимость матричного элемента от числа электронов N в оболочке выделить в виде коэффициента Клебша-Гордана и тем самым значительно уменьшить объем таблиц стандартных величин. В полученных соотношениях выделены операторы \hat{N} , \vec{L} , \vec{S} , $Q^{(k)}$, субматричные элементы которых имеют простые алгебраические выражения. Найденные выражения для спин-угловых частей членов ряда ТВ, характеризующихся диаграммами с двумя, четырьмя и шестью свободными концами, также могут быть отправным пунктом для полуэмпирических исследований энергетического спектра эффективного гамильтониана атома, так как в нашем подходе легко классифицировать члены ряда, имеющие одинаковую спин-угловую структуру, а их радиальную часть можно рассматривать как полуэмпирические параметры.

Разработанные на этой основе алгоритмы и составленный комплекс программ позволяют рассчитывать энергетические спектры атомов и ионов с незаполненными оболочками с учетом корреляционных поправок по кулоновскому взаимодействию до второго порядка включительно.

Основные положения, выдвигаемые на защиту.

I. Объединение алгебраической техники теоретико-полевых методов с обобщенной графической техникой теории момента количества движения и с математическим аппаратом неприводимых тензорных операторов в связанной форме приводит в случае атомов с несколькими незаполненными оболочками к такому виду ряда стационарной ТВ, в котором вклады диаграмм, представляющих операторы, просуммированы по проекциям орбитального и спинового моментов.

2. Использование развитой методики для эффективного гамильтониана атома во втором порядке ТВ приводит к компактным выражениям и позволяет выделить явную зависимость их матричных элементов от числа электронов.

3. Универсальный автоматизированный комплекс программ позволяет рассчитать спин-угловые части эффективного гамильтониана атома во втором порядке ТВ для атомов с несколькими незаполненными оболочками.

Апробация работы. Результаты данной работы по мере их получения постоянно обсуждались на семинарах физиков-теоретиков Института физики АН ЛитССР, а также докладывались на следующих конференциях:

1. VI Республиканская конференция молодых ученых по спектроскопии и квантовой электронике, Паланга, 1983.
2. 42-ая научная конференция ЛГУ им. П. Стучки, Рига, 1983.
3. Всесоюзная конференция по теории атомов и атомных спектров, Минск, 1983.
4. 8-я Республиканская конференция молодых ученых по физике, Минск, 1984.
5. 43-я научная конференция ЛГУ им. П. Стучки, Рига, 1984.
6. VII Республиканская конференция молодых ученых по спектроскопии и квантовой электронике, Паланга, 1985.
7. Всесоюзная конференция по теории атомов и атомных спектров, Ужгород, 1985.
8. The Conference of the spectroscopy committees of Socialist Countries, Balatanszeplak-Felső, Hungary, 1986.
9. VIII Республиканская конференция молодых ученых по спектроскопии и квантовой электронике, Паланга, 1987.
10. Всесоюзный семинар "Теория атомов и атомных спектров",

Тбилиси, 1988.

Настоящая работа выполнена в Институте физики АН Литовской ССР. Тема работы была предложена научным руководителем член-корр. АН ЛитССР, д-ром, проф. З.Б.Рудзикасом. Все теоретические расчеты выполнены, практические результаты и выводы получены лично автором. Обсуждение основных результатов проводилось совместно с научным руководителем и соавторами. Работы выполнялись в период с 1982г. по 1987 г. и соответствуют основному направлению исследований, проводимых в Отделе теории атома ИФ АН ЛитССР. Они входят в плановые темы: 01840014448, 01880003926.

Соавтор Г.В.Меркелис в работах [60,64-66,68,69] параллельно выводил некоторые формулы, в работе [70] консультировал автора по вопросам выбора алгоритма комплекса программ, позволяющего рассчитывать энергетический спектр в первых двух порядках ТВ, в работах [58,59] проводил непосредственную проверку некоторых графических преобразований, а также в работе [71] консультировал автора по выбору практического примера вычисления спектра ионов и атомов по ТВ. Соавтор Д.М.Каняускас в работах [57,58,62] обсуждал возможность применения развитой графической техники момента количества движения в формализме вторичного квантования и ТВ. В работе [68] соавтор З.Б. Рудзикас, основываясь на своих более ранних работах, консультировал автора по возможностям применения метода квазиспина при определении матричных элементов нерелятивистского эффективного гамильтониана атома, а в работах [57,58,66] написал обзор существующих графических методов количества движения и оценил

их возможности при создании новой модификации графической техники момента количества движения. Соавтор М.И. Вилкас в работе [71] составил подпрограммы для определения радиальных интегралов и их бесконечных сумм.

Структура и объем работы. Работа состоит из введения, десяти разделов, заключения и приложения, изложена на 189 страницах машинописного текста, включая 8 таблиц, 29 рисунков и список литературы, состоящий из 148 наименований. Объем текста без приложений, списка литературы, таблиц и рисунков составляет 128 страниц.

Краткое содержание разделов

В первом разделе дан краткий обзор теории эффективных операторов и методов их разложения, а также описана та форма ТВ, которая в основном будет применяться в диссертации.

Во втором разделе изложено обобщение графической техники Юциса и Бандзайтиса, в котором учитываются особенности метода вторичного квантования. На основе расширенной графической техники сформулированы правила, позволяющие графически представить перестановку любых двух операторов вторичного квантования в сложном неприводимом тензорном произведении путем многократной перестановки стоящих рядом операторов.

В третьем разделе получен неприводимый тензорный вид любых одноэлектронных и двухэлектронных операторов, которые графически представляются просуммированными по одноэлектронным магнитным квантовым числам фейнмановскими диаграммами. Разработана методика, в которой объединяется использование формализма фейнмановских диаграмм и графической техники теории момента количества движения, что необходимо при построении ряда ТВ в непри-

водимом тензорном виде.

В четвертом разделе определен графический аналог теоремы Вика для представления неприводимого тензорного произведения в нормальной форме. Даны правила, позволяющие получить только топологически неэквивалентные диаграммы с соответствующим топологическим множителем. Описана рекуррентная процедура построения диаграмм, дающих только ненулевые вклады в вакуумные средние операторных выражений. В качестве иллюстрации рассмотрен пример выражения вакуумных средних неприводимого тензорного произведения

$$\begin{aligned} & \left[\left[\left[\tilde{a}^{(\lambda)} \times \tilde{a}^{(\lambda)} \right]^{(\Gamma_1)} \times a^{(\lambda)} \right]^{(\Gamma_2)} \times \left[\tilde{a}^{(\lambda)} \times \tilde{a}^{(\lambda)} \right]^{(\Gamma_3)} \right]^{(\Gamma)} \times \left[\left[a^{(\lambda)} \times a^{(\lambda)} \right]^{(\Gamma_4)} \times \tilde{a}^{(\lambda)} \right]^{(\Gamma')} \\ & \times \left[a^{(\lambda)} \times a^{(\lambda)} \right]^{(\Gamma'')} \right]^{(\Gamma'')} \end{aligned} \quad (0)$$

. Обсуждены два графических подхода построения ряда ТВ в неприводимом тензорном виде.

Пятый раздел посвящен получению графического представления эффективного гамильтониана атома в первых двух порядках ТВ в неприводимом тензорном виде.

В шестом разделе даны правила, по которым из фейнмановских диаграмм определяется алгебраическое выражение для эффективного гамильтониана атома во втором порядке ТВ.

В седьмом разделе получены все соотношения, необходимые для вычисления спин-угловой части эффективного гамильтониана атома во втором порядке ТВ в тех случаях, когда модельное пространство строится из волновых функций с двумя и тремя незаполненными оболочками.

Восьмой раздел посвящен нахождению таких выражений для двухэлектронных и трехэлектронных операторов, субматричные элементы которых могут быть определены в виде произведения субматричных элементов, действующих в различных оболочках.

В девятом разделе описывается алгоритм и программа опреде-

ления энергетического спектра в первых двух порядках ТВ.

Десятый раздел посвящен описанию реализации методики для расчета энергетического спектра в первых двух порядках ТВ. В качестве примера взята изоэлектронная последовательность углерода, так как она наиболее хорошо изучена методом ТВ.

В приложении помещены алгебраические выражения для тех диаграмм, по которым можно легко найти окончательные алгебраические выражения для операторов $F_{эф}^{(1)}$, $H_{эф}^{(1)}$, $F_{эф}^{(2)}$ и $H_{эф}^{(2)}$.

Автор выражает сердечную благодарность научному руководителю заслуженному деятелю науки ЛитССР, члену-корреспонденту АН ЛитССР, профессору З.Б.Рудзикасу за предложенную тему работы, создание условий для ее выполнения и всестороннюю поддержку, ведущему научному сотруднику Ю.М.Каняускасу и старшему научному сотруднику Г.В.Меркелису за постоянную помощь и полезные советы, всем сотрудникам Отдела теории атома Института физики АН ЛитССР за интерес к работе, а также В.Н.Гаршвене за помощь при техническом оформлении диссертации.

I. Формальные методы стационарной теории возмущений в атомах

В последнее время в теоретической атомной и молекулярной спектроскопии интенсивно развивается стационарная ТВ [2, 72]. Ее удобно формулировать с помощью некоторого эффективного гамильтониана, действующего в модельном пространстве волновых функций собственных состояний оператора нулевого приближения. В литературе существует большое число различных вариантов выбора эффективного гамильтониана и методов его разложения в ряд ТВ. В данном разделе дадим краткий обзор этих всех методов, а также основываясь на работах [2, 33, 34], опишем ту форму ТВ, на которой в дальнейшем будет опираться все наше изложение.

Идея метода эффективных операторов состоит из того, что вместо истинного гамильтониана H рассматривается эффективный гамильтониан $H_{эф}$ (в каком-то смысле более простой, чем H), имеющий те же собственные значения E , что и H , и собственные функции ψ_i , известным образом связанные с истинными волновыми функциями системы. Все существующие формулировки эффективного гамильтониана можно проклассифицировать по нескольким признакам. Так, например, можно разделить $H_{эф}$ по их зависимости от точной энергии E . Существует E -зависящие $H_{эф}$ (формулировки Фешбаха [73] и Левдина [74-76]) и E -независящие $H_{эф}$. E -зависящие гамильтонианы имеют формально простую структуру, однако применение их в практических вычислениях ведет к дополнительной процедуре, что значительно затрудняет вычисления. В связи с этим наиболее удобным является E -независящие эффективные гамильтонианы, которые в

свою очередь разделяются на эрмитовые $H_{эф}$ и неэрмитовые $H_{эф}$. Большинство известных в настоящее время методов [73-87] приводит к эрмитовым $H_{эф}$. Неэрмитовые $H_{эф}$ (операторы Блоха [88] (проекционная формулировка) и Мориты-Сандарс [89] (адиабатическая формулировка)) имеют неортogonalные собственные функции.

Другой важный признак, по которому можно классифицировать E -независящие эффективные гамильтонианы, - пространство векторов, в котором они действуют. В этом отношении $H_{эф}$ делятся на эффективные гамильтонианы, действующие во всем пространстве волновых функций ψ_i [82], и на $H_{эф}$, которые действуют на некоторую часть этого пространства. Ко второму типу относится формулировка Блоха [88], Де Клуазо [78], Соливерца [79], ТВ Боголюбова-Тябликова [90], проекционная формулировка преобразования Ван-Флека [80,81,91].

Среди всех эффективных операторов особое положение занимает формулировка Блоха, так как в этой формулировке при малом возмущении собственный базис $H_{эф}$ наиболее близок к базису точных волновых функций и вследствие этого разложение блоховского гамильтониана формально имеет простейший вид. Аналогичные разложения были получены независимо Боголюбовым и Тябликовым [90], Брандоу [86,92], Макулкиным [93].

Помимо большого числа различных вариантов эффективного гамильтониана, существуют разные методы разложения в ряд ТВ. Наиболее распространенными и эффективными являются разложение по связным диаграммам (см. например, [2,94,95]) и кластерное разложение (см. например, [2,94]). В начале методика разложения по связным диаграммам была разработана в ядерной физике Бракнером [96] и Голдстоуном [97], причем последняя

формулировка затем была перенесена Толмачевым [98] и Кэлли [99] в атомную физику. При обосновании своего метода Бракнер пользовался развитым Ватсоном [100] аппаратом теории многократного рассеяния, а Голдстоун основывался на новых в теории поля достижениях Фейнмана [101], Дайсона [102] и других авторов [31, 103]. В ранних работах изучались только невырожденные системы; в частности — системы с заполненными оболочками. Общая методика для открытых оболочек развита Брандоу [33] на основе формализма стационарной ТВ Бриллюэна-Вигнера (E -зависящая ТВ). В атомной физике разложение по связным диаграммам осуществлялось на основе полевой формы ТВ Толмачевым, Сафроновой [26, 27, 104], а также Матулисом, Нашленасом, Бандзайтисом [41, 42] и на основе ТВ Рэлея-Шредингера (E -независящая ТВ)-Сандарсом [34], Линдгреном [37], Квасничкой [35, 105], а также другими авторами [83, 84, 106].

Кластерное разложение вначале было разработано в ядерной физике Гугенгольцом [38], Хаббардом [107], Костером [108] и Костером, Куммелем [109], а затем перенесено в квантовую химию Синаноглу [110] и далее развито Чижеком и др. [111]. Для систем с открытыми атомными оболочками методика была обобщена Линдгреном [112], Палдусом и Чижином с соавторами [113], а также Квасничкой [114].

Теперь, после краткого обзора эффективных операторов и методов разложения в ряд ТВ, перейдем к описанию той формы ТВ, которую будем использовать в дальнейшем.

Полный гамильтониан H выразим через сумму "невозмущенного" гамильтониана H_0 и возмущения H_1 , т.е.

$$H = H_0 + H_1 \quad (I.1)$$

Собственные волновые функции Φ нулевого гамильтониана атома удовлетворяют уравнению

$$H_0 \Phi = E_0 \Phi \quad (I.2)$$

и образуют полный ортогональный базис в пространстве векторов состояний атомной системы. Если рассматривать только задачу определения некоторой части дискретного спектра точного уравнения Шредингера (d значений энергии)

$$H \Psi_i = E_i \Psi_i \quad (i = 1, 2, \dots, d), \quad (I.3)$$

то, построив из волновых функций нулевого гамильтониана Φ_i ($i = 1, 2, \dots, d$) подпространство размерности d , можно поставить задачу о нахождении "проекции" уравнения (I.3) на это подпространство (обычно из полного набора решений уравнения (I.2) выбирают такие функции, которые имеют наибольшие веса в разложении точных волновых функций изучаемых энергетических состояний). Подпространство, образованное функциями Φ_i ($i = 1, 2, \dots, d$), называется расширенным модельным пространством (P-пространство) [2]. Пусть P - оператор проектирования на это пространство, а Q - оператор проектирования на дополнительное к модельному - ортогональное подпространство (Q - пространство). Эти операторы удовлетворяют следующим основным соотношениям:

$$P^2 = P ; Q^2 = Q ; PQ = QP = 0 ; P^+ = P ; Q^+ = Q , \quad (I.4.)$$

$$P+Q=1, \quad (I.5)$$

$$[P, H_0]=0; [Q, H_0]=0. \quad (I.6)$$

В рассматриваемом подходе модельные функции ψ_i определяются как проекции точных волновых функций Ψ_i на расширенное модельное пространство, т.е.

$$\psi_i = P\Psi_i \quad (i = 1, 2, \dots, d). \quad (I.7)$$

Эти функции в общем случае не являются ортогональными. Если они линейно независимы, то можно определить [75] волновой оператор Ω , который, действуя на модельные функции ψ_i , воспроизводит точные волновые функции

$$\Psi_i = \Omega \psi_i \quad (i = 1, 2, \dots, d). \quad (I.8)$$

Отметим, что соотношением (I.8) волновой оператор определен не полностью. Наиболее удобно доопределить его, потребовав выполнения дополнительного соотношения

$$\Omega Q = 0. \quad (I.9a)$$

Тогда

$$\Omega P = \Omega; P\Omega = P. \quad (I.9b)$$

Волновой оператор Ω может быть найден из обобщенного уравнения Блоха [35, 37, 88, 105]

$$[\Omega, H_0] = H_1 \Omega - \Omega H_1 \Omega, \quad (I.10)$$

после чего задача отыскания точных значений энергии системы E_i ($i = 1, 2, \dots, d$) может быть сведена к определению спектра эффективного гамильтониана

$$H_{\text{эф}} \psi_i = E_i \psi_i \quad (i = 1, 2, \dots, d), \quad (\text{I.II})$$

действующего только в расширенном модельном пространстве и имеющего вид

$$H_{\text{эф}} = P H \Omega = P H_0 P + W_{\text{эф}} \quad (\text{I.I2})$$

В последнем равенстве

$$W_{\text{эф}} = P H_1 \Omega \quad (\text{I.I3})$$

- оператор эффективного возмущающего взаимодействия.

Решение обобщенного уравнения Блоха можно искать по ТВ.

Разлагая волновой оператор в ряд

$$\Omega = P + \Omega^{(1)} + \Omega^{(2)} + \dots + \Omega^{(n)} + \dots \quad (\text{I.I4})$$

и подставляя в (I.I0), получаем операторное уравнение [2]

$$[\Omega^{(n)}, H_0] = Q H_1 \Omega^{(n-1)} - \sum_{m=1}^{n-1} \Omega^{(n-m)} H_1 \Omega^{(m-1)}, \quad (\text{I.I5})$$

решение которого определяет эффективный гамильтониан атома в n -м приближении

$$H_{\text{эф}}^{(0)} = P H_0 P; \quad H_{\text{эф}}^{(n)} = W^{(n)} = P H_1 \Omega^{(n-1)} \quad (n > 0). \quad (\text{I.I6})$$

Ввиду неэрмитовости эффективного гамильтониана (I.I2) его собственные функции - модельные функции ψ_i - не являются (как это уже отмечал выше) взаимно ортогональными. Если их выбрать нормированными к единице, то точные волновые функции уже таковыми не являются и определены в так называемой "промежуточной" нормировке $\langle \psi_i | \psi_i \rangle = 1$, так как

$$\langle \Psi_i | \varphi_i \rangle = \langle \Psi_i | P \Psi_i \rangle = \langle \Psi_i | P | P \Psi_i \rangle = \langle \varphi_i | \varphi_i \rangle . \quad (I.17)$$

Промежуточная нормировка обеспечивает ортогональность между двумя частями точной волновой функции: модельной функцией φ_i и корреляционной функцией $\chi_i (\Psi_i = \chi_i + \varphi_i)$, а именно

$$\langle \chi_i | \varphi_i \rangle = 0 ,$$

и является в этом смысле наиболее оптимальной. Выражение (I.12) для эффективного гамильтониана является, как отмечалось выше, только одним из множества различных эффективных гамильтонианов, рассматриваемых в современной стационарной ТВ (подробнее см., например, обзоры [86, 115]). Поскольку достаточно точных критериев, позволяющих выявить преимущества того или иного подхода, еще не существует, то разработка математического аппарата теории ведется одновременно почти во всех возможных направлениях. Однако в последнее время появился ряд работ [83, 115], посвященных установлению взаимосвязи (или альтернативности) различных возможных формулировок эффективного гамильтониана.

Чтобы сохранить за собой возможность переходить от одной формы эффективного гамильтониана к другой и выявить то место, которое занимает оператор (I.12) среди других эффективных гамильтонианов, мы изложим здесь наиболее общий метод получения этих различных форм - метод разделяющего уравнения [116].

Спектр собственных значений уравнения Шредингера

$$H \Psi = E \Psi \quad (I.18)$$

в результате преобразования подобия

$$H = X^{-1} H X \quad (I.19)$$

не изменяется, т.е.

$$H (X^{-1} \Psi) = E (X^{-1} \Psi) \quad (I.20)$$

Используя операторы проектирования P и Q , это уравнение можно представить в следующем виде

$$\begin{pmatrix} P H P & P H Q \\ Q H P & Q H Q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P X^{-1} \Psi \\ Q X^{-1} \Psi \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} P X^{-1} \Psi \\ Q X^{-1} \Psi \end{pmatrix} \quad (I.21)$$

До сих пор на преобразование подобия X не накладывалось никаких дополнительных условий (кроме необходимости существования обратного оператора X^{-1}). Ограничим теперь класс возможных преобразований, потребовав, чтобы оператор H удовлетворял уравнению разделения

$$Q H P = 0 \quad (I.22)$$

В таком случае H , действуя на любую волновую функцию в P -пространстве, преобразует ее в волновую функцию, также принадлежащую P -пространству. Тогда, введя эффективный гамильтониан

$$H_{\text{эф}} = P H P, \quad (I.23)$$

можно решить уравнение на их собственные значения

$$H_{\text{эф}} |\varphi_i\rangle = E_i |\varphi_i\rangle, \quad (I.24)$$

причем определенные в P -пространстве волновые функции $|\varphi_i\rangle$

будут одновременно являться собственными функциями уравнения (I.20).

В излагаемом подходе определение эффективного гамильтониана сводится к установлению такого преобразования X , при котором выполняется уравнение разделения (I.22), причем различный выбор оператора X ведет к различным формам эффективного гамильтониана.

Если X - унитарное преобразование, то эффективный гамильтониан будет эрмитовым. Впервые такое "каноническое преобразование" было использовано Ван-Флеком [80] и затем интенсивно развивалось рядом авторов (обзор см. в [117]). Обычно преобразование X выбирается в экспоненциальной форме

$$X = e^G, \quad (I.25)$$

где G - антиэрмитовый оператор, т.е. $G^\dagger = -G$.

Однако для оператора G уравнение разделения имеет слишком сложную структуру, поэтому большее распространение получил неэрмитовый вариант, в котором X также задается экспоненциальной формой

$$X = e^\omega, \quad (I.26)$$

причем требуется, чтобы оператор ω удовлетворял дополнительному условию

$$\omega = Q \omega P. \quad (I.27)$$

Тогда имеет место соотношение

$$P \omega = \omega Q = 0; \quad \omega^2 = \omega^3 = \dots = 0; \quad (I.28)$$

$$e^\omega = 1 + \omega, \quad (I.29)$$

а уравнение разделения (I.22) приводит к следующему нелинейному уравнению для оператора ω :

$$QH P - \omega H P + Q H \omega - \omega H \omega = 0. \quad (I.30)$$

Если каким-либо образом решение этого уравнения найдено, то тем самым определен и эффективный гамильтониан системы

$$H_{\text{эф}} = P H P + P H \omega \quad (I.31)$$

Несложно убедиться в том, что из формулы (I.30) следует обобщенное уравнение Блоха (I.10). Действительно, введя оператор

$$\Omega = P + \omega \quad (I.32)$$

и делая соответствующие подстановки в формуле (I.30), сразу приходим к уравнению (I.10), причем ввиду (I.27) операторы ω и Ω связаны простым соотношением

$$\omega = Q \Omega P. \quad (I.33)$$

В неэрмитовом варианте также существует возможность получения ряда различных эффективных гамильтонианов. В [115] был предложен достаточно общий метод классификации таких гамильтонианов. Дело в том, что если решение уравнения (I.30) для оператора ω найдено, то наряду с формулой (I.22) выполняется также уравнение разделения и для оператора

$$H(m, n) = X(m)^{-1} H X(n), \quad (I.34)$$

где

$$X(m) = (1 + \omega)(1 + \omega^+ \omega + \omega \omega^+)^m. \quad (I.35)$$

В работе [115] было показано, что все известные в настоящее

время эффективные гамильтонианы могут быть получены из формулы (I.34), ограничиваясь только несколькими целыми и полужелыми значениями m и n . Поэтому, имея развитый математический аппарат ТВ для эффективного гамильтониана, определяемого обобщенным уравнением Блоха (I.10), мы с помощью соотношений (I.34) и (I.35) можем легко переходить к эффективным гамильтонианам ТВ в других формулировках.

2. Расширенная графическая техника теории момента количества движения и вторичное квантование [57]

В последние годы в теории атомных спектров широкое распространение получил метод вторичного квантования в неприводимом тензорном виде [45,48]. В рамках этого метода удастся в простой и элегантной форме описать и симметрию вращения системы, и ее перестановочную симметрию: тензорные свойства волновых функций переносятся на операторы рождения и уничтожения электронов, а принцип Паули обеспечивается автоматически благодаря антикоммутационным соотношениям между операторами. Однако при практическом применении метода возникла необходимость объединить технику вторичного квантования в неприводимом тензорном виде с диаграммной техникой теории момента количества движения, так как использование графической техники существенно упрощает проведение различных алгебраических выкладок и вычислений. Наиболее эффективно эти преимущества удастся использовать только в том случае, когда графический метод полностью учитывает особенности тех величин теории, для изучения свойств которых он применяется. Таким образом, для применений необходимо получить такое расширение графической техники теории момента количества движения, которое позволило бы учесть особенности метода вторичного квантования в связанной форме - в частности, проводить графические преобразования сложных тензорных произведений операторов с учетом их перестановочных соотношений.

Так, широко известный графический метод [49], основанный на использовании коэффициентов Вигнера, наиболее полно отражает как свойства симметрии этих коэффициентов, так и их сумм (\sum_j -

коэффициентов). Графическая техника Юциса и Бандзайтиса [40] основана на коэффициенте К.-Г., поэтому она проявляется в полной мере именно при рассмотрении этих величин. Графические методы [40,49] формулируются вне зависимости друг от друга и являются полностью самостоятельными. Так как для матриц преобразования существуют возможности перехода от диаграмм Юциса и Бандзайтиса к диаграммам Юциса, Левинсона и Ванасага [50,51], то ограничимся расширением графической техники [40], более приспособленной, на наш взгляд, к особенностям метода вторичного квантования.

В этом графическом методе для отдельно взятого коэффициента К.-Г. используется только следующее свойство симметрии:

$$\begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{bmatrix} = (-1)^{j_1+j_2-j} \begin{bmatrix} j_2 & j_1 & j \\ m_2 & m_1 & m \end{bmatrix}, \quad (2.1)$$

определяющее правило изменения знака узла диаграммы A_1 (рис. 2.1). Свойства симметрии коэффициентов К.-Г., связанные с изменением знака одной из его проекций, применяются для сумм произведений этих коэффициентов. Учитывая при этом, что во многих физических задачах параметр суммирования не входит в фазовый множитель и повторяется в двух коэффициентах с тем же знаком, поэтому графический элемент, указывающий знак параметра суммирования, не используется. Однако метод вторичного квантования в неприводимом тензорном виде вызывает необходимость рассмотрения сумм, содержащих зависимость от параметра суммирования. Другими словами, надо уметь графически изображать все симметрии коэффициента К.-Г. [40]. В связи с этим введем для отдельно-

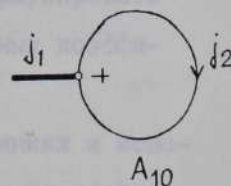
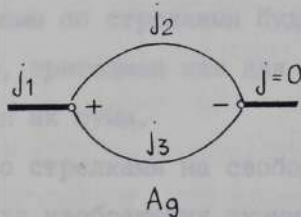
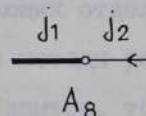
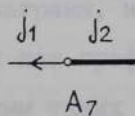
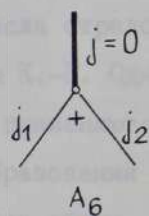
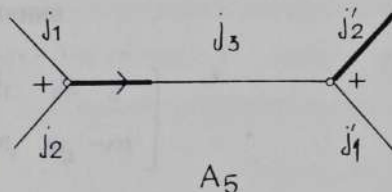
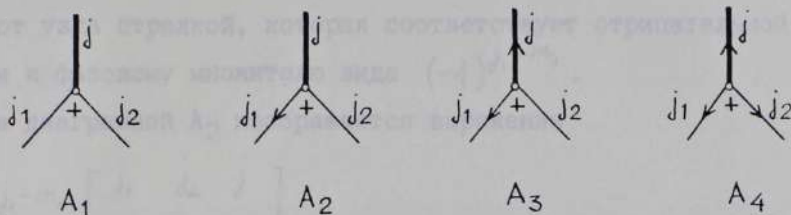


Рис. 2.1. Диаграммы, изображающие некоторые основные величины теории момента количества движения

го коэффициента К.-Г. дополнительный элемент - линию с направленной от узла стрелкой, которая соответствует отрицательной проекции и фазовому множителю вида $(-1)^{j_1 - m_1}$.

Тогда диаграммой A_2 изображается выражение

$$(-1)^{j_1 - m_1} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ -m_1 & m_2 & m \end{bmatrix},$$

а диаграммой A_3 - выражение

$$(-1)^{j_1 - m_1 + j - m} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ -m_1 & m_2 & -m \end{bmatrix}.$$

Учитывая свойства симметрии коэффициентов К.-Г., можно убедиться, что диаграмма с тремя стрелками A_4 может быть заменена обычной диаграммой Юриса и Бандзайтиса A_I : $A_I = A_4$. Кроме того, можно было бы сформулировать и другие правила изменения числа стрелок для диаграмм, изображающих отдельные коэффициенты К.-Г. Однако, так как графические методы расчета практически применяются для сумм таких коэффициентов, то и правила преобразования диаграмм со стрелками будем формулировать в наиболее общем виде, пригодном как для отдельных коэффициентов К.-Г., так и для их сумм.

Введя диаграммы со стрелками на свободных линиях и используя согласно [40] для изображения суммирования по проекциям соединение линий, получаем, что замкнутая линия j со стрелкой означает сумму по проекции m с дополнительным фазовым множителем $(-1)^{j-m}$, причем в коэффициенте К.-Г., изображаемом узлом, из которого стрелка выходит, соответствующая проекция берется с отрицательным знаком. В частности, диаграмме

A_5 соответствует выражение

$$\sum_{m_3} (-1)^{j_3 - m_3} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & -m_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_3 & j_1 & j_2 \\ m_3 & m_1 & m_2 \end{bmatrix} .$$

Обычные свойства симметрии коэффициентов К.-Г. позволяют сформулировать следующие правила изменения расположения стрелок на лобых (свободных или замкнутых) линиях диаграммы:

1. направление стрелки на линии j можно изменить на противоположное, дописав к диаграмме дополнительный фазовый множитель $(-1)^{2j}$;

2. линия без стрелки эквивалентна этой же линии с нанесенными двумя стрелками противоположного направления;

3. если в любом из узлов диаграммы на каждую из трех линий нанести одновременно либо по одной стрелке, выходящей из узла, либо по одной стрелке, входящей в узел, то алгебраическое выражение для этой диаграммы не изменится.

Сочетание этих трех правил позволяет приводить расположение стрелок на диаграммах к наиболее простому виду.

Так, используя правила 1 и 2, получаем, что любая линия с двумя стрелками одинакового направления эквивалентна линии без стрелки с дополнительным фазовым множителем $(-1)^{2j}$. Непосредственная проверка показывает, что сформулированная в [40] графическая техника преобразований диаграмм переносится без изменений на диаграммы со стрелками.

Кроме того, для таких диаграмм имеет место дополнительное правило, позволяющее переносить утолщение у узла с одной линии на другую. При перенесении утолщения с некоторой линии j_3 на

линию j_2 диаграмме приписывается множитель $\sqrt{(2j_3+1)/(2j_2+1)}$, а на линию j_1 , не участвующую в перенесении утолщения, ставится выходящая из узла стрелка, если перенесение утолщения отрицательное, и входящая в узел стрелка, если перенесение положительное. (Согласно [40] перенесение называется отрицательным тогда, когда оно противоположно направлению сложения моментов, и положительным - когда совпадает с этим направлением). Необходимо также иметь в виду, что при любых преобразованиях диаграмм всегда имеет место общее дополнительное правило [40]: при исчезновении полностью утолщенной линии j дописывается множитель $(2j+1)^{-1}$, а при возникновении такой линии - множитель $(2j+1)$.

Простым примером использования вылепленных правил может служить графическое преобразование диаграмм с результирующей нулевой линией. В графическом методе [40] тонкая линия с нулевым значением момента количества движения может быть уничтожена. (Очевидно, что с тонкой линией со стрелкой можно поступить таким же образом). Перенос в графическом изображении A_6 коэффициента К.-Г. $\begin{bmatrix} j_1 & j_2 & 0 \\ m_1 & m_2 & 0 \end{bmatrix}$ утолщение с нулевой линии на любую другую и затем уничтожая тонкую нулевую линию, приходим к диаграммам A_7 и A_8 , причем

$$A_6 = [j_2]^{-\frac{1}{2}} A_7 = [j_1]^{-\frac{1}{2}} A_8 \quad (2.2)$$

Здесь и в дальнейшем используются обозначения $[x, y, \dots] = (2x+1)(2y+1)\dots$.

Поскольку имеют место равенства

$$A_7 = (-1)^{j_1 - m_1} \delta(j_1, j_2) \delta(-m_1, m_2), \quad (2.3)$$

$$A_8 = (-1)^{j_2 + m_2} \delta(j_1, j_2) \delta(m_1, -m_2), \quad (2.4)$$

то в любой сложной диаграмме при условии равенства параметров j_1 и j_2 узлы вида A_7 и A_8 могут быть вырезаны с сохранением на линии, вновь получаемой после соединения концов, соответственно направленной стрелки. В качестве примера рассмотрим диаграмму A_9 , которой соответствует сумма

$$\sum_{m_2, m_3} \begin{bmatrix} j_3 & j_2 & j_1 \\ m_3 & m_2 & m_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_3 & j_2 & 0 \\ m_3 & m_2 & 0 \end{bmatrix} = \delta(j_2, j_3) \delta(j_1, m_1, 00). \quad (2.5)$$

Переносим утолщение с нулевой линии и вырезая узел, мы приходим к диаграмме A_{10} , причем

$$A_9 = \delta(j_2, j_3) [j_2]^{-\frac{1}{2}} A_{10}, \quad (2.6)$$

т.е. имеет место равенство

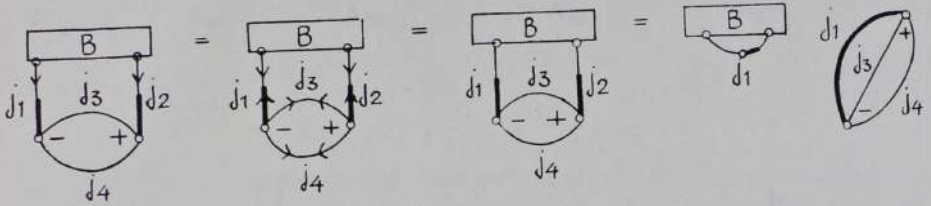
$$A_{10} = [j_2]^{\frac{1}{2}} \delta(j_1, m_1, 00). \quad (2.7)$$

Еще одной важной операцией графической техники момента количества движения является операция разрезания диаграммы по нескольким линиям. Поскольку диаграммы со стрелками мы вводили таким образом, чтобы техника их преобразований минимально отличалась от методики [40], то мы не будем вводить дополнительных правил разрезания диаграммы по линиям со стрелками: используя методы преобразования, описанные ранее в этом разделе, можно сначала освободить от стрелок линии, по которым

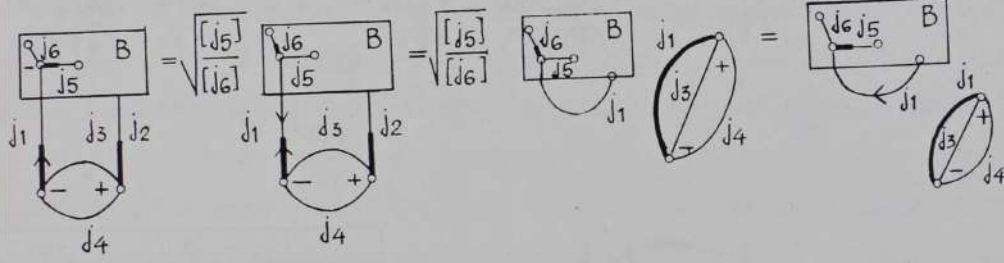
мы намереваемся разрезать диаграмму, а затем следовать обычной методике. При этом только необходимо особо учитывать следующее обстоятельство. Различные величины теории момента количества движения (матрицы преобразования, $\int n_j$ - коэффициенты) выражаются через суммы по проекциям произведений коэффициентов К.-Г. без фазовых множителей, зависящих от этих проекций. Поэтому при выделении таких величин необходимо соответствующую часть диаграммы преобразовать таким образом, чтобы она не содержала линий со стрелками. Иллюстрацией могут служить графические преобразования диаграмм A_{I1} и A_{I2} (рис. 2.2), в которых путем разрезания по двум линиям выделены треугольные дельты, причем в диаграмме A_{I2} выделение такой дельты без преобразования блока B уже не является возможным.

Теперь, после рассмотрения расширенного графического изображения коэффициентов К.-Г. и их сумм, перейдем к графическому изображению неприводимых тензорных произведений операторов вторичного квантования. Поскольку в теории атомных спектров формализм вторичного квантования применяется как в нерелятивистском, так и в релятивистском подходе, то будем формулировать соответствующую графическую технику в виде, одновременно пригодном для обоих случаев. С этой целью введем обозначения для тензорных операторов рождения $a_{m_\lambda}^{(\lambda)}$ и уничтожения $\tilde{a}_{m_\lambda}^{(\lambda)} = (-1)^{\lambda - m_\lambda} a_{-m_\lambda}^{(\lambda)}$, где $(\lambda) = (\ell s)$, $(m_\lambda) = (m_\ell m_s)$ в случае LS-связи, и $(\lambda) = (j)$, $(m_\lambda) = (m_j)$ - в случае jj-связи.

Следуя работе [52], будем изображать неприводимые тензорные операторы $a^{(\lambda)}$ и $\tilde{a}^{(\lambda)}$ диаграммами A_{I3} и A_{I4} (рис. 2.3) соответственно, а диаграммой A_{I5} - любой из этих двух операторов. В тех случаях, когда необходимо орбитальный ℓ и



A₁₁



A₁₂

Рис. 2.2. Примеры разделения диаграмм

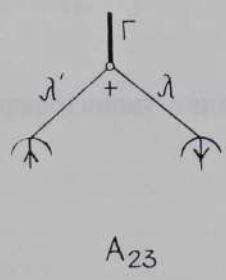
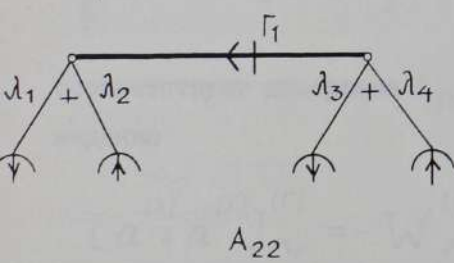
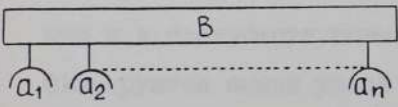
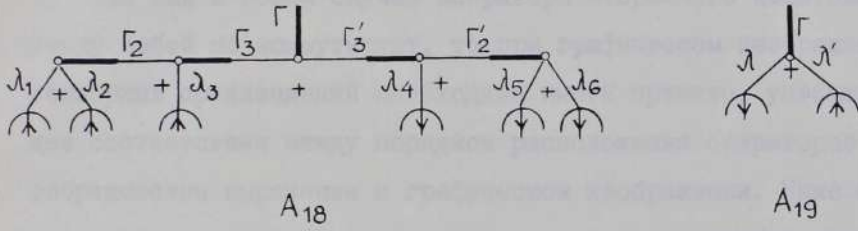
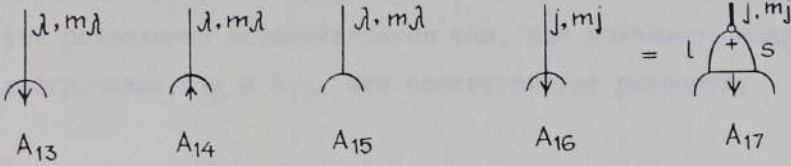


Рис. 2.3. Диаграммы, изображающие некоторые неприводимые тензорные произведения операторов вторичного квантования

спиновой S ранги рассматривать отдельно, на диаграммах такое разделение осуществляется так, как показано, например, диаграммами A_{I6} и A_{I7} , что соответствует равенству

$$a_{m_j}^{(j)} = \sum_{m_l, m_s} \begin{bmatrix} l & s & j \\ m_l & m_s & m_j \end{bmatrix} a_{m_l m_s}^{(ls)}. \quad (2.8)$$

Так как в общем случае операторы вторичного квантования между собой не коммутируют, то при графическом изображении их тензорных произведений необходимо иметь правило, устанавливающее соответствие между порядком расположения операторов в алгебраическом выражении и графическом изображении. Ниже мы будем считать, если неотмечено специально, что при изображении тензорных произведений соблюдается тот же лексикографический порядок, что и в соответствующем алгебраическом выражении. (Тем самым фиксируются знаки узлов диаграмм, которые в таких случаях уже нельзя изменять по общим правилам). Так, например, выражению

$$\left[\left[\left[\tilde{a}^{(\lambda_1)} \times \tilde{a}^{(\lambda_2)} \right]^{(\Gamma_2)} \times \tilde{a}^{(\lambda_3)} \right]^{(\Gamma_3)} \times \left[a^{(\lambda_4)} \times \left[a^{(\lambda_5)} \times a^{(\lambda_6)} \right]^{(\Gamma_2')} \right]^{(\Gamma_3')} \right]^{(\Gamma)}$$

$_{M_\Gamma}$

соответствует диаграмма A_{I8} , а неприводимому тензорному произведению

$$\left[a^{(\lambda)} \times \tilde{a}^{(\lambda')} \right]_{M_\Gamma}^{(\Gamma)} = -W_{M_\Gamma}^{(\Gamma)} \quad (2.9)$$

- диаграмма A_{I9} .

В общем случае тензорное произведение n операторов вторичного квантования

$$\left[a_1 \times a_2 \times \dots \times a_n \right]_{M_T}^{B(\Gamma)} = \sum_{(m_\lambda)} a_1 a_2 \dots a_n \left[m_{\lambda_1} m_{\lambda_2} \dots m_{\lambda_n} \right]^B \quad (2.10)$$

(здесь a_i - любой из двух операторов $a_{m_{\lambda_i}}^{(\lambda_i)}$ или $\tilde{a}_{m_{\lambda_i}}^{(\lambda_i)}$) изображается диаграммой A_{20} , в которой блоком B условно обозначен входящий в (2.10) обобщенный коэффициент К.-Г. с некоторой схемой связи B . При рассмотрении физических операторов результирующий ранг в тензорном произведении вида (2.10) довольно часто принимает нулевое значение. Соответствующая нулевая линия может быть уничтожена с помощью преобразования, описанного выше. Это преобразование связано с появлением дополнительных множителей, поэтому мы при изображении тензорного произведения нулевого ранга будем (если это необходимо) использовать специальные обозначения, позволяющие учесть эти множители непосредственно в диаграмме: перечеркнутой тонкой линией j будем сопоставлять множитель $[j]^{-\frac{1}{2}}$, а перечеркнутой утолщенной - множитель $[j]^{\frac{1}{2}}$. Так, тензорному произведению $[a^{(\lambda_1)} \times \tilde{a}^{(\lambda_2)}]^{(0)}$ соответствует диаграмма A_{21} , а произведению $[[a^{(\lambda_1)} \times \tilde{a}^{(\lambda_2)}]^{(\Gamma_1)} \times [a^{(\lambda_3)} \times \tilde{a}^{(\lambda_4)}]^{(\Gamma_2)}]^{(0)}$ - диаграмма A_{22} .

Если в неприводимом тензорном произведении операторов вторичного квантования необходимо перейти от одной схемы связывания моментов к другой, не переставляя операторы между собой, то соответствующее преобразование совершается графически согласно общей процедуре, описанной в [40]: отделяем операторы от обобщенного коэффициента К.-Г. и соединяем при помощи другого коэффициента, соответствующего необходимому типу связи,

а другим таким же коэффициентом соответственно замыкаем оставшиеся без операторов концы исходной диаграммы.

В методе вторичного квантования очень важны преобразования, связанные с перестановками операторов между собой. Ввиду обычных антикоммутиционных свойств операторов рождения и уничтожения фермионов при перестановке компонент соответствующих неприводимых тензоров имеем

$$a_{m_\lambda}^{(\lambda)} \tilde{a}_{m'_\lambda}^{(\lambda')} + \tilde{a}_{m'_\lambda}^{(\lambda')} a_{m_\lambda}^{(\lambda)} = (-1)^{\lambda - m'_\lambda} \delta(\lambda, \lambda') \delta(-m_\lambda, m'_\lambda), \quad (2.11)$$

причем правая часть этого выражения изображается диаграммой A_7 (рис. 2.1).

Если в неприводимом тензорном произведении общего вида (2.10) переставляются операторы рождения и уничтожения, находящиеся рядом, то при учете формулы (2.11) можно сформулировать правило графического преобразования соответствующей диаграммы: к обычной диаграмме [40], определяемой изменением порядка и схемы связывания переставляемых операторов и взятой со знаком минус, добавляется диаграмма, в которой эти операторы опущены, а соответствующие концы линий соединены элементом A_7 так, чтобы стрелка на линии этого элемента была направлена в сторону того конца, на котором до перестановки находился оператор уничтожения.

Применяя это правило к диаграмме A_{19} , приходим к равенству

$$A_{19} = (-1)^{\lambda + \lambda' - \Gamma + 1} A_{23} - \delta(\lambda, \lambda') A_{10}, \quad (2.12)$$

являющемуся графическим изображением тензорного соотношения

$$[\alpha^{(\lambda)} \times \tilde{\alpha}^{(\lambda')}]^{(\Gamma)} = (-1)^{\lambda+\lambda'-\Gamma+1} [\tilde{\alpha}^{(\lambda')} \times \alpha^{(\lambda)}]^{(\Gamma)} - \delta(\lambda, \lambda') \delta(\Gamma, 0) [\lambda]^{\frac{1}{2}}, \quad (2.13)$$

которое в свою очередь является тензорной формой выражения (2.11).

Сформулированное выше правило позволяет также графически представить перестановку любых двух операторов вторичного квантования в неприводимом тензорном произведении общего вида (2.11) — путем многократной перестановки стоящих рядом операторов (учитывая при этом, что два оператора рождения (или два оператора уничтожения) антикоммутируют между собой).

Таким образом, изложенная в этом разделе расширенная графическая техника Юдаса и Бандзайтиса обладает всеми графическими элементами, которые необходимы для графического изображения и преобразования операторов вторичного квантования, представленных в неприводимом виде.

3. Графическое изображение одночастичных и двух-
частичных неприводимых тензорных операторов и
диаграммные методы определения их матричных
элементов [58-60]

Так как отдельные члены ряда ТВ представляют собой произведение одночастичных или/и двухчастичных операторов, целесообразно более подробно рассмотреть их тензорную структуру.

В первую очередь рассмотрим одночастичный оператор, являющийся тензором ранга k , λ в орбитальном и спиновом пространствах соответственно. Он в наиболее общей форме записывается следующим образом [48]:

$$f(z, \sigma)_{m_r}^{(k\lambda)\Gamma} = f(z, \sigma)_{m_r}^{(\lambda)\Gamma} = \sum_{m_k m_\lambda m_\Gamma} \begin{bmatrix} k & \lambda & \Gamma \\ m_k & m_\lambda & m_\Gamma \end{bmatrix} f(z, \sigma)_{m_k m_\lambda}^{(k\lambda)} = \sum_{m_k m_\lambda m_\Gamma} \begin{bmatrix} k & \lambda & \Gamma \\ m_k & m_\lambda & m_\Gamma \end{bmatrix} f(z)_{m_k}^{-(k\lambda)} f(\sigma)_{m_\lambda}^{-(\lambda)} \quad (3.1)$$

где $f(z)$ - радиальная, а $f(\sigma)_{m_\lambda}^{-(\lambda)} \equiv f(\sigma)_{m_\lambda}^{-(\lambda)}$ - угловая часть одночастичного оператора и введены обозначения $j \equiv k\lambda$, $m_j \equiv m_k m_\lambda$.

Тогда вторично-квантованный вид рассматриваемого оператора [45, 48]:

$$F = \sum_{i,j} a_i a_j^+ \langle i | f(z, \sigma)_{m_r}^{(k\lambda)\Gamma} | j \rangle \quad (3.2)$$

где a_i , a_j^+ - соответственно, оператор рождения и уничтожения электрона, $\langle i | f(z, \sigma)_{m_r}^{(k\lambda)\Gamma} | j \rangle$ - одноэлектронный матричный элемент, который определен относительно неантисимметричных волновых функций, индексы i , j обозначают четверки кванто-

вых чисел $n_i, l_i, m_{l_i}, m_{s_i}, n_j, l_j, m_{l_j}, m_{s_j}$. Предложим, что тензорная структура двухчастичного оператора имеет следующий вид:

$$g(z_1, z_2; z_1', z_2')_{m_r}^{(k_1, k_2, k, \alpha_1, \alpha_2, \alpha) \Gamma} = \sum_{m_k, m_x} g(z_1, z_2) [m_k, m_x, m_r] \left[g(\sigma_1^{(k_1, \alpha_1)}) \times g(\sigma_2^{(k_2, \alpha_2)}) \right]_{m_k, m_x}^{(k, \alpha)} =$$

$$= g(z_1, z_2) \left[g(\sigma_1^{(\delta_1)}) \times g(\sigma_2^{(\delta_2)}) \right]_{m_r}^{(\delta) \Gamma}, \quad (3.3)$$

Где $g(z_1, z_2)$ - радиальная часть оператора, а $g(\sigma_i^{(\delta_i)})$ - оператор, действующий на спин-угловые переменные функции i -той частицы. Тогда сам оператор в представлении вторичного квантования

$$G = \frac{1}{2} \sum_{i, i', j, j'} a_i a_j a_{j'}^+ a_{i'}^+ \langle ij | g(z_1, z_2; z_1', z_2')_{m_r}^{(k_1, k_2, k, \alpha_1, \alpha_2, \alpha) \Gamma} | i' j' \rangle, \quad (3.4)$$

где $\langle ij | g(z_1, z_2; z_1', z_2')_{m_r}^{(k_1, k_2, k, \alpha_1, \alpha_2, \alpha) \Gamma} | i' j' \rangle$ - двухэлектронный матричный элемент.

Однако конкретный расчет членов ряда ТВ, выраженных в виде различных произведений операторов в формах (3.2), (3.4), значительно усложняется из-за большого числа сумм по одноэлектронным магнитным квантовым числам. Как известно, суммирование по этим квантовым числам может быть эффективным образом проведено при использовании математического аппарата теории момента количества движения. Выделение не зависящей от проекций части для простейших амплитуд членов ряда ТВ впервые было про-

ведено в работе [39], что позволило, в частности, установить топологическую эквивалентность моментных и фейнмановских диаграмм. Используя графические методы теории момента количества движения, в дальнейшем были получены различные обобщения [2,34] такого подхода на случай произвольного члена ряда ТВ.

Однако, операторные выражения остаются не просуммированными по магнитным квантовым числам, т.е. требуются дополнительные преобразования для того, чтобы представить эти выражения в неприводимом тензорном виде. Известно, что анализ ряда ТВ и классификацию его отдельных членов удобно проводить с помощью фейнмановских диаграмм; с другой стороны, для изучения неприводимых тензорных свойств различных величин широко применяется графическая техника теории момента количества движения [40,49]. Хотя давно установлено, что фейнмановские и моментные диаграммы топологически эквивалентны, однако методы, позволяющие совместно использовать обе эти диаграммные техники в теории возмущений для атомных систем, развиты еще недостаточно. Далее в этом и последующих разделах эти вопросы будут исследованы более детально.

Рассмотрим одноэлектронный оператор $f^{(k\lambda)}(r, \sigma)_{m_r}$. Суммируя в (3.2) по одноэлектронным магнитным квантовым числам m_{λ_i} , m_{λ_j} , получаем (см. рис. 3.1)

$$\begin{aligned}
 F &= \sum_{n_i l_i n_j l_j} B_1 = \sum_{n_i l_i n_j l_j} (-1) \left[\frac{l_i s}{x x} \right]^{1/2} (n_i l_i | f(r) | n_j l_j) B_2 = \\
 &= (-1) \sum_{n_i l_i n_j l_j} \left[\frac{\lambda_i}{s} \right]^{1/2} (n_i l_i | f(r) | n_j l_j) \sum_{m_x m_\lambda} B_3 B_4, \quad (3.5)
 \end{aligned}$$

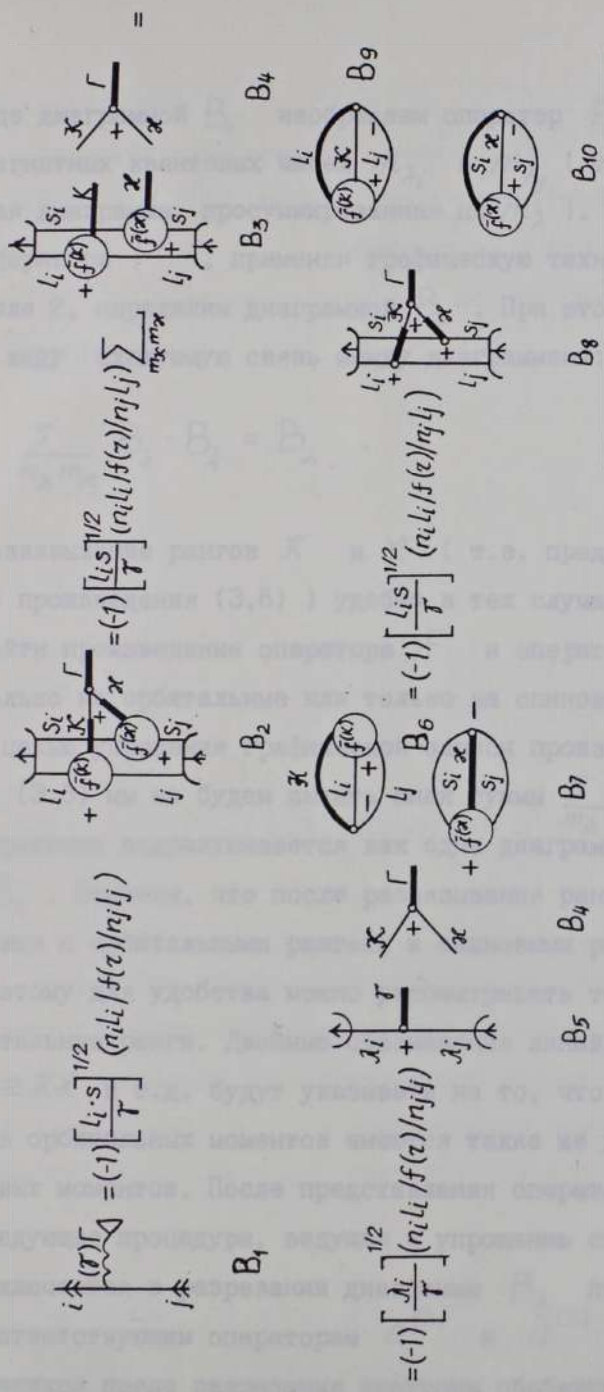


Рис. 3.1. Графическое представление спин-угловой части одночастичного оператора F

где диаграммой B_1 изображаем оператор F , не зависящий от магнитных квантовых чисел m_{λ_i} и m_{λ_j} (т.е. B_1 - фейнмановская диаграмма, просуммированная по m_{λ}). Спин-угловую часть оператора F , применяя графическую технику, развитую в разделе 2, определим диаграммой B_2 . При этом необходимо иметь в виду следующую связь между диаграммами:

$$\sum_{m_x m_x} B_3 \cdot B_4 = B_2 \quad (3.6)$$

Развязывание рангов \mathcal{K} и \mathcal{L} (т.е. представление B_2 в виде произведения (3.6)) удобно в тех случаях, когда необходимо найти произведение оператора F и оператора, действующего только на орбитальные или только на спиновые переменные. Далее с целью упрощения графической записи произведения диаграмм вида (3.6) мы не будем писать знак суммы $\sum_{m_x m_x}$, если такое выражение подразумевается как одна диаграмма: например $B_5 B_4 = B_8$. Отметим, что после развязывания рангов \mathcal{K} и \mathcal{L} , действия с орбитальными рангами и спиновыми рангами одинаковы и поэтому для удобства можно рассматривать только, например, орбитальные ранги. Двойные обозначения линий, т.е. $\lambda \equiv \ell s$, $j \equiv \mathcal{K} \mathcal{L}$ и т.д. будут указывать на то, что наряду с диаграммами для орбитальных моментов имеются такие же диаграммы и для спиновых моментов. После представления оператора F в виде (3.5), следующая процедура, ведущая к упрощению спин-угловой части F , заключается в разрезании диаграммы B_3 по свободным линиям, соответствующим операторам $\alpha^{(\lambda)}$ и $\tilde{\alpha}^{(\lambda)}$, и соединении оставшихся после разрезания диаграмм обобщенным коэффициентом К.-Г. (см. подробнее в [40]). В итоге получается произве-

дение диаграмм $B_5 B_4$ на B_6 и B_7 . Произведение $B_6 B_7$ представляет субматричный элемент $[n_i \lambda_i \| f^{(k\lambda)} \| n_j \lambda_j]$, а вид коэффициента К.-Г. определяется структурой тензорного произведения $a^{(\lambda)}$ и $\tilde{a}^{(\lambda)}$, которую мы хотим получить. Так как $B_5 \cdot B_4 = B_8$, окончательный вид неприводимого одночастичного оператора

$$\begin{aligned}
 F &= (-1) \sum_{n_i \lambda_i n_j \lambda_j} \left[\frac{\lambda_i}{\delta} \right]^{\frac{1}{2}} (n_i \lambda_i \| f(z) \| n_j \lambda_j) B_4 \cdot B_5 \cdot B_6 \cdot B_7 = \\
 &= (-1) \sum_{n_i \lambda_i n_j \lambda_j} \left[\frac{\lambda_i}{\delta} \right]^{\frac{1}{2}} (n_i \lambda_i \| f(z) \| n_j \lambda_j) B_8 B_9 B_{10} = \\
 &= - \sum_{n_i \lambda_i n_j \lambda_j} \left[\frac{l_i, s}{k, \lambda} \right]^{\frac{1}{2}} [n_i l_i s \| f^{(k\lambda)} \| n_j l_j s] [a^{(l_i s)} \times \tilde{a}^{(l_j s)}]^{(k\lambda)\Gamma} m_\Gamma. \quad (3.7)
 \end{aligned}$$

Рассмотрим теперь двухчастичный оператор G . Просуммированную по одноэлектронным магнитным квантовым числам фейнмановскую диаграмму двухэлектронного оператора G будем изображать диаграммой B_{11} , а спин-угловую часть оператора G -диаграммой $B'_{12} = B_{12} \cdot B_{13}$ (см. рис. 3.2), т.е.

$$G = \sum_{\substack{n_i \lambda_i n_j \lambda_j \\ n'_i \lambda'_i n'_j \lambda'_j}} B_{11} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{n_i \lambda_i n_j \lambda_j \\ n'_i \lambda'_i n'_j \lambda'_j}} \left[\frac{\lambda_i, \lambda_j}{\delta_1, \delta_2} \right]^{\frac{1}{2}} (n_i \lambda_i n_j \lambda_j \| g(z_1, z_2) \| n'_i \lambda'_i n'_j \lambda'_j) B'_{12}. \quad (3.8)$$

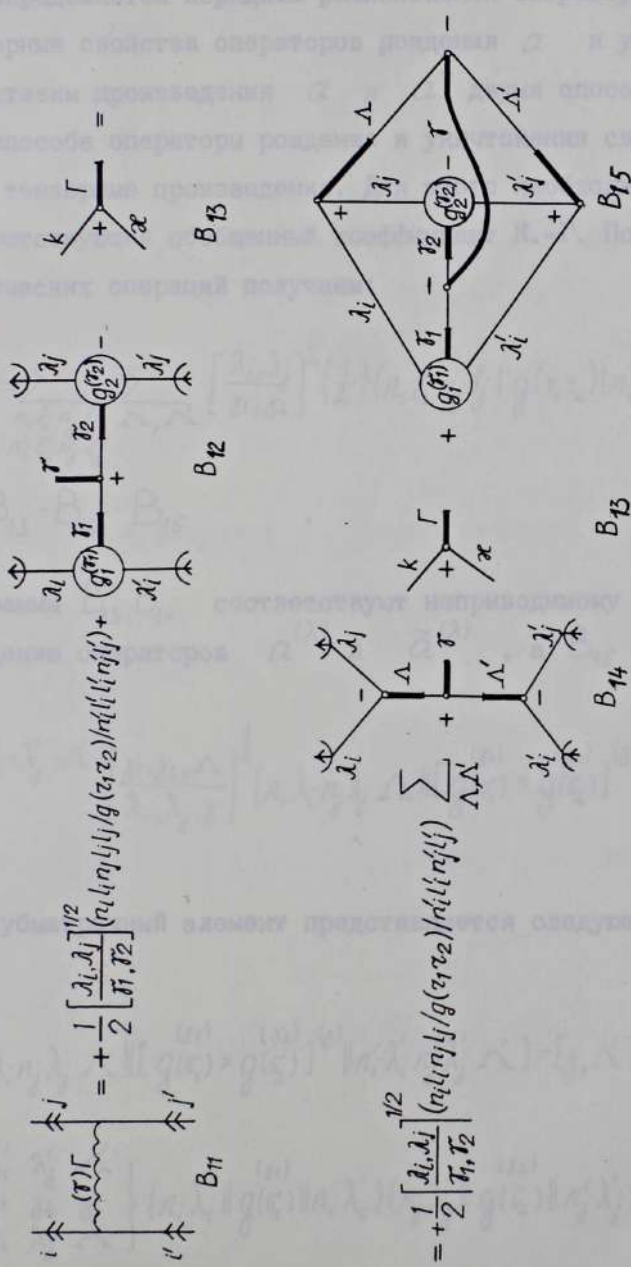


Рис. 3.2. Графическое представление спин-угловой части двухчастичного оператора G_I

Неприводимый тензорный вид двухчастичного оператора во многом определяется порядком расположения операторов. Используя тензорные свойства операторов рождения a и уничтожения a^+ , представим произведения a и a^+ двумя способами. При первом способе операторы рождения и уничтожения связываются парами в тензорные произведения. Для этого необходимо подобрать соответствующий обобщенный коэффициент К.-Г. После несложных графических операций получаем:

$$G_I = \sum_{\substack{n_i, l_i, n_j, l_j \\ n'_i, l'_i, n'_j, l'_j}} \sum_{\Delta, \Delta'} \left[\frac{\lambda_i, \lambda_j}{\delta_1, \delta_2} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{2} \right) (n_i, l_i, n_j, l_j | g(\sigma_1, \sigma_2) | n'_i, l'_i, n'_j, l'_j) \times \\ \times B_{13} \cdot B_{14} \cdot B_{15} \quad (3.9)$$

Диаграммы $B_{13} B_{14}$ соответствуют неприводимому тензорному произведению операторов $a^{(\lambda)}$ и $\tilde{a}^{(\lambda)}$, а B_{15} - выражению

$$(-1)^{\lambda'_i + \lambda'_j - \Delta} \left[\frac{\lambda_i, \lambda_j, \Delta}{\lambda_i, \lambda_j, \delta} \right]^{\frac{1}{2}} [n_i, \lambda_i, n_j, \lambda_j, \Delta] \| [g^{(\sigma_1)} \times g^{(\sigma_2)}]^{(\delta)} \| n'_i, \lambda'_i, n'_j, \lambda'_j, \Delta],$$

где субматричный элемент представляется следующим образом:

$$[n_i, \lambda_i, n_j, \lambda_j, \Delta] \| [g^{(\sigma_1)} \times g^{(\sigma_2)}]^{(\delta)} \| n'_i, \lambda'_i, n'_j, \lambda'_j, \Delta] = [\gamma, \Delta']^{\frac{1}{2}} \times \\ \times \left\{ \begin{array}{ccc} \lambda'_i & \lambda'_j & \Delta' \\ \delta_1 & \delta_2 & \delta \\ \lambda_i & \lambda_j & \Delta \end{array} \right\} (n_i, \lambda_i \| g^{(\sigma_1)} \| n'_i, \lambda'_i) (n_j, \lambda_j \| g^{(\sigma_2)} \| n'_j, \lambda'_j) \quad (3.10)$$

Часто в (3.9) используются антисимметричные амплитуды [118]

$$\begin{aligned} & \langle n_i \lambda_i m_{\lambda_i} n_j \lambda_j m_{\lambda_j} | g(z_1 \zeta_1; z_2 \zeta_2)_{m_r}^{(k_1 k_2 k, \alpha_1 \alpha_2 \alpha)} | n'_i \lambda'_i m'_{\lambda'_i} n'_j \lambda'_j m'_{\lambda'_j} \rangle_A = \\ & = \frac{1}{2} \left[\langle n_i \lambda_i m_{\lambda_i} n_j \lambda_j m_{\lambda_j} | g(z_1 \zeta_1; z_2 \zeta_2)_{m_r}^{(k_1 k_2 k, \alpha_1 \alpha_2 \alpha)} | n'_i \lambda'_i m'_{\lambda'_i} n'_j \lambda'_j m'_{\lambda'_j} \rangle - \right. \\ & \left. - \langle n_i \lambda_i m_{\lambda_i} n_j \lambda_j m_{\lambda_j} | g(z_1 \zeta_1; z_2 \zeta_2)_{m_r}^{(k_1 k_2 k, \alpha_1 \alpha_2 \alpha)} | n'_j \lambda'_j m'_{\lambda'_j} n'_i \lambda'_i m'_{\lambda'_i} \rangle \right]. \end{aligned} \quad (3.11)$$

В таком случае оператор G_I можно записать

$$\begin{aligned} G_I = & -\frac{1}{4} \sum_{\substack{n_i \lambda_i n_j \lambda_j \\ n'_i \lambda'_i n'_j \lambda'_j \\ \Delta, \Delta'}} \frac{1}{[\delta]^{1/2}} \left[a^{(\lambda_i)} \times a^{(\lambda_j)} \right]^{(\Delta)} \times \left[\tilde{a}^{(\lambda'_j)} \times \tilde{a}^{(\lambda'_i)} \right]^{(\Delta')} (\delta) \Gamma_{m_r} \times \\ & \times \left\{ (n_i \lambda_i n_j \lambda_j | g(z_1 z_2) | n'_j \lambda'_j n'_i \lambda'_i) (n_i \lambda_i n_j \lambda_j \Delta \| [g^{(\delta_1)} \times g^{(\delta_2)}]^{(\delta)} \| n'_j \lambda'_j n'_i \lambda'_i \Delta') + \right. \\ & \left. + (-1)^{\lambda'_i + \lambda'_j - \Delta' + 1} (n_i \lambda_i n_j \lambda_j | g(z_1 z_2) | n'_i \lambda'_i n'_j \lambda'_j) (n_i \lambda_i n_j \lambda_j \Delta \| [g^{(\delta_1)} \times g^{(\delta_2)}]^{(\delta)} \| n'_i \lambda'_i n'_j \lambda'_j \Delta') \right\}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Тогда при расчете матричных элементов $G_{\underline{I}}$ вся зависимость прямого и обменного членов от многоэлектронных квантовых чисел определяется одним и тем же оператором

$$\left[\left[a^{(\lambda_i)} \times a^{(\lambda_j)} \right]^{(\underline{\lambda})} \times \left[\tilde{a}^{(\lambda'_i)} \times \tilde{a}^{(\lambda'_j)} \right]^{(\underline{\lambda})} \right] (\delta) \Gamma_{m_{\Gamma}}$$

Во втором способе представления операторы рождения и уничтожения располагаются таким образом, чтобы рядом находились те операторы вторичного квантования, проекции рангов которых входят в один и тот же коэффициент К.-Г. Тогда просуммированный по магнитным квантовым числам двухчастичный оператор во втором способе представления $G_{\underline{II}}$ выражений через сумму двух

диаграмм B_{16} и B_{17} (см. рис. 3.3). Соответственно его спин-угловая часть графически также изображается суммой диаграмм $B_{18} B_{19}$ и $B_{20} B_{19}$. Дальнейшее графическое упрощение диаграмм $B_{18} B_{19}$ и $B_{20} B_{19}$ проводится аналогично как и в предыдущем примере:

$$G_{\underline{II}} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{n_i l_i n_j l_j \\ n'_i l'_i n'_j l'_j}} \left[\frac{\lambda_i, \lambda_j}{\delta_1, \delta_2} \right]^{\frac{1}{2}} (n_i l_i n_j l_j | g(r_1, r_2) | n'_i l'_i n'_j l'_j) \times$$

$$\times \left\{ B_{18} B_{19} - \delta(n'_i l'_i, n_j l_j) B_{19} \cdot B_{20} \right\} =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\substack{n_i l_i n_j l_j \\ n'_i l'_i n'_j l'_j}} \left[\frac{\lambda_i, \lambda_j}{\delta_1, \delta_2} \right]^{\frac{1}{2}} (n_i l_i n_j l_j | g(r_1, r_2) | n'_i l'_i n'_j l'_j) \times$$

$$\times \left\{ B_{19} B_{21} B_{22} - \delta(n'_i l'_i, n_j l_j) B_{19} B_{23} B_{24} \right\}.$$

$B_{21} B_{19}$ и $B_{23} B_{19}$ соответствуют неприводимым тензорным произведениям $[[a^{(\lambda_i)} \times \tilde{a}^{(\lambda'_i)}]^{(\delta_1)} \times [a^{(\lambda_j)} \times \tilde{a}^{(\lambda'_j)}]^{(\delta_2)}]^{(\delta) \Gamma}$ и $[a^{(\lambda_i)} \times \tilde{a}^{(\lambda'_j)}]^{(\delta) \Gamma}$,

а B_{22} и B_{24} - произведениям $\frac{1}{[\lambda_i, \lambda_j]^{1/2}} (n_i \lambda_i \| g^{(\delta_1)} \| n'_i \lambda'_i) (n_j \lambda_j \| g^{(\delta_2)} \| n'_j \lambda'_j)$ и $(-1)^{l_i + l'_j + j} \left[\begin{matrix} \lambda_i & \lambda_j & \lambda \\ \lambda_i & \lambda_j & \lambda \end{matrix} \right]^{1/2} \left\{ \begin{matrix} \delta_1 & \delta_2 & \delta \\ \lambda_j & \lambda_i & \lambda_j \end{matrix} \right\} (n_i \lambda_i \| g^{(\delta_1)} \| n'_i \lambda'_i) (n_j \lambda_j \| g^{(\delta_2)} \| n'_j \lambda'_j)$.

Отметим, что в (3.9) появляется дополнительная сумма по рангам Δ, Δ' , по сравнению с выражением (3.13). Однако во втором случае оператор G представляется двумя членами.

Таким образом в данном разделе графическим способом получаем неприводимый тензорный вид одночастичного и двухчастичного операторов. Поскольку в нерелятивистской теории атома при построении ряда ТВ, возмущение определяется оператором электростатического взаимодействия электронов V , перейдем к изучению его тензорного вида.

Во вторичноквантованной форме интересующий нас оператор записывается следующим образом:

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i, i', j, j'} a_i a_j a_{j'}^+ a_{i'}^+ \langle ij | \frac{1}{r_{12}} | i' j' \rangle \quad (3.14)$$

Если оператор электростатического взаимодействия электронов (3.14) представлен в нормальной форме [2], то, суммируя его по проекциям, приходим к выражению (см. рис. 3.4)

$$V_{\frac{1}{2}} = -\frac{1}{2} \sum_{\substack{n_i l_i n_j l_j \\ n'_i l'_i n'_j l'_j \\ k \Delta}} (-1)^{k-k_s} \sqrt{[\Delta]} B_{25} B_{26} R_k (n_i l_i n'_i l'_i, n_j l_j n'_j l'_j) =$$

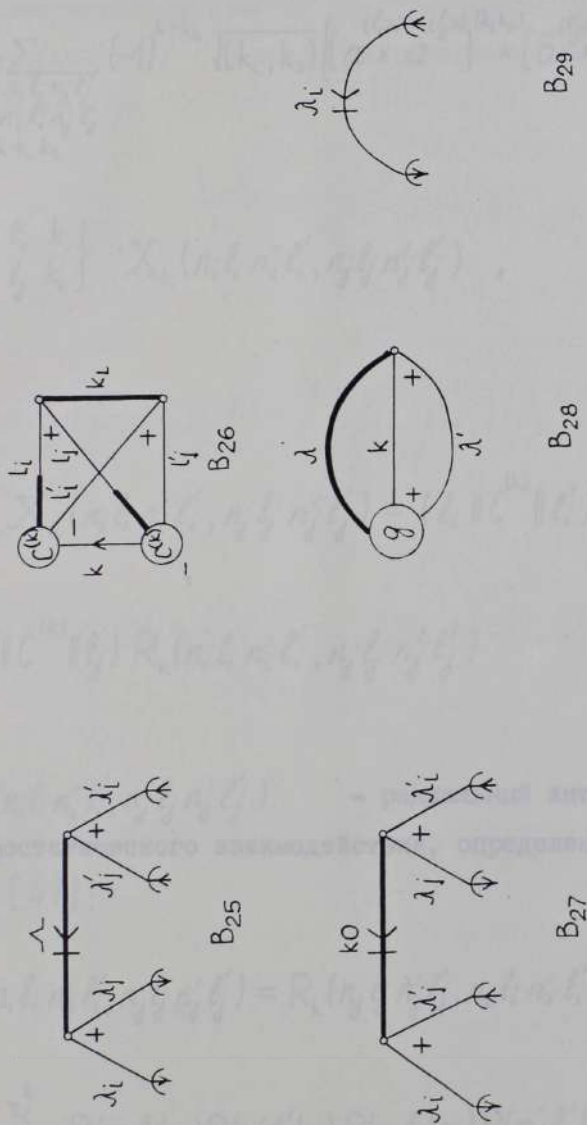


Рис. 3.4. Диаграммы, изображающие составные элементы спин-угловой части оператора электростатического взаимодействия

$$= -\frac{1}{2} \sum_{\substack{n_i l_i n_j l_j \\ n'_i l'_i n'_j l'_j \\ k k_L k_S}} (-1)^{k-k_S} \sqrt{[k_L, k_S]} \left[\begin{matrix} (l_i s) & (l'_j s) & (k_L k_S) \\ a \times a \end{matrix} \right] \times \left[\begin{matrix} (l'_i s) & (l_j s) & (k_L k_S) \\ \tilde{a} \times \tilde{a} \end{matrix} \right] \begin{matrix} (00) \\ \times \end{matrix}$$

$$\times \left\{ \begin{matrix} l_i & l'_i & k \\ l'_j & l_j & k_L \end{matrix} \right\} X_k(n_i l_i n'_i l'_i, n_j l_j n'_j l'_j), \quad (3.15)$$

где

$$X_k(n_i l_i n'_i l'_i, n_j l_j n'_j l'_j) = (l_i \| C^{(k)} \| l'_i) \times \\ \times (l_j \| C^{(k)} \| l'_j) R_k(n_i l_i n'_i l'_i, n_j l_j n'_j l'_j) \quad (3.16)$$

а $R_k(n_i l_i n'_i l'_i, n_j l_j n'_j l'_j)$ - радиальный интеграл оператора электростатического взаимодействия, определенный следующим образом [47]:

$$R_k(n_i l_i n'_i l'_i, n_j l_j n'_j l'_j) = R_k(n_j l_j n'_j l'_j, n_i l_i n'_i l'_i) = \\ = \iint \frac{z_1^k}{z_1^{k+1}} P(n_i l_i | r_1) P(n'_i l'_i | r_1) P(n_j l_j | r_2) P(n'_j l'_j | r_2) dr_1 dr_2, \quad (3.17)$$

$(l_i \| C^{(k)} \| l'_i)$ - субматричный элемент оператора сферической функции.

Операторная часть выражения (3.15) содержит суммирование по промежуточным рангам k_L, k_S . Однако, согласно (3.13) можно представить V в виде, не содержащем такого суммирования [48]:

$$\begin{aligned}
 V_{II} = & \frac{1}{2} \sum_{\substack{n_i \lambda_i n_j \lambda_j \\ n'_i \lambda'_i n'_j \lambda'_j \\ k}} \left[\frac{\lambda_i, \lambda_j}{k} \right]^{\frac{1}{2}} B_{28}(C^{(k)}, \lambda_i, \lambda'_i, k) B_{28}(C^{(k)}, \lambda_j, \lambda'_j, k) B_{27} \times \\
 & \times R_k(n_i l_i n'_i l'_i, n_j l_j n'_j l'_j) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{n_i \lambda_i n_j \lambda_j \\ n'_i \lambda'_i n'_j \lambda'_j \\ k}} \sqrt{[\lambda_i]} (B_{28}(C^{(k)}, \lambda_j, \lambda'_j, k))^2 B_{28} \times \\
 & \times R_k(n_i l_i n_j l_j, n'_i l'_i n'_j l'_j) = \sum_{\substack{n_i \lambda_i n_j \lambda_j \\ n'_i \lambda'_i n'_j \lambda'_j \\ k}} \frac{1}{\sqrt{[k]}} [W^{(k_0)}(n_i l_i, n'_i l'_i) \times W^{(k_0)}(n_j l_j, n'_j l'_j)]^{(00)} \times \\
 & \times X_k(n_i l_i n'_i l'_i, n_j l_j n'_j l'_j) - \sum_{\substack{n_i \lambda_i n_j \lambda_j \\ n'_i \lambda'_i n'_j \lambda'_j \\ k}} \frac{1}{\sqrt{2[l_i]}} W^{(00)}(n_i l_i, n'_i l'_i) \times \\
 & \times X_k(n_i l_i n_j l_j, n'_i l'_i n'_j l'_j),
 \end{aligned}$$

(3.18)

где неприводимые тензорные операторы

$$W(n_i l_i, n_i' l_i') = - [\alpha^{(l_i s)} \times \tilde{a}^{(l_i' s)}]^{(k_L k_S)} \quad (3.19)$$

являются основными величинами, через которые выражаются операторы, применяемые в теории атома. Предлагаемая диаграммная методика без ограничений применима для любого оператора, представленного в неприводимом тензорном виде.

Покажем теперь, что изложенная выше диаграммная техника может быть применена не только для графического представления операторов, но также и в качестве простого и эффективного метода нахождения матричных элементов этих операторов.

В представлении вторичного квантования волновой функции оболочки эквивалентных электронов $|n\lambda_\alpha^N \Gamma M_\Gamma\rangle$ соответствует выражение $\hat{\varphi}(n\lambda_\alpha^N)_{M_\Gamma}^{(\Gamma)} |0\rangle$ [48], где $\hat{\varphi}(n\lambda_\alpha^N)_{M_\Gamma}^{(\Gamma)}$ - неприводимый тензор (сопоставим ему диаграмму B_{30}), составленный из операторов рождения $\alpha^{(\lambda)}$. Графическое изображение сложной волновой функции, обладающей оболочечной структурой, представим произведением двух диаграмм B_{32} и B_{33} . Диаграмма B_{33} изображает вакуумное состояние $|0\rangle$, а в диаграмме B_{32} соблюдается тот же лексикографический порядок в оболочках, что и в соответствующем алгебраическом выражении. Аналогично бра функция $\langle n\lambda_\alpha^N \Gamma M_\Gamma |$ представляется выражением

$$\langle 0 | (-1)^{\frac{N(N-1)}{2} + \Gamma - M_\Gamma} \tilde{\varphi}(n\lambda_\alpha^N)_{-M_\Gamma}^{(\Gamma)},$$

где $\tilde{\varphi}(n\lambda_\alpha^N)_{M_\Gamma}^{(\Gamma)}$ - неприводимый тензор (см. диаграмму B_{34}), получаемый заменой в $\varphi(n\lambda_\alpha^N)_{M_\Gamma}^{(\Gamma)}$ операторов $\alpha^{(\lambda)}$ на $\tilde{a}^{(\lambda)}$ [48].

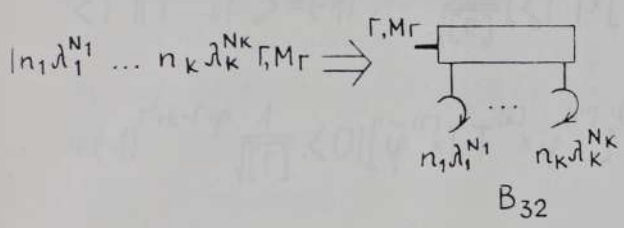
Тогда бра функцию с k оболочками изобразим произведением диаграмм B_{34} и B_{35} , где B_{34} - вакуумное состояние $\langle 0 |$.

$$g_{M\Gamma}^{(\Gamma)}(n\lambda^N) \Rightarrow \downarrow \Gamma, M\Gamma$$

B30

$$\tilde{g}_{M\Gamma}^{(\Gamma)}(n\lambda^N) \Rightarrow \downarrow \Gamma, M\Gamma$$

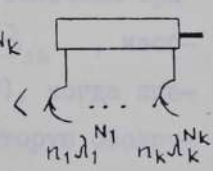
B31



B32

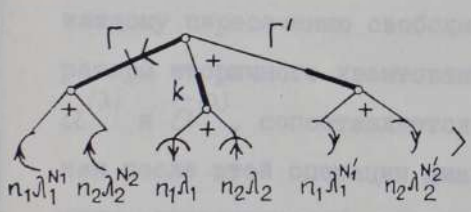
B33

$$\langle n_1\lambda_1^{N_1} \dots n_k\lambda_k^{N_k} \Gamma, M\Gamma | = (-1)^{\Gamma - M\Gamma + \sum_{i=1}^k N_i(N_i-1)/2 + \sum_{i>j} N_i N_j} \begin{array}{c} \boxed{\phantom{\text{box}}} \\ \downarrow \dots \downarrow \\ n_1\lambda_1^{N_1} \dots n_k\lambda_k^{N_k} \end{array}$$

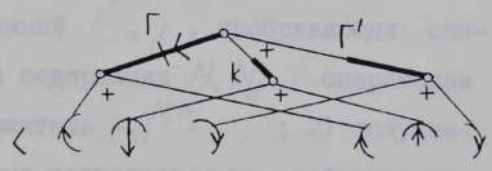


B34

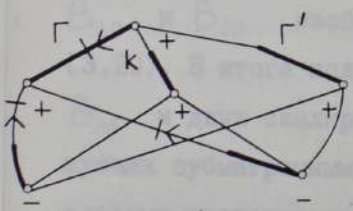
B35



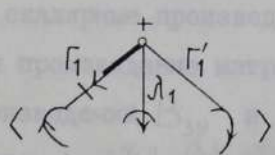
B36



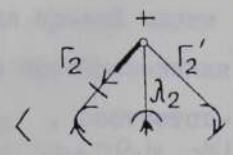
B37



B38



B39



B40

Рис. 3.5. Диаграммы, изображающие основные части матричных элементов, и порядок их графических преобразований

При построении графического изображения субматричного элемента тензорного оператора $T^{(k)}$ мы используем соотношение [119]

$$\begin{aligned} \langle \Gamma \| T^{(k)} \| \Gamma' \rangle &= (-1)^{\Gamma'+k-\Gamma} \frac{1}{\sqrt{[\Gamma]}} \left[\langle \tilde{\Gamma} | \times [T^{(k)} \times | \Gamma' \rangle]^{(\Gamma)} \right]^{(0)} = \\ &= (-1)^{\Gamma'+k-\Gamma+\beta} \frac{1}{\sqrt{[\Gamma]}} \langle 0 | [\tilde{\psi}^{(\Gamma)} \times [T^{(k)} \times \psi^{(\Gamma')}]]^{(\Gamma)} | 0 \rangle, \end{aligned} \quad (3.20)$$

где β - фаза, зависящая от числа электронов в оболочках бра функции. Рассмотрим в качестве примера диаграмму B_{36} , изображающую скалярное произведение правой части (3.20), когда оператор $T^{(k)} = [a^{(\lambda_1)} \times \tilde{a}^{(\lambda_2)}]^{(k)}$ действует на первую и вторую оболочки эквивалентных электронов. Возможна следующая схема упрощения изучаемого тензорного произведения: 1) собрать все операторы, относящиеся к одной оболочке (т.е. с одинаковыми $n\lambda$) так, чтобы они находились рядом (см. диаграмму B_{37}), при этом каждому пересечению свободных линий i, j , изображающих операторы вторичного квантования и содержащих $N_i N_j$ операторов $a^{(\lambda)}$ и $\tilde{a}^{(\lambda)}$, сопоставляется множитель $(-1)^{N_i N_j}$; 2) полученная после этой операции диаграмма разрезается по свободным линиям, относящимся к операторам с одинаковыми $n\lambda$, и закрывается таким обобщенным коэффициентом К.-Г., чтобы диаграммы B_{39} и B_{40} изображали скалярные произведения правой части (3.20). В итоге получается произведение матрицы преобразования B_{38} и двух скалярных произведений B_{39} и B_{40} , соответствующих субматричным элементам $(n_1 \lambda_1^{N_1} \| a^{(\lambda_1)} \| n_1 \lambda_1^{N_1})$ и $(n_2 \lambda_2^{N_2} \| \tilde{a}^{(\lambda_2)} \| n_2 \lambda_2^{N_2})$, которые пропорциональны генеалогическим коэффициентам

$(e^{\alpha_1 L_1 S_1}) e^{\alpha_2 L S}$, введенным Ракахом [120] . Имея в виду связь субматричного элемента оператора рождения с генеалогическим коэффициентом [45, 121] , диаграмма B_{39} соответствует алгебраическому выражению

$$B_{39} = (-1)^{N_1} \sqrt{N_1 [L_1, S_1]} (e^{\alpha_1 L_1 S_1} e^{N_1 - 1} (\alpha_1' L_1' S_1') e) \quad (3.21)$$

а B_{40} - выражению:

$$B_{40} = (-1)^{N_2' + L' + S' + \ell + s - L - S} \sqrt{N_2' [L_2', S_2']} (e^{\alpha_2' L_2' S_2'} e^{N_2' - 1} (\alpha_2 L_2 S_2) e) . \quad (3.22)$$

Таким образом, в этом разделе получен неприводимый тензорный вид любых одноэлектронных и двухэлектронных операторов, которые графически представляются просуммированными по одноэлектронным магнитным квантовым числам фейнмановскими диаграммами B_1 ; B_{11} или B_{16} , B_{17} . Они могут быть выбраны в качестве исходного пункта для построения ряда ТВ; тогда расчет субматричных элементов в определенном модельном пространстве эффективного гамильтониана атома, выраженного в виде ряда ТВ, каждый член которого представляется просуммированной по m_λ фейнмановской диаграммой, а также анализ самой диаграммы может быть проведен вышеизложенным графическим способом, который, по нашему мнению, легко поддается алгоритмизации. Один из вариантов такого представления будет рассмотрен в пятом разделе.

4. Графический аналог теоремы Вика [57, 61-63]

Во втором разделе были сформулированы правила, позволяющие графически представить перестановку любых двух операторов вторичного квантования в сложном неприводимом тензорном произведении путем многократной перестановки стоящих рядом операторов. Такой поэтапный метод преобразования обычно приводит к большому числу промежуточных диаграмм и является довольно трудоемким. Однако в теоретико-полевых методах ТВ существует эффективный метод преобразований вторично-квантованных операторов, основанный на применении теоремы Вика [103, 122] и представления операторов в нормальной форме. В этом разделе мы разработаем соответствующее обобщение графической техники преобразования, позволяющее эффективно использовать эти методы в теории сложных атомов.

По определению [122], оператор представлен в нормальной форме, когда все входящие в него операторы уничтожения перенесены вправо от операторов рождения. Отдельные члены, получающиеся при таком преобразовании, удобно записывать с помощью нормального произведения операторов - произведения, в котором операторы рождения и уничтожения фермионов строго антикоммутируют между собой. Для такого произведения используются специальные обозначения $\{a_i, a_k, \dots, a_l\}$ (здесь a_i - любой из двух операторов $a_{m\lambda_i}^{(\lambda_i)}$ и $\tilde{a}_{m\lambda_i}^{(\lambda_i)}$), причем операторы под знаком нормального произведения считаются приведенными к нормальной форме с точностью до фазового множителя $(-1)^p$, где p - число транспозиций, определяющих соответствующую перестановку операторов.

Так,

$$\begin{aligned} \left\{ \begin{matrix} (\lambda) & (\lambda') \\ a_{m_\lambda} & a_{m'_\lambda} \end{matrix} \right\} &= a_{m_\lambda}^{(\lambda)} a_{m'_\lambda}^{(\lambda')} ; \\ \left\{ \begin{matrix} \sim(\lambda) & \sim(\lambda') \\ \tilde{a}_{m_\lambda} & \tilde{a}_{m'_\lambda} \end{matrix} \right\} &= \tilde{a}_{m_\lambda}^{(\lambda)} \tilde{a}_{m'_\lambda}^{(\lambda')} ; \\ \left\{ \begin{matrix} (\lambda) & \sim(\lambda') \\ a_{m_\lambda} & \tilde{a}_{m'_\lambda} \end{matrix} \right\} &= a_{m_\lambda}^{(\lambda)} \tilde{a}_{m'_\lambda}^{(\lambda')} ; \\ \left\{ \begin{matrix} \sim(\lambda) & (\lambda') \\ \tilde{a}_{m_\lambda} & a_{m'_\lambda} \end{matrix} \right\} &= -a_{m'_\lambda}^{(\lambda')} \tilde{a}_{m_\lambda}^{(\lambda)} . \end{aligned} \quad (4.1)$$

Спаривание \overline{xy} двух операторов вторичного квантования x и y определяется [2, 122] как разность между обычным и нормальным произведениями. Тогда из (4.1) и (2.11) следуют соотношения

$$\overline{a_{m_\lambda}^{(\lambda)} a_{m'_\lambda}^{(\lambda')}} = \tilde{a}_{m_\lambda}^{(\lambda)} \tilde{a}_{m'_\lambda}^{(\lambda')} = \overline{a_{m_\lambda}^{(\lambda)} \tilde{a}_{m'_\lambda}^{(\lambda')}} \equiv 0 , \quad (4.2)$$

$$\overline{\tilde{a}_{m_\lambda}^{(\lambda)} a_{m'_\lambda}^{(\lambda')}} = (-1)^{\lambda - m_\lambda} \delta(\lambda, \lambda') \delta(m_\lambda, -m'_\lambda) , \quad (4.3)$$

т.е. спаривание тождественно не равно нулю только в том случае, когда оператор уничтожения находится слева от оператора рождения. Сравнивая (4.3) с выражением (2.3) для диаграммы A_7 , заключаем, что графически ненулевое спаривание можно определить этой диаграммой (см. рис. 2.1).

Приведение операторного выражения к нормальной форме значительно упрощается применением теоремы Вика, которая для независимых от времени операторов формулируется следующим обра-

зом [2, 122].

Если A - некоторое произведение операторов рождения и уничтожения, то

$$A = \{A\} + \{\bar{A}\} \quad , \quad (4.4)$$

где $\{\bar{A}\}$ - сумма нормальных произведений для операторов, получаемых при проведении в A всех возможных (однократных, двухкратных и т.д.) спариваний.

Дадим теперь графическую формулировку теоремы Вика для неприводимого тензорного произведения операторов рождения и уничтожения. Для этого заметим, что поскольку эта теорема справедлива для любых сумм произведений операторов вторичного квантования, то она имеет место и для неприводимого тензорного произведения общего вида (2.10). В нормальной форме такого произведения спаривание (4.3) может быть графически изображено соединением концов двух линий элементом A_7 , стрелка в котором направляется в ту сторону, где до спаривания находился оператор уничтожения, и дополнительным фазовым множителем, устанавливаемым по общему правилу "выпутывания" отдельного спаривания из-под знака нормального произведения [122]. Учитывая это, теорема Вика для неприводимых тензорных произведений может быть представлена графически с помощью ряда диаграмм $C_1 - C_1'''$, изображенного на рис. 4.1. Каждая отдельная диаграмма соответствует некоторому типу спаривания (однократному, двухкратному и т.д.), причем суммирование в диаграмме ведется по всем возможным спариваниям данного типа и изображается соединением соответствующих концов линий элементом A_7 .

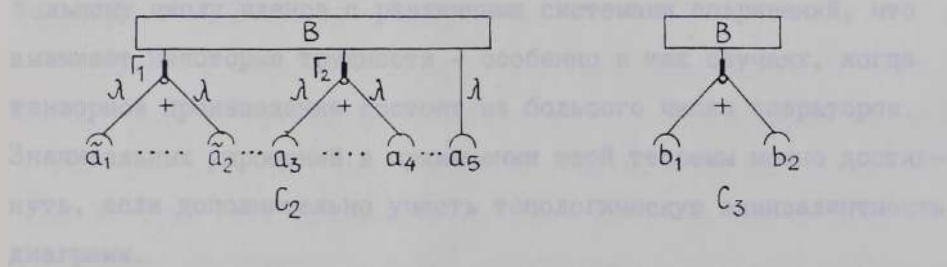
В диаграммах с некоторыми λ -рассеяниями

$$\begin{array}{c} \boxed{B} \\ \downarrow \quad \downarrow \\ a_1 \quad \dots \quad a_n \end{array} = \begin{array}{c} \boxed{B} \\ \downarrow \quad \downarrow \\ \{a_1 \quad \dots \quad a_n\} \end{array} + \sum_{i \neq j} 2_{ij}^1 \begin{array}{c} \boxed{B} \\ \downarrow \quad \downarrow \\ \{a_1 \quad \dots \quad a_n\} \end{array} + \sum_{ijkl} 2_{ijkl}^2 \begin{array}{c} \boxed{B} \\ \downarrow \quad \downarrow \\ \{a_1 \quad \dots \quad a_n\} \end{array} + \dots$$

C_1 C'_1 C''_1 C'''_1

где 2_{ij}^1 — число диаграмм, полученных из C_1 путем перестановки a_i и a_j , а 2_{ijkl}^2 — число диаграмм, полученных из C_1 путем перестановки a_i, a_j, a_k и a_l .

Надо отметить, что при рассуждениях в этом параграфе мы считали, что B — оператор, а не функция.



Рассмотрим в качестве примера свойства диаграмм C_2 , которые изображают некоторую последовательность операторов, соединенных в определенном порядке.

$$\begin{array}{c} \boxed{B} \\ \downarrow \quad \downarrow \\ a_1 \quad \dots \quad a_n \end{array} = \begin{array}{c} \boxed{B} \\ \downarrow \quad \downarrow \\ \{a_1 \quad \dots \quad a_n\} \end{array} + \sum_{i \neq j} D_{ij} 2_{ij}^1 \begin{array}{c} \boxed{B} \\ \downarrow \quad \downarrow \\ \{a_1 \quad \dots \quad a_n\} \end{array} + \sum_{ijkl} D_{ijkl} 2_{ijkl}^2 \begin{array}{c} \boxed{B} \\ \downarrow \quad \downarrow \\ \{a_1 \quad \dots \quad a_n\} \end{array} + \dots$$

C_4 C'_4 C''_4

Рис. 4.1. Диаграммы, определяющие графический аналог теоремы Вика

В диаграммах с некоторым k -ратным спариванием

$$N_{ij\dots l}^k = (-1)^{M + \sum_{m=1}^k \beta_m(ij\dots l)} \quad (4.5)$$

где M - число пересечений между собой линий, изображающих отдельные спаривания; $\beta_m(ij\dots l)$ - число неспаренных операторов вторичного квантования, охватываемое одной такой (m -й) линией.

Надо отметить, что прямое применение теоремы Вика ведет к большому числу членов с различными системами спариваний, что вызывает некоторые трудности - особенно в тех случаях, когда тензорное произведение состоит из большого числа операторов. Значительных упрощений в применении этой теоремы можно достигнуть, если дополнительно учесть топологическую эквивалентность диаграмм.

Рассмотрим в качестве примера свойства диаграммы C_2 , которая изображает некоторую последовательность операторов, соединенных в неприводимое тензорное произведение по схеме B . Допустим, что операторы $\tilde{a}_1, \tilde{a}_2, a_3, a_4$ и a_5 принадлежат одной оболочке эквивалентных электронов. Учитывая, что в таком случае ранги Γ_1 и Γ_2 могут принимать только четные значения (точнее, четные значения принимает сумма $L+S$ в случае LS -связи, и J - в случае jj -связи), заключаем, что, переставляя между собой операторы \tilde{a}_1 и \tilde{a}_2 (или операторы a_3, a_4), приходим к диаграмме, эквивалентной исходной.

Чтобы выделить диаграммы, обладающие таким свойством, назовем узел диаграммы C_3 узлом первого типа, если $b_1 = b_2 = a^{(\lambda)}$ или $b_1 = b_2 = \tilde{a}^{(\lambda)}$, и узлом второго типа - во всех остальных случаях. Таким образом, число эквивалентных выражений для диаг-

раммы C_2 определяется числом узлов первого типа, причем будут также эквивалентны те диаграммы, которые получаются при спаривании операторов, входящих в узлы первого типа, с любыми другими, и отличающиеся перестановками операторов в таком узле.

Тогда графический аналог теоремы Вика для неприводимого тензорного произведения можно сформулировать таким образом, чтобы в результате ее применения возникали только топологически неэквивалентные диаграммы с соответствующим топологическим множителем. Для этого необходимо соблюдать следующие правила проведения элементарного спаривания:

Правило I. Оператор уничтожения (вне зависимости от того, какому узлу он принадлежит) спаривается только с одним из двух операторов рождения, принадлежащих узлу первого типа. Если ни один из этих двух операторов рождения ранее не был спарен, то спаривание проводится с левым оператором; а если оба оператора уничтожения, принадлежащих узлу первого типа, ранее не были спарены, то в элементарном спаривании участвует только первый оператор уничтожения. При этом допускаются только такие спаривания, при которых две линии спариваний, выходящие из того же самого узла второго типа, не пересекаются.

Таким образом, теорему Вика для неприводимых тензорных произведений, графически изображенную диаграммами $C_1 - C_1'''$, можно свести к варианту, приводящему только к топологически неэквивалентным диаграммам и представленному в виде разложения $C_4 - C_4'''$.

Каждая отдельная диаграмма соответствует некоторому типу спаривания (нулевое, однократное, двухкратное и т.д.), причем суммирование в диаграмме ведется по таким спариваниям, которые дают неэквивалентные члены.

Все диаграммы с n -кратными спариваниями могут быть

получены из диаграмм с $(n - 1)$ кратными спариваниями следующим образом:

Однократно спариваются все операторы уничтожения всеми возможными вариантами с операторами рождения, учитывая Правило I, за исключением тех операторов уничтожения, которые стоят правее самого левого уже ранее спаренного оператора уничтожения. Если по Правилу I какому-нибудь члену из диаграммы, принадлежащему к $(n - 1)$ спариванию, не разрешается никакой вариант спаривания (хотя он еще имеет неспаренные операторы) то такой член не участвует при получении диаграмм с n спариваниями.

Множитель $\eta_{ij \dots n}^k$ в диаграммном изображении определен по формуле (4.5), а множитель $\mathcal{D}_{i \dots k}^{(n, m)}$ получаем по формуле:

$$\mathcal{D}_{i \dots k}^{(n, m)} = 2^{n - m}, \quad (4.6)$$

где n - число таких узлов первого типа в диаграмме, в которых хоть один оператор спарен, m - число петель, которые соединяют две вершины первого типа.

Обсудим теперь возможности преобразования операторных выражений, представляемые сформулированным выше графическим аналогом теоремы Вика для неприводимых тензорных произведений операторов вторичного квантования.

Одной из причин широкого применения в ТВ представления операторных выражений в нормальной форме является то, что в такой форме вакуумные средние определяются очень простым образом [123]: ненулевой вклад в такое среднее дадут только полностью спаренные члены. В графическом представлении $C_1 - C_1'''$ это соответствует диаграммам, у которых нет линий, оканчивающихся операторами вторичного квантования. Такие диаграммы с помощью ме-

года, описанного во втором разделе, могут быть сведены к стандартным диаграммам Юдаса и Бандзайтиса, а затем выражены через обычные $3nj$ -коэффициенты.

Как уже указывалось выше, приведение операторов к нормальной форме ведется рекуррентным образом, причем полностью спаренные члены появляются только на последнем этапе. Вычисляя вакуумное среднее с помощью графического представления $C_4 - C_4'''$, легко сформулировать процедуру, сразу приводящую только к таким членам:

В исходной диаграмме, изображающей некоторое неприводимое тензорное произведение без спариваний, берем крайний правый оператор уничтожения и спариваем его всеми возможными однократными спариваниями с операторами рождения согласно Правилу I. Затем повторяем эту же процедуру со следующим (считая справа налево) оператором уничтожения до тех пор, пока не придем к полностью спаренным диаграммам. Те диаграммы, для которых применение такой процедуры согласно Правилу I невозможно, отбрасываются и вклад в вакуумное среднее не дают.

Число членов, определяющих вклад в вакуумное среднее, можно еще более уменьшить, если учесть, что две полностью спаренные диаграммы, переходящие друг в друга при зеркальном отражении, дают одинаковые алгебраические выражения.

В качестве примера рассмотрим вычисление вакуумного среднего неприводимого тензорного произведения, изображенного диаграммой C_5 (рис. 4.2). Применяя однократное спаривание крайнего справа оператора уничтожения, приходим к диаграмме C_6 . Спаривание второго оператора уничтожения приводит к диаграммам C_7 и C_8 . Диаграмма C_1 дальнейшему рассмотрению не подле-

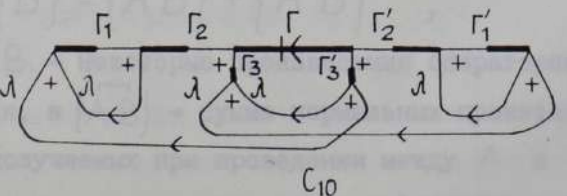
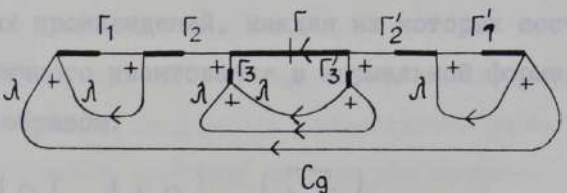
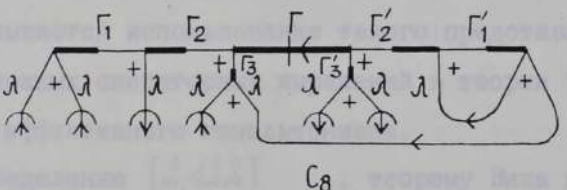
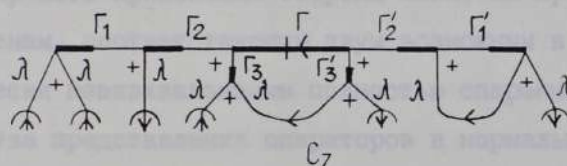
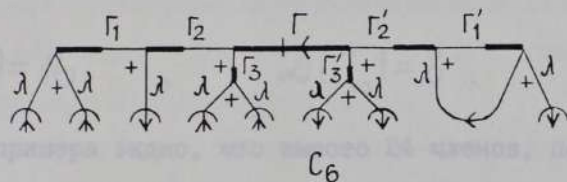
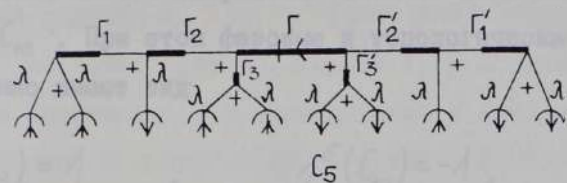


Рис. 4.2. Пример графического вычисления вакуумных средних

жит, т.к. в ней спаривания оператора уничтожения нарушают Правило I. После пятого спаривания окончательно получаем диаграммы C_9 и C_{10} . При этом фазовые и топологические множители соответственно имеют вид

$$\begin{aligned} \eta^5(C_9) &= 1, & \eta^5(C_{10}) &= -1, \\ \mathcal{D}(C_9) &= 16, & \mathcal{D}(C_{10}) &= 8. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Из этого примера видно, что вместо 24 членов, получаемых в результате прямого применения теоремы Вика, мы приходим только к двум членам, соответствующим двум возможным в этом случае топологически неэквивалентным полностью спаренным диаграммам. Преимущества представления операторов в нормальной форме не исчерпываются только определением вакуумных средних. Удобным также оказывается использование такого представления для перемножения сложных операторных выражений в теории возмущений при получении эффективного гамильтониана.

По определению [2, 122], теорему Вика для двух групп операторных произведений, каждая из которых состоит из операторов вторичного квантования в нормальной форме, можно записать следующим образом:

$$\{A\}\{B\} = \{AB\} + \{\overline{AB}\}, \quad (4.8)$$

где A и B - некоторые произведения операторов рождения и уничтожения, а $\{\overline{AB}\}$ - сумма нормальных произведений для операторов, получаемых при проведении между A и B всех возможных (однократных, двухкратных и т.д.) спариваний.

Графический аналог выражений (4.8) для двух неприводимых тензорных произведений операторов вторичного квантования представлен диаграммами $C_{11} - C_{11}'''$ (рис. 4.3). Каждая из диаграмм $C_{11} - C_{11}'''$ соответствует некоторому типу спаривания (включая и член без спариваний), а суммирование в диаграмме ведется по всем возможным спариваниям данного типа. Если в этой сумме выделить только топологически неэквивалентные диаграммы, то каждая такая диаграмма будет входить в сумму с топологическим множителем, определяемым формулой (4.6).

Таким образом, на основе расширенной диаграммной техники Оциса и Бандзайтиса [40] в данном разделе разработан графический метод, позволяющий значительно упростить преобразования тензорных произведений операторов вторичного квантования, появляющихся в различных физических приложениях, в частности, при применении ТВ для многоэлектронного атома.

При этом для теоремы Вика сформулированы правила, позволяющие получать только топологически неэквивалентные диаграммы операторного разложения с соответствующим топологическим множителем. При вычислении вакуумных средних число диаграмм значительно сокращается, причем эффективность такого сокращения значительно возрастает с увеличением числа операторов вторичного квантования, входящих в неприводимое тензорное произведение, что является особенно важным для применения графической техники в высших порядках ТВ.

Так как в изучаемом нами подходе фейнмановские диаграммы просуммированы по одноэлектронным магнитным квантовым числам, то появляется возможность определения такого способа произведения диаграмм, в котором теорема Вика применяется для произведения операторов вторичного квантования, представленных в не-

приводимом тензорном виде (т.е. для спин-угловых частей фермионных диаграмм), а только затем упрощаются каждой из фермионных диаграмм. Тогда остается необходимость в представлении операторных взаимодействий отдельно для каждого из возможных произведений фермионных диаграмм, представляющих вклад в таблицу связи TB в произвольной размерности пространственного ассоциативного алгебраического кольца, полученных в

$$\begin{matrix} \boxed{B_1} & \boxed{B_2} & = & \boxed{B_1} & \boxed{B_2} & + \\ \left\{ \begin{matrix} a_1 & \dots & a_n \end{matrix} \right\} & \left\{ \begin{matrix} a_1 & \dots & a_m \end{matrix} \right\} & & \left\{ \begin{matrix} a_1 & \dots & a_n \\ a_1 & \dots & a_m \end{matrix} \right\} & & \end{matrix}$$

С др. стороны, рассмотрим на эту полученную диаграмму, в таком порядке утрачивается топологическая эквивалентность

$$+ \sum_{i \neq j} \mathcal{Z}_{ij}^1 \begin{matrix} \boxed{B_1} & \boxed{B_2} \\ \left\{ \begin{matrix} a_1 & \dots & a_n \\ a_1 & \dots & a_m \end{matrix} \right\} \\ \leftarrow \begin{matrix} i & j \end{matrix} \end{matrix} + \sum_{ijkl} \mathcal{Z}_{ijkl}^2 \begin{matrix} \boxed{B_1} & \boxed{B_2} \\ \left\{ \begin{matrix} a_1 & \dots & a_n \\ a_1 & j & k & \dots & a_m \end{matrix} \right\} \\ \leftarrow \begin{matrix} i & j & k & l \end{matrix} \end{matrix} + \dots$$

произведений фермионных диаграмм, а не только элементных частей. Отличительность того или иного подхода зависит от сложности и вида рассматриваемой задачи.

Рис. 4.3. Графический аналог выражения (2.20).

методом (в различных размерностях) графического преобразования оператора второго взаимодействия в численные спин-угловые части операторов, соответствующих атомам и молекулам. В последующих разделах, кратко разработана эта методика, получены эффективный гамильтониан атома в первых двух порядках TB = спин-угловую часть.

приводимом тензорном виде (т.е. для спин-угловых частей фейнмановских диаграмм), и только затем устанавливается полный вид фейнмановской диаграммы. Тогда отпадает необходимость в приведении операторных спариваний отдельно для каждого из возможных произведений фейнмановских диаграмм, определяющих вклад в высшие члены ТВ, и появляется возможность частичного использования в этих порядках неприводимых тензорных операторов, полученных в более низких порядках.

С другой стороны, несмотря на простоту получения диаграмм, в таком подходе утрачивается топологическая эквивалентность между фейнмановски ^{МИ} диаграмм и их моментными ^{АМИ} частями. Такая эквивалентность имеет место в традиционном подходе [2, 4, 32, 124, 125], при котором теорема Вика применяется для преобразования произведений фейнмановских диаграмм, а не только их моментных частей. Оптимальность того или иного подхода зависит от сложности и вида рассматриваемой задачи.

Этим разделом заканчивается развитие общей методики (с различными возможными вариантами) графического преобразования операторов вторичного квантования и вычисления спин-угловых частей операторов, соответствующих атомным величинам. В последующих разделах, применяя разработанную выше методику, получим эффективный гамильтониан атома в первых двух порядках ТВ и вычислим его спин-угловую часть.

5. Графический вид эффективного гамильтониана атома в первых двух порядках стационарной теории возмущений [60, 64-67]

Этот раздел посвящен получению графического представления эффективного гамильтониана атома в первых двух порядках ТВ в неприводимом тензорном виде. Как было отмечено в предыдущем разделе, фейнмановские диаграммы можно перемножать двумя способами. Так как в изучаемом случае не появляется значительного количества перемножаемых фейнмановских диаграмм и среди них нет диаграмм с большим числом разомкнутых линий, то целесообразно отказываться от возможности использования топологической эквивалентности фейнмановских диаграмм и их моментных частей. Поэтому в дальнейшем будем развигать такой подход, в котором спин-угловая часть одночастичного возмущения описывается в виде оператора (3.19), а ряд ТВ - неприводимыми тензорными произведениями операторов V и F в форме (3.18), (3.7).

В первом разделе была подробно описана методика получения эффективного гамильтониана атома, исходя из обобщенного уравнения Блоха, которую мы будем применять для определения неприводимого тензорного вида эффективного гамильтониана в первых двух порядках ТВ. Рассмотрим для этого группу дискретных энергетических уровней E_m , где $m=1, \dots, d$, с соответствующими им собственными векторами ψ_m , являющимися решениями уравнения Шредингера для N -электронного гамильтониана атома (в ат. ед.).

$$H = H_0 + V + F = \sum_{i=1}^N h(i) + \sum_{i>j}^N \frac{1}{r_{ij}} + \sum_{i=1}^N f_i, \quad (5.1)$$

где H_0 - невозмущенный гамильтониан, выраженный суммой одно-электронных операторов $h(i)$, представляющих кинетическую и потенциальную энергии электрона относительно ядра, $V = \sum_{i>j}^N \frac{1}{r_{ij}}$ - оператор электростатического взаимодействия между электронами, а $F = \sum_{i=1}^N f_i$ - оператор, отвечающий взаимодействиям, имеющим одночастичный характер. Предложим, что V и F может считаться малым возмущением по отношению к H_0 , и общий оператор возмущения обозначим

$$H_p = V + F \quad (5.2)$$

Конкретный вид эффективного гамильтониана $H_{эф}$ существенно зависит от выбора модельного пространства (P - пространства), в котором он действует [2]. Как и в работе [2] мы рассмотрим наиболее общий случай, когда оператор $H_{эф}$ определен в расширенном модельном пространстве [2], построенном из d собственных функций невозмущенного гамильтониана H_0 , соответствующих конфигурациям со всевозможными распределениями электронов между незаполненными оболочками. В этом случае одноэлектронные спин-орбитали $|i\rangle \equiv |n_i l_i m_l m_s\rangle$ (собственные функции оператора $h(i)$), из которых строятся конфигурации, определяющие модельное и дополнительное к модельному (Q - пространство) пространства, как обычно [34], разобъем на три совокупности. Обозначим эти совокупности соответственно буквами F, F', G . В совокупность F включим функции $|m\rangle$ описывающие заполненные оболочки, встречающиеся во всех конфигурациях, определяющих P -пространство, а в сово-

купность F' - спин-орбитали $|m\rangle$, соответствующие незаполненным оболочкам тех же конфигураций. Из спин-орбиталей $|m\rangle$, не принадлежащих к F и F' и используемых при составлении функции возбужденных конфигураций (т.е. конфигураций, определяющих Q -пространство), путем замены в конфигурациях, определяющих P -пространство, спин-орбиталей $|j\rangle \in F$ и F' на $|m\rangle$, составим G -совокупность. Из такого подразделения вытекают важные свойства модельных функций ψ_m ($m=1, 2, \dots, d$), определенных как проекции точных волновых функций на P -пространство и представляющих собой линейные комбинации, составленные из конфигураций, принадлежащих P -пространству,

$$a_b \psi_m = 0 \quad (5.3)$$

и

$$a_z^+ \psi_m = 0, \quad (5.4)$$

где a_b и a_z^+ - операторы рождения и уничтожения одноэлектронных состояний $|b\rangle \in F$ и $|z\rangle \in G$, соответственно. Условимся буквами a, b, c, d указывать, что рассматриваемые величины характеризуются квантовыми числами совокупности F , а буквами m, n, p, q и z, s, t, v - совокупностей F' и G соответственно, и, наконец, буквами g, h, i, j - любой из совокупностей F, F', G . Свойства (5.3), (5.4) модельных функций ψ_m позволяют представить первые два порядка эффективного гамильтониана $H_{эф}$ (см. формулу (1.16)) в следующем виде:

$$H_{эф}^{(1)} = P H_P P = PVP + F_{эф}^{(1)}, \quad (5.5)$$

$$H_{\text{эф}}^{(2)} = P H_{\text{г}} \Omega^{(1)} = H_{\text{эф},V}^{(2)} + F_{\text{эф}}^{(2)}, \quad (5.6)$$

где

$$F_{\text{эф}}^{(1)} = P F P, \quad (5.7)$$

$$H_{\text{эф},V}^{(2)} = P V \Omega_V^{(1)}, \quad (5.8)$$

$$F_{\text{эф}}^{(2)} = P V \Omega_F^{(1)} + P F \Omega_V^{(1)} + P F \Omega_F^{(1)}. \quad (5.9)$$

Здесь P - проекционный оператор на модельное пространство, а оператор $\Omega^{(1)}$ представляется в виде двух членов

$$\Omega^{(1)} = \Omega_V^{(1)} + \Omega_F^{(1)}, \quad (5.10)$$

где индекс F обозначает часть оператора Ω , которая зависит от F , а индекс V - ту часть, которая зависит от V . Эти части определены формулами (5.12) и (5.13).

Оператор электростатического взаимодействия V в (5.5) и (5.6), если рассматривать его во вторичноквантованной форме, представляется суммой

$$V = V_0 + V_1 + V_2, \quad (5.11)$$

где в первом члене V_0 отсутствуют операторы рождения и уничтожения, а члены V_1 и V_2 содержат соответственно одну и две пары a_j, a_i^+ операторов рождения и уничтожения. Аналогично оператор F состоит из двух членов F_0 и F_1 , где в первом

отсутствуют операторы рождения и уничтожения, а во втором - имеется их одна пара. В нашем подходе при рассмотрении операторов $H_{эф}^{(1)}$ и $H_{эф}^{(2)}$ для операторов вторичного квантования, характеризуемых квантовыми числами совокупностей F и G , мы используем нормальное произведение, определенное согласно работе [2]. Это обстоятельство позволяет применять к этим операторам без изменения обобщенную теорему Вика (см., например, [122]). Исходя из обобщенного уравнения Блоха, первый порядок волнового оператора Ω можно представить (см. [2]) так:

$$\Omega_V^{(1)} = \Omega_{V1}^{(1)} + \Omega_{V2}^{(1)} = Q \sum_{i,j} \frac{1}{\epsilon_i - \epsilon_j} V_1 P + Q \sum_{i,j,g,h} \frac{1}{\epsilon_i + \epsilon_h - \epsilon_j - \epsilon_g} V_2 P, \quad (5.12)$$

$$\Omega_F^{(1)} = \Omega_{F1}^{(1)} = Q \sum_{i,j} \frac{1}{\epsilon_i - \epsilon_j} F_1 P, \quad (5.13)$$

где ϵ_i - собственные значения оператора $h(i)$, Q - проекционный оператор на Q -пространство.

Таким образом, выражения (5.5), (5.6) будут исходными для получения эффективного гамильтониана атома в первых двух порядках ТВ в неприводимом тензорном виде.

Теперь, на основе материала, изложенного в разделах 2 и 3, определим топологическую эквивалентность фейнмановских диаграмм, просуммированных по одноэлектронным магнитным квантовым числам, и ее моментных частей, что очень важно в ТВ.

Согласно графической технике раздела 2, оператор $\bar{W}(n; \ell; n; \ell)$ изобразим диаграммой \mathcal{D}_1 (см. рис. 5.1). Два индекса k_1, k_2 на диаграмме обозначают, что она фактически представляет собой две такие диаграммы (по одной для орбитальных и спиновых ран-

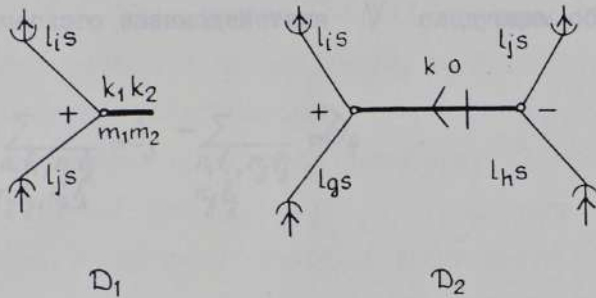


Рис. 5.1. Графическое изображение операторов $W^{(k_1 k_2)}$ и $[W_x^{(k_0)} W^{(k_0)}]^{(00)}$



Рис. 5.2. Некоторые типы фейнмановских диаграмм, представляющих оператор электростатического взаимодействия

гов).

Следуя формулам (3.13) и (3.18), представим оператор электростатического взаимодействия V следующим образом:

$$V = \sum_{\substack{n_i l_i, n_j l_j \\ n_g l_g, n_h l_h}} \mathcal{D}_3 - \sum_{\substack{n_i l_i, n_j l_j \\ n_g l_g}} \mathcal{D}_4. \quad (5.14)$$

Здесь

$$\mathcal{D}_3 = \sum_k \frac{1}{\sqrt{[k]}} X_k(n_i l_i, n_g l_g, n_j l_j, n_h l_h) [W^{(k_0)}(n_i l_i, n_g l_g) \times W^{(k_0)}(n_j l_j, n_h l_h)]^{(00)}, \quad (5.15)$$

а

$$\mathcal{D}_4 = \sum_{n_j l_j} \frac{1}{\sqrt{2[l_i]}} X_k(n_i l_i, n_j l_j, n_g l_g, n_h l_h) W^{(00)}(n_i l_i, n_h l_h). \quad (5.16)$$

Имея в виду, что тензорное произведение в (5.15), согласно графической технике раздела 2, представляется диаграммой \mathcal{D}_2 (см. рис. 5.1), легко ввести графическое изображение для \mathcal{D}_3 (см. рис. 5.2). Условимся свободным концам диаграммы \mathcal{D}_3 сопоставлять операторы рождения $a^{(l_s)}$ и уничтожения $\tilde{a}^{(l_s)}$ (см. второй раздел) в неприводимом тензорном произведении, линиям со стрелками, идущими из вершины (узла), сопоставим операторы рождения, а линиям со стрелками, направленными к вершине, — операторы уничтожения. Волнистой линии сопоставим множитель $[\frac{l_i s_i, l_j s_j}{k}]^{\frac{1}{2}} R_k(n_i l_i, n_j l_j, n_g l_g, n_h l_h)$, а каждому вертексу (вершине) диаграммы — приведенный матричный элемент оператора сферической функции $[l_i \| C^{(k)} \| l_j]$. В нашем подходе операции спари-

вания [2] , а также члену, приходящему при коммутации операторов рождения и уничтожения и содержащему дельта-символ Кронекера $\delta_{i,k}$ (см. формулы (2.13)), графически сопоставляется соединение свободных концов линий, соответствующих спариваемым или переставляемым операторам. Так, например, если в выражении (5.15) произвести коммутацию операторов $\tilde{a}^{(l_j s)}$ и $a^{(l_j s)}$ и оставить только член с δ_{l_j, l_j} , то получим \mathcal{D}_4 (см. формулу (5.16)). Графически такой операции будет соответствовать соединение на диаграмме \mathcal{D}_3 линий, характеризуемых квантовыми числами $n_g l_g$ и $n_j l_j$, после чего получаем диаграмму \mathcal{D}_4 (см. рис. 5.2). Учитывая алгебраические выражения (5.15) и (5.16) для диаграмм \mathcal{D}_3 и \mathcal{D}_4 , нетрудно вывести правило, которое определяет соответствие между порядком расположения операторов рождения и уничтожения в алгебраическом выражении и конкретным видом диаграммы: 1) операторы, относящиеся к одной вершине (узлу), в алгебраическом выражении, для рассматриваемой диаграммы, стоят рядом, составляя пару, которая определяет неприводимое тензорное произведение типа (2.9); 2) расположение пар слева направо соответствует расположению вершин на диаграмме, относящихся к этим парам; 3) причем, если у узла диаграммы не поставлен знак, то первым в паре стоит оператор рождения.

Если произвести в (5.15) коммутацию операторов $a^{(l_k s)}$ и $\tilde{a}^{(l_k s)}$ и рассматривать только член с δ_{l_j, l_k} , то получим алгебраическое выражение

$$\mathcal{D}_5 = \sum_{n_j l_j k} \sqrt{[l_j, s]} \delta_{k,0} X_k(n_i l_i, n_g l_g, n_j l_j, n_j l_j) W^{(00)}(n_i l_i, n_g l_g) \quad (5.17)$$

и соответствующую диаграмму \mathcal{D}_5 . Итак, мы определили графический вид оператора электростатического взаимодействия. Введенные нами диаграммы \mathcal{D}_3 , \mathcal{D}_4 и \mathcal{D}_5 не зависят (в отличие от работ [2, 45]) от проекций m_ℓ , m_s одноэлектронных моментов ℓ и s и представляют собой скалярные N -электронные операторы. Они фактически соответствуют сумме фейнмановских диаграмм по одноэлектронным магнитным квантовым числам. Спин-орбитальные части рассматриваемых диаграмм представляются топологически эквивалентными диаграммами (раздел 2), изображающими неприводимые тензорные произведения операторов рождения и уничтожения.

Теперь определим графический вид первых двух порядков эффективного гамильтониана, используя полученные выше диаграммы \mathcal{D}_3 , \mathcal{D}_4 , \mathcal{D}_5 , а также диаграмму B_1 , которая определена в третьем разделе. Следуя работе [34], операторы рождения и уничтожения, принадлежащие совокупности $G(F)$ и характеризующие частичные (дырочные) состояния, изобразим линиями со стрелками, направленными вверх (вниз) и двойными стрелками, если операторы принадлежат совокупности F' . Введем также обозначения для сумм диаграмм (см. рис. 5.3). На свободных концах диаграмм рис. 5.3 символ \blacktriangle означает, что эти линии могут характеризоваться квантовыми числами любой из совокупностей F , F' , G . Используя введенные выше обозначения и принимая во внимание соотношения (5.5), (5.15) и (5.16), оператор $H_{эдр}^{(1)}$ можно представить суммой диаграмм (см. рис. 5.4).

В выражении (5.5) появляются члены, вносящие одинаковый вклад и изображаемые одинаковыми диаграммами. В дальнейшем сумме таких членов будет сопоставляться одна диаграмма, в оп-

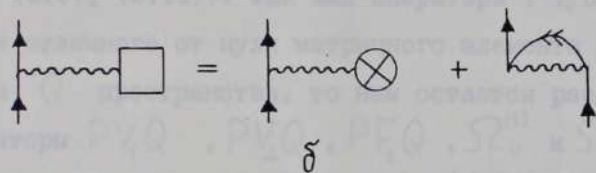
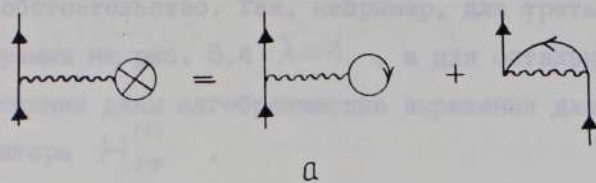


Рис. 5.3. Некоторые графические обозначения для сумм диаграмм

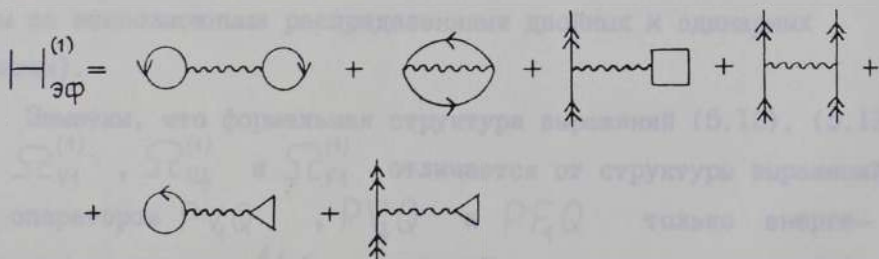


Рис. 5.4. Диаграммы, изображающие эффективный оператор $H_{эф}^{(1)}$

ределение которой вводится весовой множитель $\frac{1}{\lambda}$, отражающий это обстоятельство. Так, например, для третьей, пятой и шестой диаграммы на рис. 5.4 $\lambda=1$, а для остальных $\lambda=2$. В приложении даны алгебраические выражения для всех диаграмм оператора $H_{эф}^{(1)}$.

Перейдем теперь к рассмотрению оператора $H_{эф}^{(2)}$ (см. формулы (5.6), (5.11)). Так как операторы PV_0Q , PF_0Q не имеют отличного от нуля матричного элемента между функциями P и Q пространства, то нам остается рассмотреть только операторы PV_1Q , PV_2Q , PF_1Q , $\Omega_V^{(1)}$ и $\Omega_F^{(1)}$. Используя графическое изображение оператора V (5.14), легко убедиться, что для операторов PV_1Q , PV_2Q и PF_1Q отличный от нуля вклад в $H_{эф}^{(2)}$ дают лишь диаграммы, представленные на рис. 5.5 а, б, в. (Для краткости диаграммы с непроставленными на свободных линиях стрелками обозначают сумму такого типа диаграмм со всевозможными распределениями двойных и одинарных стрелок).

Заметим, что формальная структура выражений (5.12), (5.13) для $\Omega_{V1}^{(1)}$, $\Omega_{V2}^{(1)}$ и $\Omega_{F1}^{(1)}$ отличается от структуры выражений для операторов PV_1Q , PV_2Q и PF_1Q только энергетическим множителем $1/\Delta\varepsilon$, который мы включили в определение радиальной части операторов $\Omega_{V1}^{(1)}$, $\Omega_{V2}^{(1)}$ и $\Omega_{F1}^{(1)}$. Тогда в первом порядке волновой оператор Ω имеет графический вид, представленный на рис. 5.5 г, д, е.

Отдельные члены $H_{эф}^{(2)}$ получаем, перемножая диаграммы, соответствующие операторам PV_1Q , PV_2Q , PF_1Q , $\Omega_{V1}^{(1)}$, $\Omega_{V2}^{(1)}$ и $\Omega_{F1}^{(1)}$. Графически такое умножение осуществим в два этапа:

1) для операторов рождения и уничтожения, принадлежащих

$$PV_1Q = \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3}$$

a

$$PF_1Q = \text{Diagram 4} + \text{Diagram 5}$$

δ

$$PV_2Q = \text{Diagram 6} + \text{Diagram 7} + \text{Diagram 8} + \text{Diagram 9}$$

β

$$\Omega_{V_1}^{(1)} = \text{Diagram 10} + \text{Diagram 11} + \text{Diagram 12}$$

z

$$\Omega_{F_1}^{(1)} = \text{Diagram 13} + \text{Diagram 14}$$

g

$$\Omega_{V_2}^{(1)} = \text{Diagram 15} + \text{Diagram 16} + \text{Diagram 17} + \text{Diagram 18}$$

e

Рис. 5.5. Диаграммное представление операторов PV_1Q (a), PF_1Q (δ), PV_2Q (β), $\Omega_{V_1}^{(1)}$ (z), $\Omega_{F_1}^{(1)}$ (g), $\Omega_{V_2}^{(1)}$ (e)

совокупностям F и G , применим обобщенную теорему Вика [2];

2) полученные диаграммы (которые теперь содержат операторы рождения и уничтожения электронов незаполненных оболочек, т.е. принадлежат совокупности F') приведем к стандартному виду. Условимся, что диаграмма имеет стандартный вид, если операторы рождения и уничтожения, относящиеся к одной вершине (узлу) или соединенные внутренними электронными линиями в соответствующем этой диаграмме алгебраическом выражении, стоят рядом. Приведение к стандартному виду осуществляется преобразованием диаграммы, заключающимся в изменении порядка относительно ^{го} расположения вершин диаграммы; при этом изменению взаимного расположения соседних вершин - перестановке вершин - соответствует перестановка в алгебраическом выражении операторов рождения и уничтожения, относящихся к этим вершинам. При этом следует учесть, что при переносе вершин появляются дополнительные диаграммы, если антикоммутатор переставляемых операторов не равен нулю. Как отмечалось, такая диаграмма получается соединением концов свободных линий, соответствующих коммутирующим операторам.

Рассмотрим, например, произведение двух диаграмм, характеризующих отдельные члены операторов PV_2Q и $\Omega_{V_2}^{(1)}$ (см. рис. 5.6). Применяя теорему Вика [2] для операторов из F и G совокупностей, получаем диаграмму \mathcal{D}_7 (см. рис. 5.6). Для приведения этой диаграммы к стандартному виду необходимо поменять местами вершину Γ_4 с вершинами Γ_3 и Γ_2 . При перестановке вершины Γ_4 с Γ_3 появляется дополнительная диаграмма \mathcal{D}_8 (см. рис. 5.6). Окончательно находим, что рассматриваемое произведение диаграмм выражается через сумму диаграмм

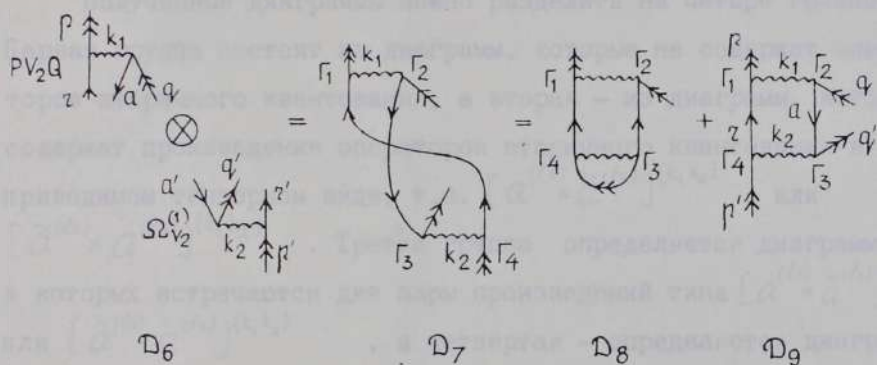


Рис. 5.6. Пример перемножения диаграмм PV_2Q и $\Omega_{V_2}^{(1)}$

\mathcal{D}_8 и \mathcal{D}_9 .

Перемножая таким образом все диаграммы, соответствующие операторам PVQ , PFQ и $\Omega_V^{(1)}$, $\Omega_F^{(1)}$, находим графическое изображение $H_{эф}^{(2)}$ (см. рис. 5.7-5.8).

Полученные диаграммы можно разделить на четыре группы.

Первая группа состоит из диаграмм, которые не содержат операторов вторичного квантования, а вторая - из диаграмм, которые содержат произведения операторов вторичного квантования в неприводимом тензорном виде, т.е. $[a^{(\ell_1)} \times \tilde{a}^{(\ell_2)}]^{(k_1, k_2)}$ или $[\tilde{a}^{(\ell_1)} \times a^{(\ell_2)}]^{(k_1, k_2)}$. Третья группа определяется диаграммами, в которых встречаются две пары произведений типа $[a^{(\ell_1)} \times \tilde{a}^{(\ell_2)}]^{(k_1, k_2)}$ или $[\tilde{a}^{(\ell_1)} \times a^{(\ell_2)}]^{(k_1, k_2)}$, а четвертая - определяется диаграммами, в которых имеются три пары. Таким образом, получено в этом разделе графическое представление неприводимого тензорного вида эффективного гамильтониана атома в первых двух порядках ТВ (см. рис. 5.4, 5.7, 5.8). Надо отметить, что здесь мы не рассматривали проблем, связанных с разложением эффективного оператора по связным диаграммам [2, 32, 125], так как в используемом подходе для первых двух порядков ТВ они не возникают.

Рис. 5.9. Диаграммы, изображающие второй порядок эффективного оператора $H_{эф}^{(2)}$.

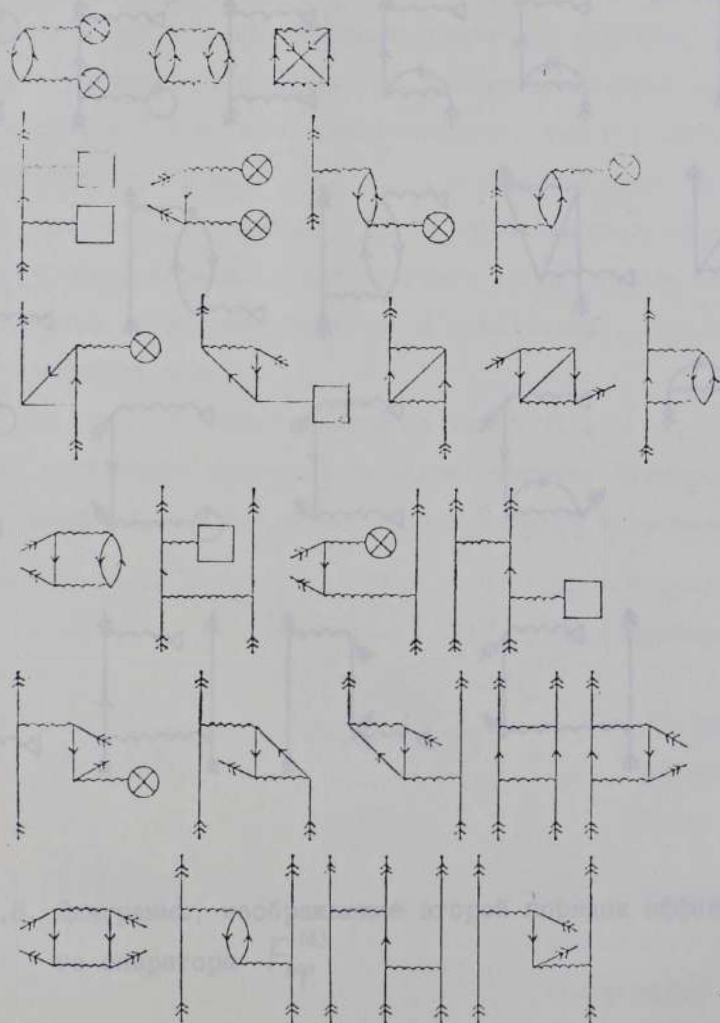


Рис. 5.7. Диаграммы, изображающие второй порядок эффективного оператора $H_{эф,ν}^{(2)}$

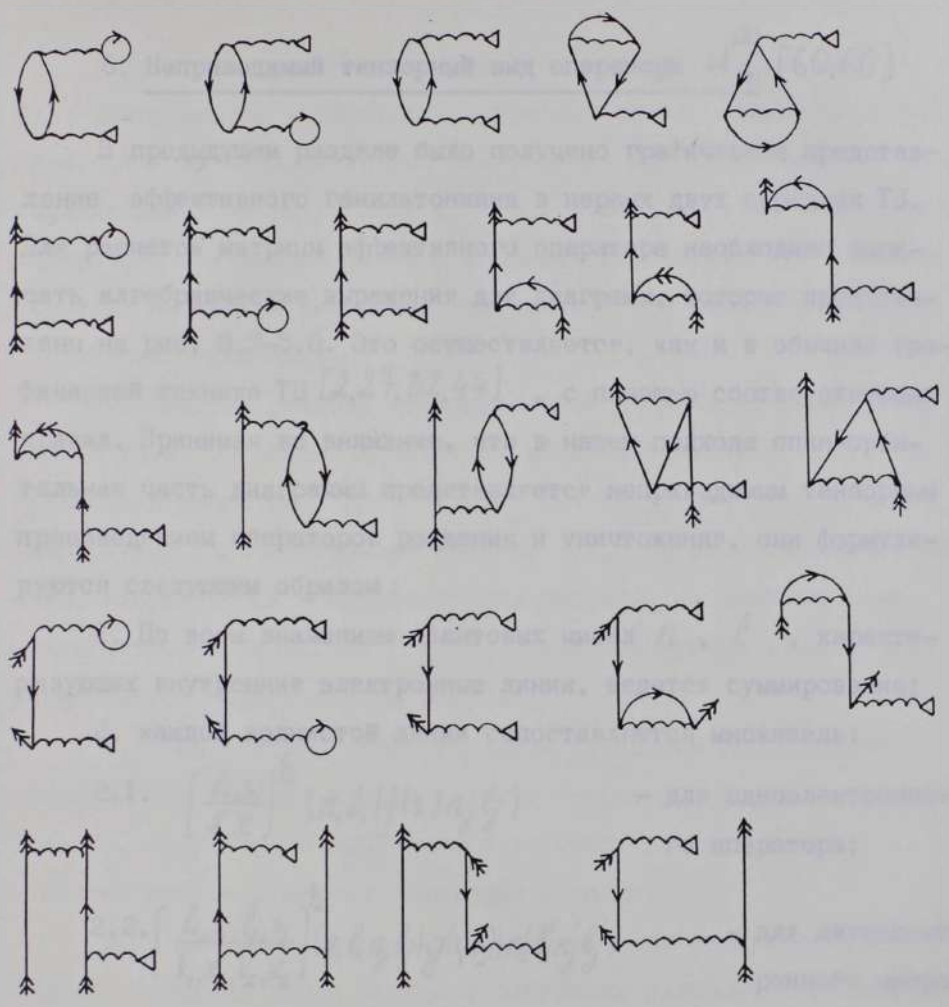


Рис. 5.8. Диаграммы, изображающие второй порядок эффективно-го оператора $F_{эф}^{(2)}$

3. Если диаграмма состоит из L элементарных диаграмм, где L - число элементарных частей, входящих в диаграмму, A - число внутренних дробных линий и n - число внешних двойных стрелок, направленных вниз.

6. Неприводимый тензорный вид оператора $H_{эф}^{(2)}$ [60,66]

В предыдущем разделе было получено графическое представление эффективного гамильтониана в первых двух порядках ТВ. Для расчетов матрицы эффективного оператора необходимо записать алгебраические выражения для диаграмм, которые представлены на рис. 5.7-5.8. Это осуществляется, как и в обычной графической технике ТВ [2,27,32,44], с помощью соответствующих правил. Принимая во внимание, что в нашем подходе спин-орбитальная часть диаграммы представляется неприводимым тензорным произведением операторов рождения и уничтожения, они формулируются следующим образом:

1. По всем значениям квантовых чисел n, l , характеризующих внутренние электронные линии, ведется суммирование;

2. каждой волнистой линии сопоставляется множитель:

2.1. $\left[\frac{l_i, s_i}{\mathcal{L}, \mathcal{L}} \right]^{1/2} (n_i l_i | f(r) | n_j l_j)$ - для одноэлектронного оператора;

2.2. $\left[\frac{l_i, s_i, l_j, s_j}{k_1, \mathcal{L}_1, k_2, \mathcal{L}_2} \right]^{1/2} (n_i l_i n_j l_j | g(r_1, r_2) | n_i' l_i' n_j' l_j')$ - для двухэлектронного оператора;

2.3. $\left[\frac{l_i, s_i, l_j, s_j}{k} \right]^{1/2} R_k(n_i l_i n_j l_j; n_h l_h n_h l_h)$ - для оператора электростатического взаимодействия;

3. всей диаграмме сопоставляется фазовый множитель $(-1)^{c+h}$, где c - число замкнутых петель электронной линии на диаграмме, h - число внутренних дырочных линий и внутренних линий с двойными стрелками, направленными вниз;

4. всей диаграмме сопоставляется весовой множитель $\frac{1}{\lambda}$.

Для диаграмм, не содержащих внутренних линий с двойными стрелками, $\lambda = 2$, если диаграмма симметрична при одновременном опрокидывании всех ее вершин, и $\lambda = 1$ - если нет. Для диаграмм, содержащих внутренние линии с двойными стрелками, $\frac{1}{\lambda}$ равен весовому множителю диаграммы, получаемой при размыкании линий с двойными стрелками;

5. каждому разрезу горизонтальной линией диаграммы между любыми двумя соседними волнистыми линиями сопоставляется энергетический множитель $\frac{1}{D}$, где $D = (\epsilon_{\text{вход}} - \epsilon_{\text{выход}})$, т.е. равно сумме одноэлектронных энергий $\epsilon_{\text{вход}}$, сопоставляемых линиям, направленным к пересекаемому разрезу, за вычетом суммы одноэлектронных энергий $\epsilon_{\text{выход}}$, соответствующих линиям, направленным от пересекаемого разреза;

6. спин-угловой части исходной диаграммы сопоставляется неприводимое тензорное произведение операторов рождения и уничтожения, графическое изображение которого для орбитальных и спиновых рангов строится следующим образом:

6.1. рисуется диаграмма, топологически эквивалентная исходной, и каждая линия исходной диаграммы заменяется линией, соответствующей определенному рангу;

6.2. свободные линии заменяются графическими элементами, представленными на рис. 6.1;

6.3. внутренние электронные линии переносятся без изменения;

6.4. волнистые линии, соответствующие взаимодействиям, заменяются графическими элементами, представленными на рис.

6.2-6.3. В случае, когда волнистая линия соответствует одно-

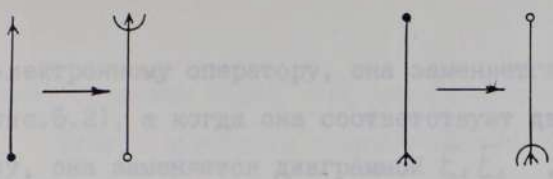


Рис. 6.1. Соответствие между графическими элементами свободных линий и их моментными частями

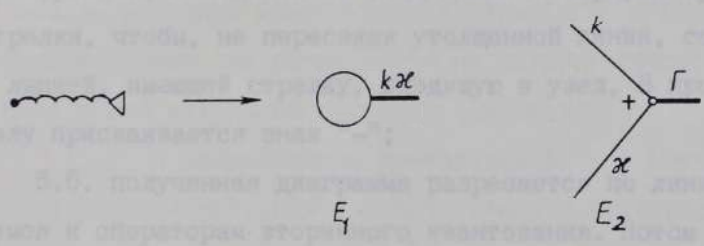


Рис. 6.2. Соответствие между линией взаимодействия одночастичного оператора и моментной частью

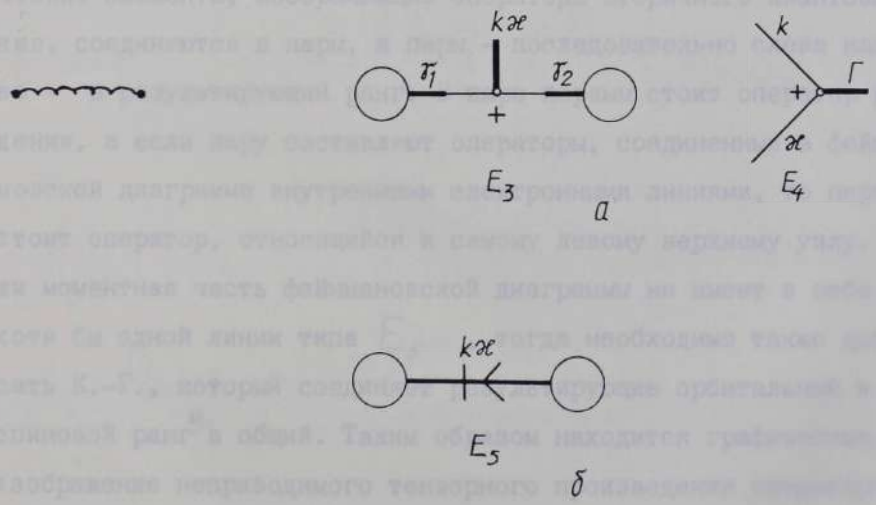


Рис. 6.3. Соответствие между линией взаимодействия двухчастичного оператора и ее моментной частью :

- а - для оператора ранга Γ ,
- б - для скалярного оператора

электронному оператору, она заменяется диаграммой $E_1 E_2$ (см. рис.6.2), а когда она соответствует двухэлектронному оператору, она заменяется диаграммой $E_3 E_4$, а когда соответствует оператору энергии электростатического взаимодействия электронов - диаграммой E_5 ;

6.5. узлы без знаков обеспечиваются знаком "+", если линию со стрелкой, выходящей из узла можно повернуть против часовой стрелки, чтобы, не пересекая утолщенной линии, совместить ее с линией, имеющей стрелку, входящую в узел, В противном случае узлу присваивается знак "-";

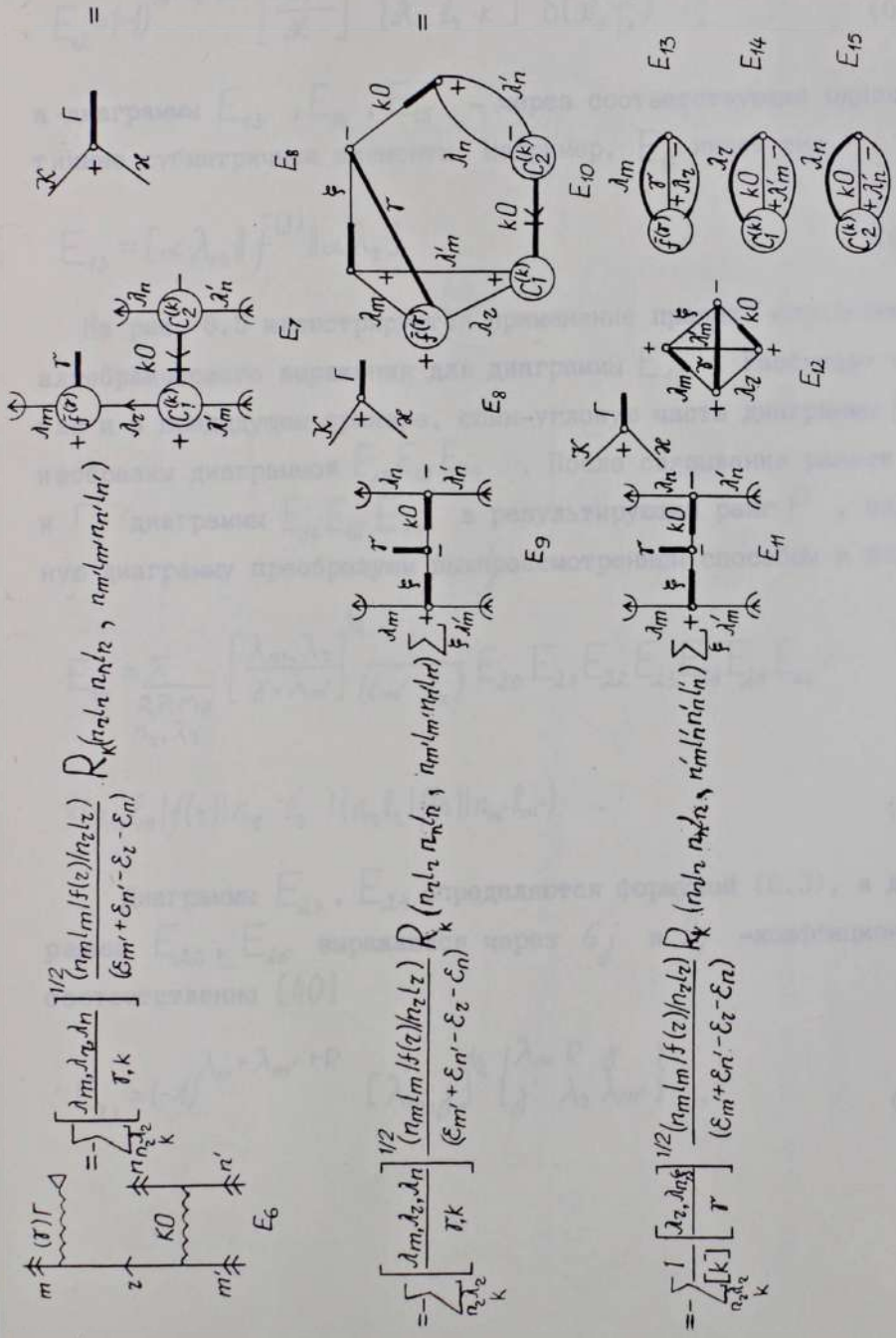
6.6. полученная диаграмма разрезается по линиям, относящимся к операторам вторичного квантования. Потом посредством диаграммы, изображающей обобщенный коэффициент К.-Г., графические элементы, изображающие операторы вторичного квантования, соединяются в пары, а пары - последовательно слева направо - в результирующий ранг. В паре первым стоит оператор рождения, а если пару составляют операторы, соединенные в фейнмановской диаграмме внутренними электронными линиями, то первым стоит оператор, относящийся к самому левому верхнему узлу. Если моментная часть фейнмановской диаграммы не имеет в себе хотя бы одной линии типа E_5 , тогда необходимо также дописать К.-Г., который соединяет результирующие орбитальный и спиновой ранг^и в общий. Таким образом находится графическое изображение неприводимого тензорного произведения операторов вторичного квантования. Оставшиеся после разрезания части исходной диаграммы закрываются таким же обобщенным коэффициентом К.-Г., каким было составлено неприводимое тензорное произведение. В итоге получаем матрицу преобразования, которую, применяя графическую технику, развитую во втором и третьем разделе

лах, выражаем через $3nj$ -коэффициенты.

Теперь приступим к рассмотрению трех примеров, которые иллюстрируют применение вышесформулированных правил. Сначала рассмотрим диаграмму E_6 (см. рис. 6.4), Принимая во внимание графические изображения оператора электростатического взаимодействия V (см. рис. 6.3) и оператора F (см. рис. 6.2), получаем исходную моментную диаграмму E_7 . После несложных преобразований она распадается на матрицу преобразования E_{12} , приведенные матричные элементы операторов $f^{(s)}$, $c^{(k)}$, $E_{13} - E_{15}$ и неприводимое произведение E_{11} операторов рождения и уничтожения, действующих только в пространстве волновой функции незаполненных оболочек. Таким образом получаем следующее выражение:

$$\begin{aligned}
 E_6 &= -\frac{1}{2} \sum_{n_2 \lambda_2 k} \left[\frac{\lambda_m, \lambda_2, \lambda_n}{\mathcal{A}, \mathcal{L}, k} \right]^{1/2} \frac{(n_n l_n | f^{(s)} | n_2 l_2)}{(\epsilon_m + \epsilon_n - \epsilon_2 - \epsilon_n)} E_7 E_8 R_k(n_2 l_2 n_n l_n, n_m l_m n_n l_n) = \\
 &= -\frac{1}{2} \sum_{\substack{n_2 \lambda_2 \\ k \varphi}} \left[\frac{\lambda_m, \lambda_2, \lambda_n}{\mathcal{A}, k} \right]^{1/2} \frac{(n_n l_n | f^{(s)} | n_2 l_2)}{(\epsilon_m + \epsilon_n - \epsilon_2 - \epsilon_n)} E_9 E_7 E_{10} R_k(n_2 l_2 n_n l_n, n_m l_m n_n l_n) = \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{n_2 \lambda_2 \\ k \varphi}} \left[\frac{\lambda_2, \lambda_n, \varphi}{\mathcal{A}} \right]^{1/2} \frac{(n_n l_n | f^{(s)} | n_2 l_2)}{(\epsilon_m + \epsilon_n - \epsilon_2 - \epsilon_n)} E_8 E_{11} E_{12} E_{13} E_{14} E_{15} R_k(n_2 l_2 n_n l_n, n_m l_m n_n l_n).
 \end{aligned} \tag{6.1}$$

Алгебраические выражения для диаграмм E_{12} , E_{13} , E_{14} , E_{15} определим согласно [40]. Диаграмма E_{12} выражается через $6j$ -коэффициент следующим образом:



$$= - \sum_{\substack{\alpha_2 \lambda_2 \\ k}}^{n_2} \left[\frac{\lambda_{2m} \lambda_{2\alpha} \lambda_n}{T, k} \right]^{1/2} \frac{(n_{m1} l_m | f(z) | n_2 l_2)}{(\varepsilon_{m1} + \varepsilon_{n1} - \varepsilon_2 - \varepsilon_n)} R_k(n_2 l_2, n_{n1} l_n, n_{m1} l_m, n_{n2} l_n)$$

$$= - \sum_{\substack{\alpha_2 \lambda_2 \\ k}}^{n_2} \left[\frac{\lambda_{2m} \lambda_2 \lambda_n}{T, k} \right]^{1/2} \frac{(n_{m1} l_m | f(z) | n_2 l_2)}{(\varepsilon_{m1} + \varepsilon_{n1} - \varepsilon_2 - \varepsilon_n)} R_k(n_2 l_2, n_{n1} l_n, n_{m1} l_m, n_{n2} l_n)$$

$$= - \sum_{\substack{\alpha_2 \lambda_2 \\ k}}^{n_2} \left[\frac{1}{[k]} \frac{\lambda_{2m} \lambda_{2\alpha} \lambda_n}{T} \right]^{1/2} \frac{(n_{m1} l_m | f(z) | n_2 l_2)}{(\varepsilon_{m1} + \varepsilon_{n1} - \varepsilon_2 - \varepsilon_n)} R_k(n_2 l_2, n_{n1} l_n, n_{m1} l_m, n_{n2} l_n)$$

Рис. 6.4. Пример определения алгебраического выражения для диаграммы, представляющей отдельный член оператора $PFS_v^{(1)}$

$$E_{12} = (-1)^{l_m + l_2 + K} \left[\frac{l_{m,k}}{\mathcal{X}} \right]^{\frac{1}{2}} \left\{ \begin{matrix} l_{m'} & \mathcal{Y} & l_m \\ \mathcal{X} & l_2 & k \end{matrix} \right\} \delta(\mathcal{X}, \mathcal{Y}) \quad , \quad (6.2)$$

а диаграммы E_{13} , E_{14} , E_{15} - через соответствующие одночастичные субматричные элементы. Например, E_{13} имеет вид

$$E_{13} = [\alpha \lambda_m \| f^{(\delta)} \| \alpha \lambda_2] \quad . \quad (6.3)$$

На рис. 6.5 иллюстрируется применение правил определения алгебраического выражения для диаграммы E_{16} . Рассуждая также как и в предыдущем примере, спин-угловую часть диаграммы E_{16} изобразим диаграммой $E_{17} E_{18} E_{19}$. После связывания рангов Γ и Γ' диаграммы $E_{17} E_{18} E_{19}$ в результирующий ранг P , полученную диаграмму преобразуем выше рассмотренным способом и получим:

$$E_{16} = \sum_{\substack{R, P, M, P \\ n_2, \lambda_2}} \left[\frac{\lambda_{m_2} \lambda_2}{\gamma, \lambda_{m'}} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{1}{(\epsilon_{m'} - \epsilon_2)} E_{20} E_{21} E_{22} E_{23} E_{24} E_{25} E_{26} \times \\ \times (n_2 l_m | f(z) | n_2 l_2) (n_2 l_2 | f(z) | n_{m'} l_{m'}) \quad . \quad (6.4)$$

Диаграммы E_{23} , E_{24} определяются формулой (6.3), а диаграммы E_{22} , E_{25} выражаются через ϵ_j и g_j - коэффициенты соответственно [40]

$$E_{22} = (-1)^{\lambda_m + \lambda_{m'} + R} \left[\lambda_{m'} \gamma \right]^{\frac{1}{2}} \left\{ \begin{matrix} \lambda_m R \gamma \\ \gamma' \lambda_2 \lambda_{m'} \end{matrix} \right\} \quad , \quad (6.5)$$

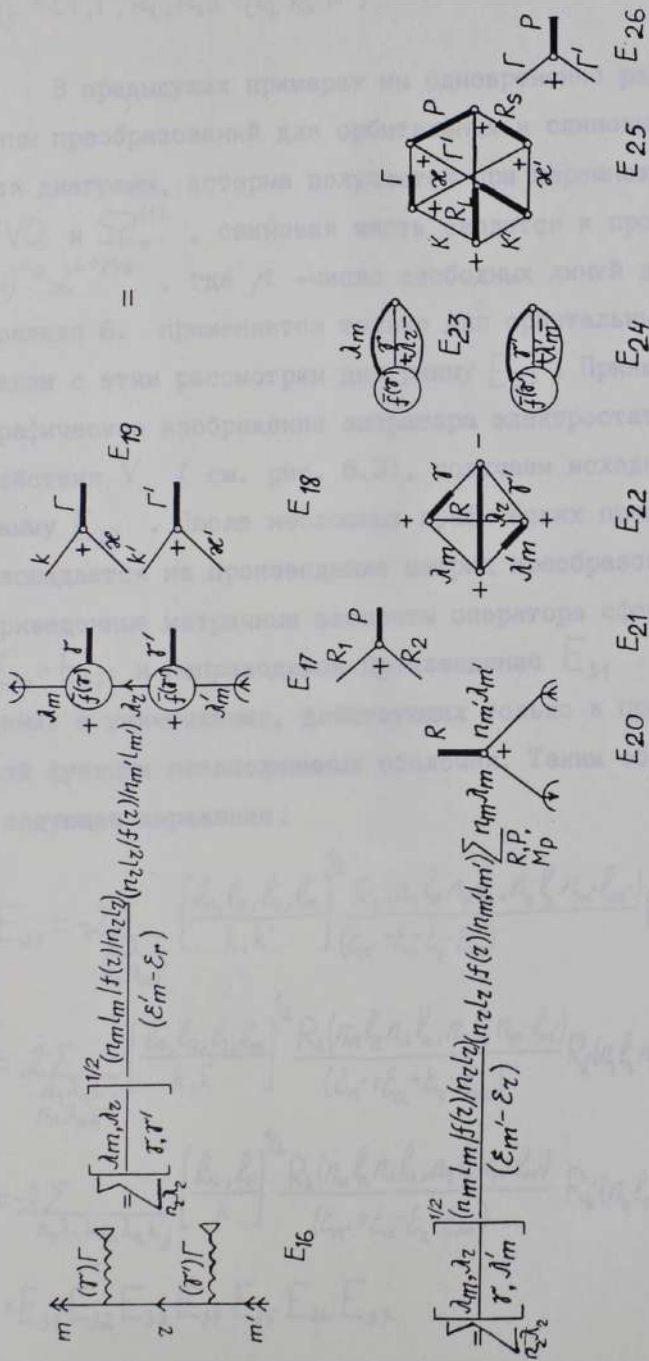
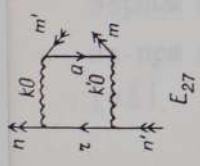


Рис. 6.5. Пример определения алгебраического выражения для диаграммы, представляющей отдельный член оператора $P F \Omega_F^{(1)}$

$$E_{25} = [\Gamma, \Gamma', R_L, R_S]^{1/2} \begin{Bmatrix} \mathcal{K} & \mathcal{L} & \Gamma \\ \mathcal{K}' & \mathcal{L}' & \Gamma' \\ R_L & R_S & P \end{Bmatrix} \quad (6.6)$$

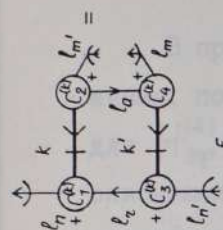
В предыдущих примерах мы одновременно рассматривали матрицы преобразований для орбитальных и спиновых рангов. Однако для диаграмм, которые получаются при перемножении операторов PVQ и $\sum_v^{(1)}$, спиновая часть сводится к простому множителю $(-1)^{n_a} 2^{L+P/4}$, где n - число свободных линий диаграмм. Тогда правило 6. применяется только для орбитальных переменных. В связи с этим рассмотрим диаграмму E_{27} . Принимая во внимание графическое изображение оператора электростатического взаимодействия V (см. рис. 6.3), получаем исходную моментную диаграмму E_{28} . После несложных графических преобразований она распадается на произведение матриц преобразования $E_{32}-E_{33}$, приведенные матричные элементы оператора сферической функции $E_{34}-E_{37}$ и неприводимое произведение E_{31} операторов рождения и уничтожения, действующих только в пространстве волновой функции незаполненных оболочек. Таким образом получаем следующее выражение:

$$\begin{aligned} E_{27} &= -2 \sum_{\substack{n_2 \lambda_2 k \\ n_a \lambda_a k'}} \left[\frac{l_n, l_a, l_2, l_m}{k, k'} \right]^{1/2} \frac{R_k(n_n l_n n_a l_a, n_2 l_2 n_m l_m)}{(\epsilon_n + \epsilon_a - \epsilon_2 - \epsilon_m)} R_k'(n_n' l_n' n_m' l_m', n_a' l_a' n_a' l_a') E_{28} = \\ &= -2 \sum_{\substack{n_2 \lambda_2 k_j \\ n_a \lambda_a k'}} \left[\frac{l_n, l_a, l_2, l_m}{k, k'} \right]^{1/2} \frac{R_k(n_n l_n n_a l_a, n_2 l_2 n_m l_m)}{(\epsilon_n + \epsilon_a - \epsilon_2 - \epsilon_m)} R_k'(n_n' l_n' n_m' l_m', n_a' l_a' n_a' l_a') E_{29} E_{30} = \\ &= -2 \sum_{\substack{n_2 \lambda_2 k \\ n_a \lambda_a k'}} \left[\frac{l_n, l_a}{k} \right]^{1/2} \frac{R_k(n_n l_n n_a l_a, n_2 l_2 n_m l_m)}{(\epsilon_n + \epsilon_a - \epsilon_2 - \epsilon_m)} R_k'(n_n' l_n' n_m' l_m', n_a' l_a' n_a' l_a') \times \\ &\times E_{31} E_{32} E_{33} E_{34} E_{35} E_{36} E_{37} \quad (6.7) \end{aligned}$$



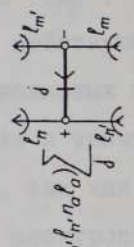
E-27

$$= -2 \sum_{\substack{n_z \lambda_z k \\ n_0 \lambda_0 k'}}^{1/2} \left[\frac{l_{n_1} l_a l_e l_m}{k, k'} \right] \frac{R_k(n_n l_n n_0 l_a, n_z l_z n_m l_m)}{(\epsilon_n + \epsilon_a - \epsilon_z - \epsilon_m)}$$



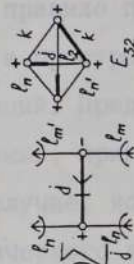
E-28

$$= -2 \sum_{\substack{n_z \lambda_z k \\ n_0 \lambda_0 k'}} \left[\frac{l_{n_1} l_a l_e l_m}{k, k'} \right] \frac{R_k(n_n l_n n_0 l_a, n_z l_z n_m l_m)}{(\epsilon_n + \epsilon_a - \epsilon_z - \epsilon_m)}$$



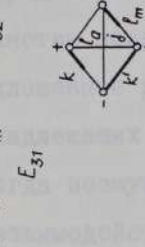
E-29

$$= -2 \sum_{\substack{n_z \lambda_z k \\ n_0 \lambda_0 k'}} \left[\frac{l_n l_a}{k} \right] \frac{R_k(n_n l_n n_0 l_a, n_z l_z n_m l_m)}{(\epsilon_n + \epsilon_a - \epsilon_z - \epsilon_m)}$$

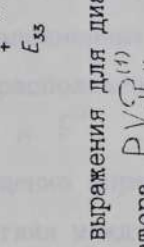


E-30

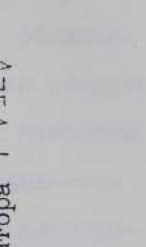
$$= -2 \sum_{\substack{n_z \lambda_z k \\ n_0 \lambda_0 k'}} \left[\frac{l_n l_a}{k} \right] \frac{R_k(n_n l_n n_0 l_a, n_z l_z n_m l_m)}{(\epsilon_n + \epsilon_a - \epsilon_z - \epsilon_m)}$$



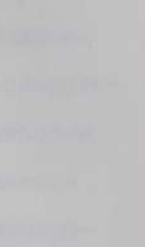
E-31



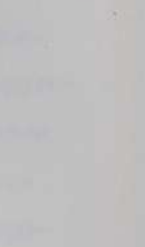
E-32



E-33



E-34



E-35



E-36



E-37

Рис. 6.6. Пример определения алгебраического выражения для диаграммы, представляющей отдельный член оператора $PV_{\Sigma L V}^{(1)}$

В приложении помещены диаграммы и их алгебраические выражения, по которым можно легко найти окончательное выражение для $H_{эф}^{(2)}$ (см. рис. 5.7 и 5.8). Итак, введенные нами диаграммы, описывающие $H_{эф}$, как правило представляют собой скалярные операторы, действующие в пространстве незаполненных оболочек модельных волновых функций. Предложенное расположение операторов рождения и уничтожения, принадлежащих к F' , наиболее оптимально, так как в случае, когда возмущение определяется оператором электростатического взаимодействия между электронами, оно обеспечивает составление из них неприводимых тензорных произведений с промежуточными нулевыми рангами в спиновом пространстве.

Выражение спин-угловых частей диаграмм через операторы $W_{(n_i l_i, n_j l_j)}^{(k_0)}$ удобно тем, что простая связь $W_{(n_i l_i, n_j l_j)}^{(k_0)}$ с широко применяемыми в атомных расчетах операторами $U^{(k)}$ (см. [48]) позволяет использовать составленные таблицы или подпрограммы расчета матричных элементов таких операторов на ЭВМ. С другой стороны, полученная форма спин-угловой части эффективного оператора очень удобна для перехода к тройным тензорным операторам с последующим применением методики квазиспина при определении матричных элементов исследуемых операторов [48].

7. Спин-угловая часть эффективного гамильтониана атома в пространстве двух и трех незаполненных оболочек [60,68,69]

В предыдущем разделе было получено разложение для взаимодействия, имеющего одночастичный характер, и межэлектронного электростатического взаимодействия для первых двух порядков ряда ТВ Рэлея-Шредингера через неприводимые тензорные произведения операторов рождения $a_{m_e m_s}^{(l_s)}$ и уничтожения $\tilde{a}_{m_e m_s}^{(l_s)}$. Каждый член рассматриваемого операторного ряда был представлен одним из следующих типов операторов:

$$\sum_{n_i l_i n_j l_j} A(n_i l_i, n_j l_j) \delta(l_i, l_j) K_{V_1}(n_i l_i, n_j l_j), \quad (7.1)$$

$$\sum_{n_i l_i n_j l_j} A(n_i l_i, n_j l_j) K_{F_1}(n_i l_i, n_j l_j), \quad (7.2)$$

$$\sum_{\substack{n_i l_i n_j l_j \\ n_v l_v n_t l_t}} [A(n_i l_i, n_j l_j) \times B(n_v l_v, n_t l_t)] K_{V_2}(n_i l_i, n_j l_j, n_v l_v, n_t l_t, k), \quad (7.3)$$

$$\sum_{\substack{n_i l_i n_j l_j \\ n_v l_v n_t l_t \\ k A}} [A(n_i l_i, n_j l_j) \times B(n_v l_v, n_t l_t)] K_{F_2}(n_i l_i, n_j l_j, n_v l_v, n_t l_t, k, A), \quad (7.4)$$

где $j_1 = k, j_2 = 0, j_3 = A, j_4 = \mathcal{L}$ или $j_1 = A, j_2 = \mathcal{L}, j_3 = k, j_4 = 0$

$$\sum_{\substack{n_i l_i n_j l_j k_1 \\ n_v l_v n_t l_t A \\ n_p l_p n_2 l_2 k_2}} \left[A^{(k_1 0)}(n_i l_i, n_j l_j) \times B^{(A 0)}(n_v l_v, n_t l_t) \right] \times C^{(k_2 0)}(n_p l_p, n_2 l_2) \times \dots^{(00)}$$

$$\times K_{V3}(n_i l_i, n_j l_j, n_v l_v, n_t l_t, n_p l_p, n_2 l_2, k_1, A, k_2) \quad , \quad (7.5)$$

где $A^{(k_1 k_2)}(n_i l_i, n_j l_j)$, $B^{(k_1 k_2)}(n_v l_v, n_t l_t)$, $C^{(k_1 k_2)}(n_p l_p, n_2 l_2)$ либо $[a^{(l_i s)} \times \tilde{a}^{(l_j s)}]^{(k_1 k_2)}$
 либо $[\tilde{a}^{(l_j s)} \times a^{(l_i s)}]^{(k_1 k_2)}$.

Символ $A^{(X X) \Gamma}$ означает, что для оператора $A^{(X X)}$ орбитальный и спиновой ранги связаны в общий ранг Γ .

Так как в настоящем разделе мы будем интересоваться только спин-угловыми частями операторов (7.1)-(7.5), то их радиальные части схематически обозначаем в виде $K_{V1}(n_i l_i, n_j l_j)$, $K_{V2}(n_i l_i, n_j l_j, n_v l_v, n_t l_t, k)$, $K_{V3}(n_i l_i, n_j l_j, n_v l_v, n_t l_t, n_p l_p, n_2 l_2, k, A, k_2)$ для эффективного гамильтониана, в котором включено только возмущение по межэлектронному электростатическому взаимодействию, и $K_{F1}(n_i l_i, n_j l_j)$, $K_{F2}(n_i l_i, n_j l_j, n_v l_v, n_t l_t, k, A)$ - для $F_{\text{эф}}^{(1)}$, $F_{\text{эф}}^{(2)}$. Они представляют собой сумму произведений радиальных интегралов по дискретному и непрерывному спектру, а также другие множители (субматричные элементы оператора сферической функции $C^{(k)}$, 6_j -коэффициенты и т.д.). Параметры суммирования $\{n_i l_i\}$ в (7.1)-(7.5) пробегает все значения квантовых чисел незаполненных оболочек, характеризующих модельное пространство. Например, в случае двух незаполненных оболочек $\{n_i l_i\} = n_1 l_1, n_2 l_2$.

Теперь приступим к рассмотрению субматричных элементов тензорных произведений операторов $\alpha^{(\ell_i s)}$ и $\tilde{\alpha}^{(\ell_j s)}$ в случае конфигурации с двумя и тремя незаполненными оболочками, т.е. $|\Psi_{II}(LSJ)\rangle = |n_1 \ell_1^{N_1} n_2 \ell_2^{N_2} \alpha_1 L_1 S_1 \alpha_2 L_2 S_2 LS\rangle$ и $|\Psi_{III}(LSJ)\rangle = |n_1 \ell_1^{N_1} n_2 \ell_2^{N_2} n_3 \ell_3^{N_3} \alpha_1 L_1 S_1 \alpha_2 L_2 S_2 (L_{12} S_{12}) \alpha_3 L_3 S_3 LS\rangle$, где индекс в левой части обозначает количество оболочек. В том случае, когда индекс опущен, подразумевается, что число оболочек любое.

В первую очередь, согласно формуле (38.21) работы [40], выделим зависимость от J в субматричном элементе оператора $A^{(JK)\Gamma}$:

$$(\Psi(LSJ) \| A^{(JK)\Gamma}(n_i \ell_i, n_j \ell_j) \| \Psi(L'S'J')) = [J, J', \Gamma]^{1/2} \times$$

$$\times \left\{ \begin{matrix} L' S' J' \\ JK \Gamma \\ L S J \end{matrix} \right\} (\Psi(LS) \| A^{(JK)}(n_i \ell_i, n_j \ell_j) \| \Psi(L'S')) \quad (7.6)$$

Зависимость от J в субматричном элементе двухэлектронного оператора (7.4) выделяется аналогичным образом.

Теперь рассмотрим спин-угловые части операторов (7.1)–(7.5) в случае двух незаполненных оболочек. Для этого введем сокращенные обозначения тензорных произведений

$$[\alpha^{(\ell_i s)} \times \tilde{\alpha}^{(\ell_j s)}]^{(k_1 k_2)} \equiv [i \tilde{j}]^{(k_1 k_2)} \quad (7.7)$$

$$\begin{aligned}
 & \left[\left[a^{(l_1 s)} \times \tilde{a}^{(l_2 s)} \right]^{(k_1 k_2)} \times \left[a^{(l_1 s)} \times \tilde{a}^{(l_2 s)} \right]^{(k_3 k_4)} \right]^{(\mathcal{K}_1 \mathcal{K}_2)} \equiv \\
 & \equiv \left[\left[i \tilde{j} \right]^{(k_1 k_2)} \times \left[v \tilde{t} \right]^{(k_3 k_4)} \right]^{(\mathcal{K}_1 \mathcal{K}_2)}, \quad (7.8)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \left[\left[a^{(l_1 s)} \times \tilde{a}^{(l_2 s)} \right]^{(k_1 k_2)} \times \left[a^{(l_1 s)} \times \tilde{a}^{(l_2 s)} \right]^{(k_3 k_4)} \right]^{(k_5 k_6)} \times \left[a^{(l_1 s)} \times \tilde{a}^{(l_2 s)} \right]^{(k_7 k_8)} \right]^{(\mathcal{K}_1 \mathcal{K}_2)} \equiv \\
 & \equiv \left[\left[\left[i \tilde{j} \right]^{(k_1 k_2)} \times \left[v \tilde{t} \right]^{(k_3 k_4)} \right]^{(k_5 k_6)} \times \left[p \tilde{z} \right]^{(k_7 k_8)} \right]^{(\mathcal{K}_1 \mathcal{K}_2)}. \quad (7.9)
 \end{aligned}$$

Конкретные распределения квантовых чисел $\{n_i l_i\}$ в операторах (7.7)–(7.9) будем обозначать символами ij , $ijvt$, $ijvtpz$ ($i, j, v, t, p, z = 1, 2$), соответственно. В общем случае сумма (7.1) или (7.2) состоит из четырех членов, а сумма (7.3)–(7.4) и (7.5) при фиксированных рангах k, k_1, k_2, k_3, k_4 состоят, соответственно, из 16 и 64 членов. В зависимости от характера распределений отдельные члены операторов в (7.1)–(7.5) имеют ненулевые матричные элементы между волновыми функциями $\langle \Psi_{II}(LS) |$ и $|\Psi'_{II}(L'S') \rangle$ с различным числом электронов N_1, N_2 и N'_1, N'_2 в оболочках $n_1 l_1, n_2 l_2$. В таблицах 7.1 и 7.2 приведены распределения $ijvt, ijvtpz$ для операторов (7.8)–(7.9), дающие отличные от нуля матричные элементы в случае конкретных значений N'_1, N'_2 . При определении матричных элементов одной оболочки эквивалентных электронов мы будем применять методику квазиспина [48]. Тогда

операторы $\alpha^{(l_s)}$ и $\tilde{\alpha}^{(l_s)}$ рассматриваются как компоненты с

$m_q = \pm 1/2$ тензорного оператора ранга $q = 1/2$ (т.е. $\alpha_{m_1 m_2 m_3}^{(q l_s)}$) в квазиспиновом пространстве. Волновые функции

$$|\Psi_{II}(LS)\rangle \equiv |n_1 l_1^{N_1} n_2 l_2^{N_2} \alpha_1 L_1 S_1 \alpha_2 L_2 S_2 LS\rangle \equiv \\ \equiv |n_1 l_1 n_2 l_2 \alpha_1 Q_1 L_1 S_1 M_{Q_1} \alpha_2 Q_2 L_2 S_2 M_{Q_2} LS\rangle, \quad (7.10)$$

относительно которых рассматриваются матричные элементы, характеризуются значением $Q_i = \frac{1}{2}(2l_i + 1 - v_i)$ квантового числа

Таблица 7.1

Возможные распределения параметров $ijvt$ для оператора (7.8)

N'_1, N'_2	N_1, N_2	N_1-2, N_2+2	N_1+2, N_2-2	N_1-1, N_2+1	N_1+1, N_2-1
$ijvt$	1111	2121	1212	1222	2111
	2222			1112	2221
	1122			1211	2122
	2211			2212	1121
	1221				
	2112				

квазиспинового оператора \hat{Q} (v_i - квантовое число старшинства) и собственным значением $M_{Q_i} = -\frac{1}{2}(2l_i + 1 - N)$ проекции оператора \hat{Q}_z . Используя формулы из главы У работы [40] и глав 8, II работы [48], можно легко получить общие выраже-

Таблица 7.2

Возможные распределения параметров $i_j v_t p_r$ для оператора (7.9)

N'_1, N'_2	N_1, N_2	M_1, M_2	N_1+2, N_2-2	N_1-2, N_2+2	N_1-1, N_2+1	N_1+1, N_2-1	N_1-3, N_2+3	N_1+3, N_2-3
111111	222222	222121	111212	122112	211221	122121	121212	212121
112222	221111	211121	122212	211212	122121	122121		
221122	112211	212221	121112	121221	212112	212112		
222211	111122	112121	221212	112212	221121	221121		
122122	211211	212122	121211	121211	221112	112221		
211222	122111	212111	121222	121222	122222	211111		
122221	211112			221222	221222	112111		
222112	111221			121111	121111	212222		
212212	121121			111211	111211	222122		
221221	112112			111222	111222	222111		
				122211	122211	211122		
				221211	221211	112122		
				121122	121122	212211		
				222212	222212	111121		
				111112	111112	222221		

VIII

VII

VI

V

IV

III

II

I

ния для матричных элементов операторов (7.1)-(7.5) относительно функции (7.10) при любом распределении $ijvt$, $ijvtrz$ квантовых чисел.

Для операторов (6.3)-(6.4), характеризующих распределениями $ijvt$, получаем:

$$\begin{aligned}
 & (\Psi(LS) \parallel [A(n_i \ell_i, n_j \ell_j)^{(k_1 k_2)} \times B(n_v \ell_v, n_z \ell_z)^{(k_3 k_4)}] \parallel \Psi'(L'S')) = \\
 & = (-1)^{L+S+L'+S'+K_1+K_2} [K_1, K_2]^{1/2} \sum_{\substack{\alpha_1'' L_1'' S_1'' \\ \alpha_2'' L_2'' S_2'' \\ L'' S''}} \left\{ \begin{matrix} k_1 & k_3 & K_1 \\ L' & L & L'' \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} k_2 & k_4 & K_2 \\ S' & S & S'' \end{matrix} \right\} \times \\
 & \times (\Psi(LS) \parallel A(n_i \ell_i, n_j \ell_j)^{(k_1 k_2)} \parallel \Psi''(L''S'')) (\Psi''(L''S'') \parallel B(n_v \ell_v, n_z \ell_z)^{(k_3 k_4)} \parallel \Psi'(L'S')).
 \end{aligned}
 \tag{7.11}$$

Теперь рассмотрим субматричные элементы $(\Psi_{\underline{ii}}(LS) \parallel A(n_i \ell_i, n_j \ell_j)^{(k_1 k_2)} \parallel \Psi'_{\underline{ii}}(L'S'))$, принимая во внимание, на какие оболочки действуют операторы $a^{(\ell_i s)}$ и $\tilde{a}^{(\ell_j s)}$. Если оба они действуют на одну, например, первую оболочку ($i = j = I$), то

$$\begin{aligned}
 & (\Psi_{\underline{ii}}(LS) \parallel [a_{m_{q_1}}^{(q \ell_1 s)} \times a_{m_{q_2}}^{(q \ell_2 s)}]^{(k_1 k_2)} \parallel \Psi'_{\underline{ii}}(L'S')) = (-1)^{L_1+S_1+L_2+S_2+L'+S'+k_1+k_2} \\
 & \times \sqrt{\frac{[L, L', S, S']}{2[Q]}} \left\{ \begin{matrix} L_1 & L & L_2 \\ L' & L' & k_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S_1 & S & S_2 \\ S' & S' & k_2 \end{matrix} \right\} \delta(M_{Q_2}, M'_{Q_2}) \delta(\alpha_2 L_2 S_2, \alpha_2' L_2' S_2') \times
 \end{aligned}$$

(7.2), действительное значение которого равно $\delta_{ij} = \delta_{ij}$.

$$\begin{aligned} & \times \left\{ (-1)^{q-m_{q_1}} \delta(Q_1, Q'_1) (l_{q_1} \alpha_1 Q_1 L_1 S_1 \parallel \parallel W_{(n_1 l_1, n_1 l_1)}^{(0k_1 k_2)} \parallel \parallel l_{q_1} \alpha'_1 Q'_1 L'_1 S'_1) + \right. \\ & \left. + \left[M_{Q_1}^{Q'_1} \begin{matrix} 1 & Q_1 \\ 0 & M_{Q_1} \end{matrix} \right] (l_{q_1} \alpha_1 Q_1 L_1 S_1 \parallel \parallel W_{(n_1 l_1, n_1 l_1)}^{(1k_1 k_2)} \parallel \parallel l_{q_1} \alpha'_1 Q'_1 L'_1 S'_1) \right\}. \end{aligned} \quad (7.12)$$

В выражении (7.12) $\left[M_{Q_1}^{Q'_1} \begin{matrix} 1 & Q_1 \\ 0 & M_{Q_1} \end{matrix} \right]$ - коэффициент К.-Г., который выделяет зависимость матричного элемента от числа электронов N , а $(l_{q_1} \alpha_1 Q_1 L_1 S_1 \parallel \parallel W_{(n_1 l_1, n_1 l_1)}^{(\varepsilon k_0)} \parallel \parallel l_{q_1} \alpha'_1 Q'_1 L'_1 S'_1)$ - субматричный элемент тройного тензора $W_{(n_1 l_1, n_1 l_1)}^{(\varepsilon k_0)} = [a^{(q l_s)} x a^{(q l_s)}]^{(\varepsilon k_0)}$, который имеет вид:

$$\begin{aligned} & (l_{q_1} \alpha_1 Q_1 L_1 S_1 \parallel \parallel W_{(n_1 l_1, n_1 l_1)}^{(k_1 k_2 k_3)} \parallel \parallel l_{q_1} \alpha'_1 Q'_1 L'_1 S'_1) = (-1)^{Q+L+S+Q'+L'+S'+k_1+k_2+k_3} [k_1, k_2, k_3]^{1/2} \times \\ & \times \sum_{\alpha'' Q'' L'' S''} \left\{ \begin{matrix} q & q & k_1 \\ Q' & Q & Q'' \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} l & l & k_2 \\ L' & L & L'' \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} s & s & k_3 \\ S' & S & S'' \end{matrix} \right\} (l_{q_1} \alpha_1 Q_1 L_1 S_1 \parallel \parallel a^{(q l_s)} \parallel \parallel l_{q_1} \alpha'' Q'' L'' S'') \times \end{aligned} \quad (7.13)$$

$$\times (l_{q_1} \alpha'' Q'' L'' S'' \parallel \parallel a^{(q l_s)} \parallel \parallel l_{q_1} \alpha'_1 Q'_1 L'_1 S'_1). \quad (7.13)$$

Последние два множителя в выражении (7.13) называются субгенеалогическими коэффициентами [126] и они выражаются через генеалогические коэффициенты следующим образом:

$$\begin{aligned} & (l_{q_1} \alpha_1 Q_1 L_1 S_1 \parallel \parallel a^{(q l_s)} \parallel \parallel l_{q_1} \alpha'_1 Q'_1 L'_1 S'_1) = (-1)^{\sqrt{2} \nu(Q+1) [L, S]} \times \\ & \times (l_{q_1} \nu L S \parallel \parallel l_{q_1} (\nu-1) L' S') \ell. \end{aligned} \quad (7.14)$$

Выражение для субматричного элемента операторов (7.1) и (7.2), действующих на вторую оболочку ($i = j = 2$), получается

из (7.12) заменой в правой части индексов „1” \leftrightarrow „2” и умножением на фазовый множитель $(-1)^{L-L'-L_2+L'_2-S_2+S'_2+S-S'}$.

Если операторы $a^{(l_i s)}$ и $\tilde{a}^{(l_j s)}$ действуют на разные оболочки, напр. $i = 1, j = 2$, то вместо (7.12) имеем

$$(\Psi_{II}(LS)) \parallel [a_{m_{q_1}}^{(q l_1 s)} \times a_{m_{q_2}}^{(q l_2 s)}]^{(k_1 k_2)} \parallel \Psi_{II}'(L'S') = (-1)^{N_1' N_2' + N_1 N_2} \times$$

$$\times \left[\begin{matrix} L_1, S_1, L_1', S_1', k_1, k_2 \\ Q_1, Q_2 \end{matrix} \right]^{1/2} \left[\begin{matrix} Q_1' & q & Q_1 \\ M_{Q_1}' & m_{q_1} & M_{Q_1} \end{matrix} \right] \left[\begin{matrix} Q_2' & q & Q_2 \\ M_{Q_2}' & m_{q_2} & M_{Q_2} \end{matrix} \right] \left\{ \begin{matrix} L_1' & L_2' & L' \\ l_1 & l_2 & k_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S_1' & S_2' & S' \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & k_2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S_1 & S_2 & S \end{matrix} \right\} \quad (7.14)$$

$$\times (l_1 \alpha_1 Q_1 L_1 S_1) \parallel a^{(q l_1 s)} \parallel (l_1 \alpha_1' Q_1' L_1' S_1') (l_2 \alpha_2 Q_2 L_2 S_2) \parallel a^{(q l_2 s)} \parallel (l_2 \alpha_2' Q_2' L_2' S_2') \quad (7.15)$$

если же $i = 2, j = 1$, то субматричный элемент операторов (7.1), (7.2) отличается от (7.15) фазовым множителем $(-1)^{l_1+l_2-k_1+k_2}$.

Мы рассмотрели все необходимые случаи действия операторов $a^{(l_i s)}$, $\tilde{a}^{(l_j s)}$ при определении выражений для матричного элемента (7.11) операторов (7.3)–(7.4). Заметим, что (7.12) и (7.15) полностью определяют такие субматричные элементы операторов (7.1)–(7.2) (охватывают все четыре типа распределений, т.е. $i, j = 11, 22, 12, 21$). Имея в виду (7.12) и (7.15), легко написать и общее выражение для спин-угловой части (7.5):

$$\begin{aligned}
 & (\Psi_{\underline{II}}(LS)) \parallel [A(n_i \ell_i, n_j \ell_j)^{(k_1, 0)} \times B(n_\nu \ell_\nu, n_\tau \ell_\tau)^{(AO)} \times C(n_\rho \ell_\rho, n_\sigma \ell_\sigma)^{(k_2, 0)}]^{(00)} \parallel \Psi_{\underline{II}}'(L'S') = \\
 & = \frac{\delta(LS, L'S')}{[S] \sqrt{[L]}} \sum_{\substack{\alpha_1'' L_1'' S_1'' \alpha_1''' L_1''' S_1''' \\ \alpha_2'' L_2'' S_2'' \alpha_2''' L_2''' S_2''' \\ L'' S'' L''' S'''}} \delta(S, S'') \delta(S, S''') \left\{ \begin{matrix} k_1 & A & k_2 \\ L'' & L & L''' \end{matrix} \right\} \times \\
 & \times (\Psi_{\underline{II}}(LS)) \parallel A(n_i \ell_i, n_j \ell_j)^{(k_1, 0)} \parallel \Psi_{\underline{II}}'''(L'''S''') \parallel \Psi_{\underline{II}}'''(L'''S''') \parallel B(n_\nu \ell_\nu, n_\tau \ell_\tau)^{(AO)} \parallel \Psi_{\underline{II}}''(L''S'') \times \\
 & \times (\Psi_{\underline{II}}''(L''S'') \parallel C(n_\rho \ell_\rho, n_\sigma \ell_\sigma)^{(k_2, 0)} \parallel \Psi_{\underline{II}}'(L'S')).
 \end{aligned} \tag{7.16}$$

Перейдем теперь к случаю с тремя открытыми оболочками. Когда оператор $A(n_i \ell_i, n_j \ell_j)^{(k_1, k_2)}$ действует на первую ($i=j=1$) или вторую ($i=j=2$), или одновременно на первую и вторую ($i=1, j=2$ либо $i=2, j=1$) оболочки, получаем

$$\begin{aligned}
 & (\Psi_{\underline{III}}(LS)) \parallel A(n_i \ell_i, n_j \ell_j)^{(k_1, k_2)} \parallel \Psi_{\underline{III}}'(L'S') = \delta(\alpha_3 L_3 S_3, \alpha_3' L_3' S_3') (-1)^{k_1+k_2+L_3+L_{12}'+S_3+S_{12}'+S'+L'} \times \\
 & \times [L, L', S, S']^{\frac{1}{2}} \left\{ \begin{matrix} L_{12}' & k_1 & L_{12} \\ L & L_3 & L' \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S_{12}' & k_2 & S_{12}' \\ S & S_3 & S' \end{matrix} \right\} (\Psi_{\underline{II}}(L_{12} S_{12})) \parallel A(n_i \ell_i, n_j \ell_j)^{(k_1, k_2)} \parallel \Psi_{\underline{II}}'(L_{12}' S_{12}') .
 \end{aligned} \tag{7.17}$$

Окончательный вид субматричного элемента в правой части (7.17) представлен выражениями (7.12) и (7.15).

Рассмотрим теперь случай, когда $i=j=3$. Тогда

$$(\Psi_{\underline{III}}(LS)) \parallel A(n_3 \ell_3, n_3 \ell_3)^{(k_1, k_2)} \parallel \Psi_{\underline{III}}'(L'S') = \delta(L_{12} S_{12}, L_{12}' S_{12}') \delta(\alpha_1 L_1 S_1, \alpha_1' L_1' S_1') \times$$

$$\begin{aligned} & \times \delta(\alpha_2 L_2 S_2, \alpha_2' L_2' S_2') (-1)^{k_1+k_2+L_{12}+L_3+S_{12}+S_3+S} [L, S, L', S']^{1/2} \left\{ \begin{matrix} L_{12} & L_3 & L \\ k_1 & l' & l'_3 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S_{12} & S_3 & S \\ k_2 & s' & s'_3 \end{matrix} \right\} \times \\ & \times (n_3 l_3^{N_3} \alpha_3 L_3 S_3 \| A_{(n_3 l_3, n_3 l_3)}^{(k_1 k_2)} \| n_3' l_3^{N_3'} \alpha_3' L_3' S_3') \end{aligned} \quad (7.18)$$

В выражении (7.18) субматричный элемент

$$(n_3 l_3^{N_3} \alpha_3 L_3 S_3 \| A_{(n_3 l_3, n_3 l_3)}^{(k_1 k_2)} \| n_3' l_3^{N_3'} \alpha_3' L_3' S_3')$$

можно представить в следующем виде:

$$\begin{aligned} & (n l \alpha L S \| [a_{m_{q_1}}^{(q l s)} \times a_{m_{q_2}}^{(q l s)}]^{(k_1 k_2)} \| n l' \alpha' L' S') = \frac{(-1)^{(k_1+k_2)(\frac{1}{2}+m_{q_1})}}{\sqrt{4Q+2}} \times \\ & \times \begin{bmatrix} Q' & k_3 & Q \\ M_a' & 0 & M_a \end{bmatrix} (n l Q L S \| W^{(k_3 k_1 k_2)} \| n l' Q' L' S') \end{aligned} \quad (7.19)$$

Такие же формулы имеют место для операторов $B_{(n_i l_i, n_j l_j)}^{(k_1 k_2)}$ и $C_{(n_i l_i, n_j l_j)}^{(k_1 k_2)}$.

Если $i = 2$, а $j = 3$, то получаем

$$(\Psi_{III}(LS) \| A_{(n_2 l_2, n_3 l_3)}^{(k_1 k_2)} \| \Psi_{III}'(L'S')) = \delta(\alpha_1 L_1 S_1, \alpha_1' L_1' S_1') \times$$

$$\times (-1)^{N_2+N_3+N_3'+N_2'+N_3'N_2'+L_1+L_{12}+L_2'+L_2'+S_1+S_{12}+S_2'+\frac{1}{2}} [L, S, L', S', L', L_{12}, S', S_{12}, k_1, k_2]^{1/2} \times$$

$$\times \left\{ \begin{matrix} l_2 & l_2' & l_2 \\ l_1 & l_{12} & l_{12}' \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \frac{1}{2} & S_2' & S_2 \\ S_1 & S_{12} & S_{12}' \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} l_{12}' & l_3 & l_1' \\ l_2 & l_3 & k_1 \\ l_{12} & l_3 & l \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S_{12}' & S_3 & S_1' \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & k_2 \\ S_{12} & S_3 & S \end{matrix} \right\} \times$$

$$x(n_2 l_2 \alpha_2 L_2 S_2 \| b^{(\ell_s)} \| n_2 l_2 \alpha_2' L_2' S_2') (n_3 l_3 \alpha_3 L_3 S_3 \| b^{(\ell_s)} \| n_3 l_3 \alpha_3' L_3' S_3') \quad (7.20)$$

где оператор $b^{(\ell_s)}$ может быть либо оператором $\alpha^{(\ell_s)}$, либо $\tilde{\alpha}^{(\ell_s)}$. Последние два множителя в (7.20) выражаются формулами (3.21), (3.22).

В случае $i = 1$ и $j = 3$ имеем

$$\begin{aligned} & (\Psi_{\text{III}}(LS) \| A(n_1 l_1, n_3 l_3) \| \Psi_{\text{III}}'(L'S')) = \delta(\alpha_2 L_2 S_2, \alpha_2' L_2' S_2') \times \\ & \times (-1)^{N_2 - L_1 + L_{12} + L_1' - L_{12}' - S_1 + S_{12} + S_1' - S_{12}'} \times \\ & \times (n_2 l_2 \alpha_2 L_2 S_2 \| n_1 l_1 n_3 l_3 \alpha_2 L_2 S_2 \alpha_1 L_1 S_1 (L_{12} S_{12}) \alpha_3 L_3 S_3 LS \| A(n_1 l_1, n_3 l_3) \| \\ & \| n_2 l_2 \alpha_2 L_2 S_2 \alpha_1 L_1 S_1 (L_{12} S_{12}) \alpha_3 L_3 S_3 L S \| A(n_1 l_1, n_3 l_3) \| \\ & \| n_2 l_2 \alpha_2 L_2 S_2 \alpha_1 L_1 S_1 (L_{12} S_{12}) \alpha_3 L_3 S_3 L S \| A(n_1 l_1, n_3 l_3) \| \\ & \| n_2 l_2 \alpha_2 L_2 S_2 \alpha_1 L_1 S_1 (L_{12} S_{12}) \alpha_3 L_3 S_3 L S \| A(n_1 l_1, n_3 l_3) \| \\ & \| n_2 l_2 \alpha_2 L_2 S_2 \alpha_1 L_1 S_1 (L_{12} S_{12}) \alpha_3 L_3 S_3 L S \| A(n_1 l_1, n_3 l_3) \| \end{aligned} \quad (7.21)$$

Выражение для субматричного элемента в правой части (7.21) получаем из (7.20) заменой квантовых чисел $n_1 l_1 \alpha_1 L_1 S_1 \rightleftharpoons n_2 l_2 \alpha_2 L_2 S_2$ и $n_2 l_2 \alpha_2' L_2' S_2' \rightleftharpoons n_1 l_1 \alpha_1' L_1' S_1'$. Случай, когда $i = 3, j = 1$ ($i = 3, j = 2$), получаем из (7.21), (7.20), умножением на фазовый множитель $(-1)^{\ell_1 + \ell_3 - k_1 - k_2 + 1} ((-1)^{\ell_2 + \ell_3 - k_1 - k_2 + 1})$.

Выражения для субматричных элементов спин-угловых частей (7.3)-(7.5) в случае трех открытых оболочек отличаются от случая с двумя оболочками тем, что в (7.11) и (7.16) появляются дополнительные суммы по $\alpha_3'' L_3'' S_3'' L_{12}'' S_{12}''$ и $\alpha_3''' L_3''' S_3''' L_{12}''' S_{12}'''$, соответственно.

Таким образом, в этом разделе получены все соотношения,

необходимые для вычисления спин-угловой части эффективного гамильтониана атома во втором порядке ТВ в тех случаях, когда модельное пространство строится из волновых функций с двумя или тремя открытыми оболочками. Однако, несмотря на простоту выражений (7.11) и (7.16), в них содержатся промежуточные суммы по Ψ'' и Ψ''' , для суммирования которых в случае сложных конфигураций требуются большие ресурсы времени ЭВМ. В следующем разделе будут получены выражения, в которых отсутствуют такие промежуточные суммы.

Сначала рассмотрим оператор (7.8). Как уже отмечалось, оператор имеет 16 распределений (см. табл. 7.11), характеризующих действия четырех операторов $\Omega^{(40)}$ на функции (7.10). Имеем со случая, когда все $\Omega^{(40)}$ действуют на одну оболочку, тогда оператор (7.8) имеет представление вид

Сначала рассмотрим оператор (7.8). Как уже отмечалось, оператор имеет 16 распределений (см. табл. 7.11), характеризующих действия четырех операторов $\Omega^{(40)}$ на функции (7.10). Имеем со случая, когда все $\Omega^{(40)}$ действуют на одну оболочку, тогда оператор (7.8) имеет представление вид

$$[\hat{L} \hat{L}]^{(10)} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \left[\begin{matrix} (00) & (10) & (00) \\ \alpha & \alpha & \alpha \end{matrix} \right] \Omega^{(40)} \quad (8.1)$$

В зависимости от значения орбитального ранга k для p -оболочки ($k = 1$) эквивалентных операторов получим [48]

$$[\hat{L} \hat{L}]^{(00)} = [\hat{L} \hat{L}]^{(00)} = \frac{1}{2\sqrt{3}} N_{\hat{L}}^2 \quad (8.2)$$

$$[\hat{L} \hat{L}]^{(10)} = [\hat{L} \hat{L}]^{(10)} = -\frac{1}{4\sqrt{3}} \hat{L}^2 \quad (8.3)$$

8. Неприводимый тензорный вид двухэлектронных и трехэлектронных операторов и их субматричные элементы [69]

Целью этого раздела является нахождение таких выражений для двухчастичных и трехчастичных операторов, субматричные элементы которых могут быть определены в виде произведения субматричных элементов, действующих в различных оболочках. Для получения таких выражений переставим операторы $a^{(q l s)}$ в (7.8), (7.9) так, чтобы рядом стояли операторы, действующие на одну и ту же оболочку.

Сначала рассмотрим оператор (7.8). Как уже отмечалось, имеется всего 16 распределений (см. табл. 7.1), характеризующих действие четырех операторов $a^{(q l s)}$ на функцию (7.10). Начнем со случая, когда все $a^{(q l s)}$ действуют на одну оболочку, тогда оператор (7.8) можно представить как

$$[[i\tilde{i}]^{(k_0)} \times [i\tilde{i}]^{(k_0)(00)}] = \frac{1}{2} \sum_{q, q', \varepsilon} \begin{bmatrix} q' & q'' & \varepsilon \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} [W(l_i) \times W(l_i)]_0^{(q' k_0) (q'' k_0) (\varepsilon 00)} \quad (8.1)$$

В зависимости от значения орбитального ранга k для p -оболочки ($l_i = 1$) эквивалентных электронов получаем [48]:

$$[[p\tilde{p}]^{(00)} \times [p\tilde{p}]^{(00)}]^{(00)} = \frac{1}{2 \cdot 3} \hat{N}_{(p)}^2, \quad (8.2)$$

$$[[p\tilde{p}]^{(10)} \times [p\tilde{p}]^{(10)}]^{(00)} = -\frac{1}{4\sqrt{3}} \hat{L}_{(p)}^2, \quad (8.3)$$

$$[[p\tilde{p}]^{(20)} \times [p\tilde{p}]^{(20)}]^{(00)} = -\frac{1}{3 \cdot 4 \sqrt{5}} [3\vec{L}^2 + 3 \cdot 4 \vec{S}^2 + 5(\hat{N}^2 - 6\hat{N})] \quad (8.4)$$

Здесь $\hat{N}(\ell) = -[\ell, s]^{1/2} [a^{(\ell_s)} \times \tilde{a}^{(\ell_s)}]^{(00)}$ - оператор числа частиц в оболочке, а \vec{L}^2, \vec{S}^2 - квадраты операторов орбитального и спинового моментов количества движения. Для d -оболочки ($\ell_i = 2$) имеем (см. [127]):

$$[[d\tilde{d}]^{(00)} \times [d\tilde{d}]^{(00)}]^{(00)} = \frac{1}{2 \cdot 5} \hat{N}^2(d) \quad (8.5)$$

$$[[d\tilde{d}]^{(10)} \times [d\tilde{d}]^{(10)}]^{(00)} = -\frac{1}{4 \cdot 5 \sqrt{3}} \vec{L}^2 \quad (8.6)$$

$$[[d\tilde{d}]^{(20)} \times [d\tilde{d}]^{(20)}]^{(00)} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{-1}{3 \cdot 7} \left[\frac{3}{2} \vec{L}^2 + 4 \vec{Q}^2 + 3 \cdot 4 \vec{S}^2 - 3 \cdot 5 \cdot 7 \right] + \sqrt{\frac{2}{3}} [W^{(120)} \times W^{(120)}]_0^{(200)} \right\} \quad (8.7)$$

$$[[d\tilde{d}]^{(30)} \times [d\tilde{d}]^{(30)}]^{(00)} = \frac{1}{2 \sqrt{7}} \left(\vec{S}^2 + \vec{Q}^2 + \frac{1}{2 \cdot 5} \vec{L}^2 - \frac{5 \cdot 7}{4} \right) \quad (8.8)$$

$$[[d\tilde{d}]^{(40)} \times [d\tilde{d}]^{(40)}]^{(00)} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{-1}{3 \cdot 7} \left[3 \vec{S}^2 - \frac{1}{2} \vec{L}^2 \right] + \frac{2 \cdot 5}{7 \cdot 9} \vec{Q}^2 - \frac{5 \cdot 11}{3 \cdot 4} - \frac{7}{2 \cdot 3 \cdot 5} [\hat{N}^2 - 2 \cdot 5 \cdot \hat{N}] - \frac{1}{3} \sqrt{\frac{2 \cdot 5}{3}} [W^{(120)} \times W^{(120)}]_0^{(200)} \right\} \quad (8.9)$$

В (8.7)-(8.9) \vec{Q}^2 - квадрат квазиспинового оператора. Субматричные элементы операторов (8.2)-(8.9) выражаются непосредственно через собственные значения операторов \hat{N}^2 , \vec{L}^2 , \vec{S}^2 , \vec{Q}^2 , за исключением оператора $[\hat{W}_{(\alpha)}^{(120)} \times \hat{W}_{(\alpha)}^{(120)}]_0^{(200)}$ (имеющего не равный нулю суммарный квазиспиновый ранг), субматричные элементы которого необходимо рассчитывать по обычным правилам для тензорного произведения двух операторов (см. формулу (8.39)).

Перейдем теперь к рассмотрению распределений, когда оператор (7.8) действует на обе оболочки $n_1 l_1^{N_1}$, $n_2 l_2^{N_2}$. Начнем с распределений I122, 2211. Легко определить, что

$$[\hat{1}\hat{1}]^{(k_0)} \times [\hat{2}\hat{2}]^{(k_0)}]^{(00)} = [\hat{2}\hat{2}]^{(k_0)} \times [\hat{1}\hat{1}]^{(k_0)}]^{(00)}$$

$$[\hat{1}\hat{1}]^{(00)} \times [\hat{2}\hat{2}]^{(00)}]^{(00)} = \frac{1}{2} [l_1, l_2]^{-1/2} \hat{N}(l_1) \hat{N}(l_2), \quad (8.10)$$

$$[\hat{1}\hat{1}]^{(1_0)} \times [\hat{2}\hat{2}]^{(1_0)}]^{(00)} = -\frac{1}{2} \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{l_1(l_1+1)l_2(l_2+1)} [l_1, l_2]} (L^{(1)}(l_1) \cdot L^{(1)}(l_2)), \quad (8.11)$$

$$[\hat{1}\hat{1}]^{(k_0)} \times [\hat{2}\hat{2}]^{(k_0)}]^{(00)} = \frac{1}{2} \sum_Q [\hat{W}_0^{(Qk_0)}(l_1) \times \hat{W}_0^{(Qk_0)}(l_2)]^{(00)} \quad (k > 1). \quad (8.12)$$

В случае распределения I221 получаем

$$[\hat{1}\hat{2}]^{(k_0)} \times [\hat{2}\hat{1}]^{(k_0)}]^{(00)} = (-1)^{l_1+l_2+k} \frac{\sqrt{[k]}}{4[l_1, l_2]} [\hat{N}(l_1) \hat{N}_y(l_2) - 4(S(l_1) \cdot S(l_2))] +$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{3}{2} \frac{(k(k+1) - l_1(l_1+1) - l_2(l_2+1))}{l_1(l_1+1)l_2(l_2+1)} ([l_1^{(1)}] \cdot [l_2^{(1)}]) - \\
 & - \frac{1}{4} \sqrt{[k]} \sum_{\substack{j \geq 1 \\ j_s, Q}} (-1)^{j+Q+1} \begin{Bmatrix} l_1 & l_1 & j \\ l_2 & l_2 & k \end{Bmatrix} (W_0^{(Qjjs)}(l_1) \cdot W_0^{(Qjjs)}(l_2)) \quad (8.13)
 \end{aligned}$$

В (8.13) $\hat{N}_g(l_i) = 4l_i + 2 - \hat{N}(l_i)$ представляет собой оператор числа дырок в оболочке $n_i l_i$. Выражение для распределения 2112 получается заменой $l_i \rightleftharpoons l'_i$ в (8.13).

До сих пор мы рассматривали операторы, имеющие ненулевые матричные элементы внутри одной конфигурации (т.е. $N'_1 = N_1$ и $N'_2 = N_2$). Перейдем теперь к изучению не диагональных относительно конфигураций ($N'_1 \neq N_1$ и $N'_2 \neq N_2$) случаев.

При $N'_1 = N_1 - 2$, $N'_2 = N_2 + 2$ (распределение 1212) имеем

$$\begin{aligned}
 & [1\tilde{2}]^{(k_0)} \times [1\tilde{2}]^{(k_0)} \stackrel{(00)}{=} 2 \frac{\sqrt{[k]}}{[l_1, l_2]} Q_1^{(1)}(l_1) Q_{-1}^{(1)}(l_2) - \\
 & - \frac{1}{2} \sum_{\substack{j > 0 \\ d^s}} (-1)^{l_1 + l_2 + k + j} \sqrt{[k]} \begin{Bmatrix} l_1 & l_1 & j \\ l_2 & l_2 & k \end{Bmatrix} (W_1^{(1jjs)}(l_1) \cdot W_{-1}^{(1jjs)}(l_2)) \quad (8.14)
 \end{aligned}$$

а необходимые выражения при $N'_1 = N_1 + 2$, $N'_2 = N_2 - 2$ получаются заменой $l_i \rightleftharpoons l'_i$ в (8.14). Нам остается рассмотреть случай $N'_1 = N_1 - 1$, $N'_2 = N_2 + 1$ (распределения 1211, 1112, 1222, 2212). Для первых двух распределений имеем

$$[i\tilde{j}]^{(k_0)} \times [v\tilde{t}]^{(k_0)} \stackrel{(00)}{=} (-1)^{l_1 + l_2 + k} \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{Q, Q'} \begin{bmatrix} q & Q & Q' \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \times$$

$$\begin{aligned}
 & \times \left[a_{m_2}^{(q, l_2, s)} \times \left[a_{m_1}^{(q, l_1, s)} \times W(l_1) \right]_{m_1}^{(Qk0), (Q' l_2, s)} \right]^{(00)} + R(-1)^{\mathcal{K}} \left[\frac{k}{l_1} \right]^{\frac{1}{2}} S(l_1, l_2)^{\mathcal{K}} \\
 & \times \left[a_{m_2}^{(q, l_2, s)} \times a_{m_1}^{(q, l_1, s)} \right]^{(00)}, \tag{8.15}
 \end{aligned}$$

где $\mathcal{K} = k+1$, $m_1 = \frac{1}{2}$, $m_2 = -\frac{1}{2}$ причем для I2II - $R = 0$, а для III2 - $R = 1$.

Выражения в случае распределений I222, 22I2 получаются соответственно из I2II или III2, заменяя в (8.15) $l_1 \rightleftharpoons l_2$, $m_1 \rightleftharpoons m_2$ и умножая на фазовый множитель $(-1)^{l_1+l_2+k}$, при этом $\mathcal{K} = 0$. Наконец, выражения для операторов, характеризующих распределениями последнего столбца таблицы 7.1, получаются из соответствующих формул для распределений, помещенных в третьем столбце, заменой в них $l_1 \rightleftharpoons l_2$.

Отметим, что в случае конфигураций $S_{N_1}^{N_1} / P_{N_1}^{N_1}$ оператор (7.8) имеет особенно простую структуру - он определяется операторами (8.10), первыми двумя членами в (8.13) и первым членом в (8.14), а субматричные элементы его выражаются через собственные значения операторов \hat{N} , \hat{L} , \hat{S} , $Q^{(1)}$.

В рассматриваемом подходе изучение оператора (7.9) значительно сложнее, чем оператора (7.8), в первую очередь, из-за обилия распределений (см. табл. 7.2). Однако, в случае ряда распределений выражение для оператора (7.9) можно представить в виде одной линейной комбинации неприводимых тензорных произведений тройных тензоров, в которой коэффициенты разложения для разных распределений отличаются только фазовыми множителями. Теперь мы попытаемся систематизировать такие случаи и

представить их в удобной для расчета форме.

Начнем с рассмотрения случая, когда оператор (7.9) можно представить как

$$\begin{aligned} & \left[\left[[i\tilde{i}]^{(k_1,0)} \times [i\tilde{i}]^{(A,0)} \right]^{(k_2,0)} \times [i\tilde{i}]^{(k_2,0)} \right]^{(0,0)} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \times \\ & \times \sum_{\substack{Q, Q', Q'' \\ Q''', \varepsilon}} \left[\begin{matrix} Q & Q' & Q'' \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right] \left[\begin{matrix} Q'' & Q''' & \varepsilon \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right] \left[W^{(Q, k_1, 0)}(l_i) \times W^{(Q', A, 0)}(l_i) \right] \times W^{(Q'', k_2, 0)}(l_i) \left[\begin{matrix} (Q''', k_2, 0) & (\varepsilon, 0, 0) \\ 0 & 0 \end{matrix} \right] \end{aligned} \quad (8.16)$$

Если один из рангов k_1, A, k_2 равен нулю, например, $k_2 = 0$, то $k_1 = A = k$ и

$$\left[\left[[i\tilde{i}]^{(k,0)} \times [i\tilde{i}]^{(k,0)} \right]^{(0,0)} \times [i\tilde{i}]^{(0,0)} \right]^{(0,0)} = -\frac{\hat{N}(l_i)}{\sqrt{[l_i, s]}} \left[[i\tilde{i}]^{(k,0)} \times [i\tilde{i}]^{(k,0)} \right]^{(0,0)} \quad (8.17)$$

Тензорное произведение в правой части (8.17) рассматривалось выше (см. формулу (8.1)). Остается проанализировать случаи, когда ранги k_1, A, k_2 одновременно не равны нулю. Для р-оболочки в сумме (7.5) рассматриваемые ранги могут принимать еще следующие значения: $k_1 = A = k_2 = 2$ и $k_1 = k_2 = 2$, а $A = 1$. В первом случае получаем (см. [128]):

$$\begin{aligned} & (p^N \alpha LS \parallel \left[[i\tilde{i}]^{(2,0)} \times [i\tilde{i}]^{(2,0)} \right]^{(2,0)} \times [i\tilde{i}]^{(2,0)} \parallel p^N \alpha' LS) = \frac{1}{2\sqrt{2 \cdot 3}} \frac{1}{\sqrt{[Q]}} \times \\ & \times \left\{ \sqrt{\frac{2 \cdot 3}{5}} \left[\begin{matrix} Q' & 3Q \\ M_Q & 0 & M_Q \end{matrix} \right] (p \alpha QLS \parallel \frac{8}{9} \sqrt{\frac{5 \cdot 7}{3}} (iQ^{(3)}) \parallel p \alpha Q' LS) + \right. \\ & \left. + \left[\begin{matrix} Q' & 1Q \\ M_Q & 0 & M_Q \end{matrix} \right] (p \alpha QLS \parallel \frac{1}{17\sqrt{5 \cdot 7}} \{ 8 \vec{L}^2 - \frac{3 \vec{L}^2}{3} \vec{S}^2 + 178 \} (iQ^{(1)}) \parallel p \alpha Q' LS) \right\}, \end{aligned} \quad (8.18)$$

а во втором

$$\begin{aligned}
 & (p_{\alpha}^N LS \parallel [[i\tilde{z}]^{(20)} \times [i\tilde{z}]^{(10)}]^{(20)} \times [i\tilde{z}]^{(20)}]^{(00)} \parallel p_{\alpha}' LS) = \\
 & = \frac{1}{2\sqrt{2 \cdot 3}} \frac{1}{\sqrt{|Q|}} \left\{ -\delta(Q', Q) (p_{\alpha} QLS \parallel \frac{1}{\sqrt{5}} \left\{ \frac{13}{12} \vec{L}^2 + \frac{8}{3} \vec{S}^2 - 2.5 \right\} \parallel p_{\alpha}' LS) + \right. \\
 & \left. + \sqrt{2} \begin{bmatrix} Q' & 2 & Q \\ M_Q & 0 & M_Q \end{bmatrix} (p_{\alpha} QLS \parallel \frac{2\sqrt{5}}{\sqrt{3}} Q^{(2)} \parallel p_{\alpha}' LS) \right\}. \tag{8.19}
 \end{aligned}$$

Для α -оболочки не удается получить такие простые выражения, как (8.18) и (8.19). Заметим только, что орбитальные ранги в (7.9) и (8.16) могут принимать следующие значения: $k_1 = 0, 2, 4$; $A = 0, 1, 2, 3, 4$ и $k_2 = 0, 2, 4$.

Перейдем к изучению операторов, действующих внутри конфигураций с двумя незаполненными оболочками.

В случае распределений, представленных в таблице 8.1, получаем следующее выражение для тензорного произведения (7.9):

$$\begin{aligned}
 & \left[[[i\tilde{z}]^{(k_1, 0)} \times [r\tilde{t}]^{(A0)}]^{(k_2, 0)} \times [p\tilde{z}]^{(k_2, 0)}]^{(00)} = \right. \\
 & = (-1)^{\varphi} \frac{1}{2\sqrt{2}} \sum_{\substack{Q', Q'' \\ Q''', Q}} [\begin{matrix} Q'' & Q''' & Q \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix}] [W_0^{(Q' \alpha 0)}(l_1) \times W^{(Q'' \beta 0)}(l_2) \times W^{(Q''' \gamma 0)}(l_2)]_0^{(Q \alpha 0)}]^{(00)} \tag{8.20}
 \end{aligned}$$

Таблица 8.1

Возможные распределения параметров в формуле (8.20)

$ijvtr$	α	β	γ	φ	Формула
11222	k_1	A	k_2	0	
221122	A	k_1	k_2	k_1+A+k_2	(8.20)
222211	k_2	k_1	A	0	

Соответствующее выражение в случае первых двух распределений таблицы 8.2 таковы:

$$\begin{aligned}
 & \left[[ij]^{(k_1,0)} \times [vt]^{(A,0)} \right]^{(k_2,0)} \left[[p\tilde{v}]^{(k_2,0)} \right]^{(0,0)} = (-1)^{\varphi_1} \sum_{\eta, \eta^s, \omega} (-1)^{\ell_1 + \ell_2 + A + 1} \times \\
 & \times \frac{1}{2} [k_1, A, \eta, \omega, \eta^s]^{\frac{1}{2}} \left\{ \begin{matrix} \ell_1 & \ell_1 & \eta \\ \ell_2 & \ell_2 & \omega \\ k_1 & A & k_2 \end{matrix} \right\} \frac{1}{2\sqrt{2}} \sum_{\substack{Q', Q'' \\ Q''', Q}} (-1)^{\varphi_2} \left[\begin{matrix} Q'' & Q''' & Q \\ m_2 & 0 & m_2 \end{matrix} \right] \times \\
 & \times \left[W_{m_1}^{(Q'\eta\eta^s)} \times \left[W_{\ell_2}^{(Q''\omega\eta^s)} \times W_{\ell_2}^{(Q'''\alpha 0)} \right]_{m_2}^{(Q\eta\eta^s)} \right]^{(0,0)}, \tag{8.21}
 \end{aligned}$$

а для других четырех -

$$\left[[ij]^{(k_1,0)} \times [vt]^{(A,0)} \right]^{(k_2,0)} \left[[p\tilde{v}]^{(k_2,0)} \right]^{(0,0)} = (-1)^{\varphi_1} \left[\sum_{\eta, \eta^s, \omega} (-1)^{\alpha + k_2 + \ell_1 + \ell_2 + 1} \frac{1}{2} \right] \times$$

Таблица 8.2

Возможные распределения параметров в формулах (8.21), (8.22), (8.25), (8.26)

ijvtp	ψ_1	ψ_2	ψ_3	R	α	β	Формула
122122	0	$Q'' + 1$			k_2		(8.21)
211222	$k_1 + A$	$Q' + 1$			k_2		
122221	0	$Q''' + 1$	Q	1	A	k_1	
222112	k_1	$Q' + 1$		0	k_1	A	(8.22)
212212	$k_1 + k_2$	$Q' + 1$	$Q' + A + 1 + k_1 - k_2$	1	A	k_1	
221221	$k_1 + A + k_2$	$Q''' + 1$		0	k_1	A	
221222	0			1	k_1	A	(8.25)
122222	$k_1 + A + k_2$			0	A	k_1	
111222	0			1	k_1	A	(8.26)
121122	$k_1 + A + k_2$			0	A	k_1	

$$\begin{aligned}
 & \times [\beta, k_2, \eta, \omega, \eta^s]^{1/2} \left\{ \begin{matrix} l_1 & \eta & l_1 \\ l_2 & \omega & l_2 \\ \beta & \alpha & k_2 \end{matrix} \right\} \frac{1}{2\sqrt{2}} \sum_{\substack{Q', Q'' \\ Q'', Q}} (-1)^{\varphi_2} \begin{bmatrix} Q'' & Q'' & Q \\ 0 & m_2 & m_2 \end{bmatrix} \times \\
 & \times \left[W_{m_1}^{(Q'\eta^s)} \times \left[W_{(l_2)}^{(Q\alpha 0)} \times W_{(l_2)}^{(Q\omega\eta^s)} \right]_{m_2}^{(Q\eta^s)} \right]^{(00)} + R \sum_{\eta, \eta^s} (-1)^{l_1+l_2+\eta+k_2+1} \frac{1}{2} [\beta, \alpha, k_2, \eta, \eta^s]^{1/2} \times \\
 & \times \left\{ \begin{matrix} l_2 & \alpha & l_2 \\ l_2 & l_1 & l_1 \\ k_2 & l_1 & \beta \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} l_1 & l_1 & l_1 \\ l_2 & l_2 & k_2 \end{matrix} \right\} \frac{1}{2\sqrt{2}} \sum_{Q', Q} (-1)^{\varphi_3} \left[W_{m_1}^{(Q'\eta^s)} \times W_{m_2}^{(Q\eta^s)} \right]^{(00)} \Bigg], \tag{8.22}
 \end{aligned}$$

где в (8.21) и (8.22) $m_1 = m_2 = 0$.

Выражения для операторов (7.9), характеризующихся распределениями из второго столбца таблицы 7.2, получаем из соответствующих выражений для распределений из первого столбца заменой в них $l_1 \rightleftharpoons l_2$. Например, выражение для 22IIII получается из выражения для II2222 заменой $l_1 \rightleftharpoons l_2$.

Перейдем к изучению не диагональных относительно конфигураций ($N_1' \neq N_1$, $N_2' \neq N_2$) случаев. Выражения для распределений 222I2I, 2I222I, 2I2I22, 2II2I, II2I2I, 2I2III (см. третий столбец табл. 7.2) получаются соответственно из выражений для распределений 222II2, 2I22I2, I22I22, 2IIII2, II2II2, I22III умножением их на $2(-1)^{l_1+l_2+k_i}$ (где $i = 1$ для 2I2I22 и 2I2III, а $i = 2$ для остальных) и подстановкой в (8.21), (8.22)

$\varphi_2 = \varphi_3 = 0$, для первых трех распределений $m_1 = -1$, $m_2 = 1$, а для последних - $m_1 = 1$, $m_2 = -1$.

Остановимся теперь на рассмотрении операторов (7.9), характеризующихся распределениями пятого столбца табл. 7.2 ($N_1' = N_1 - 1$, $N_2' = N_2 + 1$). Первые три распределения таблицы 8.3

Таблица 8.3

Возможные распределения параметров в формулах
(8.23), (8.24)

$ijvtpr$	φ_1	α	β	m_1	m_2	Формула
I22II2	0	1/2	-1/2	1/2	-1/2	
2II2I2	k_1+A	-1/2	1/2	1/2	-1/2	
I2I22I	k_2+A	1/2	1/2	1/2	-1/2	(8.23)
I2I2I2	l_1+l_2+A	1/2	1/2	3/2	-3/2	
<hr/>						
II22I2	0	k_1	A	1/2	-1/2	(8.24)
22II2	k_1+A+k_2	A	k_1	1/2	-1/2	

определяются выражением

$$\begin{aligned}
 & \left[[i\tilde{j}] \times [vt] \right]^{(k_1,0)} \times [r\tilde{z}]^{(k_2,0)} \times [p\tilde{z}]^{(k_2,0)} \times [r\tilde{z}]^{(0,0)} = (-1) \sum_{\substack{\eta, \eta', \eta'' \\ j, j_s}} \varphi_1 (-1)^{l_2+A+j+\eta'+k_2+1} \times \\
 & \times \frac{1}{2\sqrt{2}} [k_1, k_2, A, \eta, \eta', j, j_s] \left\{ \begin{matrix} l_1 & l_1 & \eta \\ l_2 & l_2 & \eta' \\ k_1 & A & k_2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \eta & l_1 & j \\ l_2 & \eta' & k_2 \end{matrix} \right\} \sum_{\substack{Q_v, Q'_v \\ Q_d, Q'_d}} \left[\begin{matrix} q & q & Q_v \\ \alpha & \beta & \alpha+\beta \end{matrix} \right] \times \\
 & \times \left[\begin{matrix} Q_v & q & Q'_v \\ \alpha+\beta & m_1 & \alpha-\beta & m_1 \end{matrix} \right] \left[\begin{matrix} q & q & Q_d \\ -\alpha & -\beta & \alpha-\beta \end{matrix} \right] \left[\begin{matrix} Q_d & q & Q'_d \\ -\alpha-\beta & m_2 & \alpha+\beta & m_2 \end{matrix} \right] \times
 \end{aligned}$$

$$\times \left[[W(l_1) \times a^{(q, \eta, \eta')}]_{m_1} \times [W(l_2) \times a^{(q, l_2, \eta')}]_{m_2} \right]^{(0,0)} \quad (8.23)$$

выражений для I2222 и 22I222 выносятся в скобки

а последние два -

$$\begin{aligned}
 & \left[\left[i\tilde{j} \right]^{(k_1 0)} \times \left[v\tilde{t} \right]^{(A 0)} \right]^{(k_2 0)} \times \left[p\tilde{z} \right]^{(k_2 0)} \right]^{(00)} = (-1)^{\varphi_1} \sum_{\varrho} (-1)^{\varrho_1 + \varrho + \beta + k_2} \times \\
 & \times \left[k_2, \eta \right]^{1/2} \left\{ \begin{matrix} \alpha & l_1 & \eta \\ l_2 & \beta & k_2 \end{matrix} \right\} \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\substack{Q', Q'' \\ Q''', Q}} \begin{bmatrix} Q' & \varrho & Q'' \\ 0 & m_1 & m_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q''' & \varrho & Q \\ 0 & m_2 & m_2 \end{bmatrix} \times \\
 & \times \left[W(l_1) \times \alpha^{(Q' \alpha 0)} \right]_{m_1}^{(\varrho l_1 s)} \times \left[W(l_2) \times \alpha^{(Q'' \beta 0)} \right]_{m_2}^{(\varrho l_2 s)} \right]^{(00)}.
 \end{aligned} \tag{8.24}$$

Оператор (7.9), характеризуемый распределениями 22I222 и I22222, определяется формулой

$$\begin{aligned}
 & \left[\left[i\tilde{j} \right]^{(k_1 0)} \times \left[v\tilde{t} \right]^{(A 0)} \right]^{(k_2 0)} \times \left[p\tilde{z} \right]^{(k_2 0)} \right]^{(00)} = (-1)^{\varphi_1} (-1)^{\alpha + \beta + k_2} \frac{1}{\sqrt{2}} \times \\
 & \times \sum_{\substack{Q', Q'' \\ Q''', Q}} \begin{bmatrix} Q' & Q'' & Q''' \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varrho & Q''' & Q \\ m_2 & 0 & m_2 \end{bmatrix} \left[\alpha_{m_1}^{(\varrho l_1 s)} \times \left[\alpha^{(\varrho l_2 s)} \times \left[W(l_2) \times W(l_2) \right]^{(Q' \alpha 0)} \right]_{m_2}^{(Q'' \beta 0)} \right]_{m_2}^{(Q l_1 s)} \right]^{(00)} + \\
 & + R (-1)^{k_1 + l_2 + A + l_1} \frac{[k_1, A]^{1/2}}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{matrix} l_2 & l_2 & k_1 \\ k_2 & A & l_1 \end{matrix} \right\} \frac{(-1)^{\alpha}}{\sqrt{2}} \sum_{Q', Q} \begin{bmatrix} \varrho & Q' & Q \\ m_2 & 0 & m_2 \end{bmatrix} \times \\
 & \times \left[\alpha_{m_1}^{(\varrho l_1 s)} \times \left[\alpha^{(\varrho l_2 s)} \times W(l_2) \right]_{m_2}^{(Q' k_2 0)} \right]_{m_2}^{(Q l_1 s)} \right]^{(00)},
 \end{aligned} \tag{8.25}$$

где $m_1 = 1/2, m_2 = -1/2, \mathcal{K} = 0$,
и таблицей 8.2.

Выражения для распределений I2I111 и III211 получаются из выражений для I22222 и 22I222 заменой в них $l_1 \rightleftharpoons l_2, m_1 \rightleftharpoons m_2$

и умножением соответственно на фазовые множители $(-1)^{\ell_1 + \ell_2 + k_1}$ и $(-1)^{\ell_1 + \ell_2 + A}$, $\mathcal{X} = k_1 + 1$.

Оператор (7.9), характеризуемый последними двумя распределениями таблицы 8.2, определяется формулой

$$\begin{aligned}
 & \left[\left[[i\tilde{j}] \right] \times [v\tilde{t}] \right]^{(k_1, 0)} \times \left[[r\tilde{z}] \right]^{(k_2, 0)} \left[[n\tilde{z}] \right]^{(k_2, 0)} \left[[r\tilde{z}] \right]^{(0, 0)} = (-1) \sum_{\eta} \psi_{\eta} \ell_2^{k_1 + \eta} \left[\beta, \eta \right] \left\{ \beta \alpha k_2 \right\}_{\eta \ell_2 \ell_1} \times \\
 & \times \frac{1}{2} \sum_{\substack{Q', Q'' \\ Q''', Q}} \left[m_1, 0, m_1 \right] \left[m_2, 0, m_2 \right] \left[a^{(q\ell_1 s)} \times W(\ell_1) \right]_{m_1}^{(Q'\alpha 0), (Q''\eta s)} \times \left[a^{(q\ell_2 s)} \times W(\ell_2) \right]_{m_2}^{(Q'''\alpha 0), (Q''\eta s)} \left[[r\tilde{z}] \right]^{(0, 0)} + \\
 & + R (-1)^{\ell_1 + \ell_2 + k_2 + \mathcal{X} + 1} \frac{[\alpha, \beta]^{1/2}}{2} \left\{ \ell_1 \ell_2 \beta \right\}_{k_2 \alpha \ell_1} \sum_{Q', Q''} \left[m_1, 0, m_1 \right] \times \\
 & \times \left[a^{(q\ell_1 s)} \times [a^{(q\ell_2 s)} \times W(\ell_2)] \right]_{m_2}^{(Q'\alpha 0), (Q''\eta s)} \left[[r\tilde{z}] \right]^{(0, 0)}, \tag{8.26}
 \end{aligned}$$

где $m_1 = 1/2$, $m_2 = -1/2$, $\mathcal{X} = 0$.

Выражения для распределений 22I2II и I222II получаются из III222 и I2II22 заменой $\ell_1 \rightleftharpoons \ell_2$, $m_1 \rightleftharpoons m_2$ в (8.26) и умножением соответственно на фазовые множители $(-1)^{\ell_1 + \ell_2 + A}$, $\mathcal{X} = k_1 + 1$ и $(-1)^{\ell_1 + \ell_2 + k}$.

Наконец, рассмотрим последние два распределения пятого столбца таблицы 7.2. Для 2222I2 имеем

$$\left[\left[[i\tilde{j}] \right] \times [v\tilde{t}] \right]^{(k_1, 0)} \times \left[[r\tilde{z}] \right]^{(k_2, 0)} \left[[n\tilde{z}] \right]^{(k_2, 0)} \left[[r\tilde{z}] \right]^{(0, 0)} = (-1)^{\ell_1 + \ell_2 - k_2} \frac{1}{2} \sum_{\substack{Q', Q'' \\ Q''', Q}} \left[Q' Q'' Q''' \right] \times$$

$$\times \begin{bmatrix} Q'' q Q \\ 0 m_1 m_2 \end{bmatrix} \left[\alpha_{m_1}^{(q l_1 s)} \times \left[\left[W_{(l_2)}^{(Q' k_1 0)} \times W_{(l_2)}^{(Q'' A 0)} \right] \times a^{(Q'' k_2 0)} \right]_{m_2}^{(q l_1 s)} \right]_{m_2}^{(Q l_1 s)} (00), \quad (8.27)$$

где $m_1 = 1/2$, $m_2 = -1/2$,

а выражение для распределения IIII2 получается заменой $l_1 \rightleftharpoons l_2$, $m_1 \rightleftharpoons m_2$ в (8.27) с последующим умножением на фазовый множитель $(-1)^{l_1 + l_2 - k_2}$.

В случае $N_1' = N_1 - 3$ и $N_2' = N_2 + 3$ (седьмой столбец табл. 7.2) имеется одно распределение I2I2I2, а выражение для оператора определяется формулой (8.23) и таблицей 8.3.

Выражения для операторов, характеризующихся распределениями IU, UI, VII (см. табл. 7.2) столбцов, определяются заменой $l_1 \rightleftharpoons l_2$ в соответствующих формулах для операторов с распределениями из III, U и VII столбцов. Например, выражение для оператора (7.9), характеризующегося 2IUI2I (UI столбец), получается таким путем из выражения для тензорного произведения (7.9) с распределением I22I12 (см. U столбец и формулу (8.23)).

Итак, мы рассмотрели в изучаемом подходе неприводимое тензорное произведение (7.9), представляющее спин-угловую часть оператора, соответствующего диаграмме эффективного оператора с шестью свободными концами (раздел 5).

Из полученных результатов следует, что определение матричных элементов операторов (7.8) и (7.9) сводится к расчету субматричных элементов операторов следующих типов:

$$\left[W_{m_1}^{(k_1 k_{L_1} k_{S_1})} \times W_{m_2}^{(k_2 k_{L_2} k_{S_2})} \right]^{(K_L K_S)}, \quad (8.28)$$

$$[W_{m_1}^{(k_{Q_1} k_{L_1} k_{S_1})} \times [W_{(l_2)}^{(k'_{Q_2} k'_{L_2} k'_{S_2})} \times W_{(l_2)}^{(k''_{Q_2} k''_{L_2} k''_{S_2})} (k_{Q_2} k_{L_2} k_{S_2})]_{m_2}^{(00)}, \quad (8.29)$$

$$[a_{m_1}^{(q l_1 s)} \times [a^{(q l_2 s)} \times W_{(l_2)}^{(k'_{Q_2} k'_{L_2} k'_{S_2})} (k_{Q_2} l_1 s)]_{m_2}^{(00)}, \quad (8.30)$$

$$[W_{(l_1)}^{(k'_{Q_1} k'_{L_1} k'_{S_1})} \times a^{(q l_1 s)} (k_{Q_1} k_{L_1} k_{S_1})]_{m_1} \times [W_{(l_2)}^{(k'_{Q_2} k'_{L_2} k'_{S_2})} \times a^{(q l_2 s)} (k_{Q_2} k_{L_2} k_{S_2})]_{m_2}^{(00)}, \quad (8.31)$$

$$[a^{(q l_1 s)} \times W_{(l_1)}^{(k'_{Q_1} k'_{L_1} k'_{S_1})} (k_{Q_1} k_{L_1} k_{S_1})]_{m_1} \times [a^{(q l_2 s)} \times W_{(l_2)}^{(k'_{Q_2} k'_{L_2} k'_{S_2})} (k_{Q_2} k_{L_2} k_{S_2})]_{m_2}^{(00)}, \quad (8.32)$$

$$[a_{m_1}^{(q l_1 s)} \times [a^{(q l_2 s)} \times [W_{(l_2)}^{(k'_{Q_2} k'_{L_2} k'_{S_2})} \times W_{(l_2)}^{(k''_{Q_2} k''_{L_2} k''_{S_2})} (k_{Q_2} k_{L_2} k_{S_2})]_{m_2}^{(k''_{Q_2} l_1 s)}]_{m_1}^{(00)}, \quad (8.33)$$

$$[a_{m_1}^{(q l_1 s)} \times [[W_{(l_2)}^{(k'_{Q_2} k'_{L_2} k'_{S_2})} \times W_{(l_2)}^{(k''_{Q_2} k''_{L_2} k''_{S_2})} (k_{Q_2} k_{L_2} k_{S_2}) \times a^{(q l_2 s)}]_{m_2}^{(k''_{Q_2} l_1 s)}]_{m_1}^{(00)}. \quad (8.34)$$

Субматричные элементы оператора (7.7) были получены в седьмом разделе (см. формулы (7.12) и (7.13)).

Матричные элементы операторов (8.28)–(8.34) определяются согласно методике работ [40, 48], рассматривая их как произведение операторов $D_{m_1}^{(k_{Q_1} k_{L_1} k_{S_1})}$ и $\sigma_{m_2}^{(k_{Q_2} k_{L_2} k_{S_2})}$, действующих

на различные оболочки.

$$(\Psi \parallel [\mathcal{D}_{m_1}^{(k_{a_1}, k_{L_1}, k_{S_1})} \times \mathcal{O}_{m_2}^{(k_{a_2}, k_{L_2}, k_{S_2})}]^{(00)} \parallel \Psi') \equiv$$

$$\equiv (n_1 l_1 n_2 l_2 \alpha_1 Q_1 L_1 S_1 M_{Q_1} \alpha_2 Q_2 L_2 S_2 M_{Q_2} L S \parallel [\mathcal{D}_{m_1}^{(k_{a_1}, k_{L_1}, k_{S_1})} \times \mathcal{O}_{m_2}^{(k_{a_2}, k_{L_2}, k_{S_2})}]^{(00)} \parallel$$

$$\parallel n_1 l_1 n_2 l_2 \alpha_1' Q_1' L_1' S_1' M_{Q_1}' \alpha_2' Q_2' L_2' S_2' M_{Q_2}' L S) =$$

$$= (-1)^{\varphi + L_2' + [L_1' + k_{L_1} + k_{S_1} + S_2' + S + S_1' + 2(k_{a_1} + k_{a_2})]} \frac{[L, S]^{1/2}}{[k_{L_1}, k_{S_1}, Q_1, Q_2]^{1/2}} [Q_1' k_{a_1} Q_1] [Q_2' k_{a_2} Q_2] \times$$

$$\times \left. \begin{matrix} \{L_1 L_2 L\} \\ \{L_2' L_1' k_{L_1}\} \end{matrix} \right\} \left. \begin{matrix} \{S_1 S_2 S\} \\ \{S_2' S_1' k_{S_1}\} \end{matrix} \right\} (n_1 l_1 \alpha_1 Q_1 L_1 S_1 \parallel \mathcal{D}_{(l_1)}^{(k_{a_1}, k_{L_1}, L_{S_1})} \parallel n_2 l_2 \alpha_1' Q_1' L_1' S_1') \times$$

$$\times (n_2 l_2 \alpha_2 Q_2 L_2 S_2 \parallel \mathcal{O}_{(l_2)}^{(k_{a_2}, k_{L_2}, k_{S_2})} \parallel n_2 l_2 \alpha_2' Q_2' L_2' S_2').$$

(8.35)

Для операторов (8.30)–(8.34) $\varphi = N_1 - 2m_1$, а для остальных случаев $\varphi = 0$.

Особенно простые выражения получаются в частных случаях оператора (8.28), когда $k_{a_1} = k_{a_2} = k_{S_1} = k_{S_2} = \mathcal{K}_L = \mathcal{K}_S = 0$, а $k_{L_1} = k_{L_2} = I$ (имеем оператор $(L^{(1)}(l_1) \cdot L^{(1)}(l_2))$ и когда $k_{a_1} = k_{a_2} = k_{L_1} = k_{L_2} = 0$, а $k_{S_1} = k_{S_2} = I$ (оператор $(S^{(1)}(l_1) \cdot S^{(1)}(l_2))$). Тогда

(8.36)

$$\begin{aligned}
 & \cdot (n_1 \ell_1^{N_1} n_2 \ell_2^{N_2} \alpha_1 L_1 S_1 \alpha_2 L_2 S_2 \| (L(\ell_1) \cdot L(\ell_2)) \| n_1 \ell_1^{N_1} n_2 \ell_2^{N_2} \alpha_1' L_1' S_1' \alpha_2' L_2' S_2' L' S') = \\
 & = \delta(LS, L'S') \delta(\alpha_1 L_1 S_1, \alpha_1' L_1' S_1') \delta(\alpha_2 L_2 S_2, \alpha_2' L_2' S_2') \times \\
 & \times \frac{1}{2} \sqrt{[L, S]} [L(L+1) - L_1(L_1+1) - L_2(L_2+1)] \quad , \quad (8.36)
 \end{aligned}$$

а для субматричного элемента оператора $(S(\ell_1) \cdot S(\ell_2))$ необходимо в (8.36) выражения в квадратных скобках заменить на $S(S+1) - S_1(S_1+1) - S_2(S_2+1)$. При $k_{L_1} = k_{S_1} = k_{L_2} = k_{S_2} = 0$, а $k_{\alpha_1} = k_{\alpha_2} = 1$ получаем

$$\begin{aligned}
 & (n_1 \ell_1^{N_1} n_2 \ell_2^{N_2} \alpha_1 Q_1 L_1 S_1 M_{Q_1} \alpha_2 Q_2 L_2 S_2 M_{Q_2} \| Q_{\mp 1}^{(1)}(\ell_1) Q_{\pm 1}^{(1)}(\ell_2) \| n_1 \ell_1^{N_1} n_2 \ell_2^{N_2} \alpha_1' Q_1' L_1' S_1' M_{Q_1}' \alpha_2' Q_2' L_2' S_2' M_{Q_2}' L' S') = \\
 & = \delta(LS, L'S') \delta(\alpha_1 Q_1 L_1 S_1, \alpha_1' Q_1' L_1' S_1') \delta(\alpha_2 Q_2 L_2 S_2, \alpha_2' Q_2' L_2' S_2') \delta(M_{Q_1} \mp 1, M_{Q_1}') \times \\
 & \times \delta(M_{Q_2} \pm 1, M_{Q_2}') \left(-\frac{1}{2} \right) \left\{ (Q_1 \pm M_{Q_1}') (Q_1 \mp M_{Q_1}' + 1) (Q_2 \mp M_{Q_2}') (Q_2 \pm M_{Q_2}' + 1) [L, S] \right\}^{1/2} . \quad (8.37)
 \end{aligned}$$

Здесь верхние знаки в правой части (8.37) представляют случай проекций $m_1 = -1, m_2 = 1$, а нижние - $m_1 = 1, m_2 = -1$.

При $m_1 = m_2 = 0$ находим

$$\begin{aligned}
 & (n_1 \ell_1^{N_1} n_2 \ell_2^{N_2} \alpha_1 Q_1 L_1 S_1 M_{Q_1} \alpha_2 Q_2 L_2 S_2 M_{Q_2} \| Q_0^{(1)}(\ell_1) Q_0^{(1)}(\ell_2) \| n_1 \ell_1^{N_1} n_2 \ell_2^{N_2} \alpha_1' Q_1' L_1' S_1' M_{Q_1}' \alpha_2' Q_2' L_2' S_2' M_{Q_2}' L' S') = \\
 & = -\delta(LS, L'S') \delta(\alpha_1 Q_1 L_1 S_1, \alpha_1' Q_1' L_1' S_1') \delta(\alpha_2 Q_2 L_2 S_2, \alpha_2' Q_2' L_2' S_2') \delta(M_{Q_1} M_{Q_2}, M_{Q_1}' M_{Q_2}') \times \\
 & \times M_{Q_1} M_{Q_2} [L, S]^{1/2} . \quad (8.38)
 \end{aligned}$$

Субматричные элементы операторов $\mathcal{D}(\ell)^{(k_Q k_L k_S)}$, $\mathcal{O}(\ell)^{(k_Q k_L k_S)} \equiv$

$$\equiv [\alpha^{(q \ell s)} \times W(\ell)^{(k'_Q k'_L k'_S)}]^{(k_Q k_L k_S)}, [W(\ell)^{(k'_Q k'_L k'_S)} \times \alpha^{(q \ell s)}]^{(k_Q k_L k_S)},$$

$$[W(\ell)^{(k'_Q k'_L k'_S)} \times W(\ell)^{(k''_Q k''_L k''_S)}]^{(k_Q k_L k_S)}, [\alpha^{(q \ell s)} \times [W(\ell)^{(k'_Q k'_L k'_S)} \times W(\ell)^{(k''_Q k''_L k''_S)}]]^{(k_Q k_L k_S)},$$

$$[[W(\ell)^{(k'_Q k'_L k'_S)} \times W(\ell)^{(k''_Q k''_L k''_S)}] \times \alpha^{(q \ell s)}]^{(k_Q k_L k_S)}$$

(см. (8.35)) внутри оболочки эквивалентных электронов определяются как субматричные элементы неприводимого тензорного произведения $[\mathcal{D}^{(k'_Q k'_L k'_S)} \times \mathcal{D}^{(k''_Q k''_L k''_S)}]^{(k_Q k_L k_S)}$ двух тензоров $\mathcal{D}^{(k'_Q k'_L k'_S)}$,

$$\mathcal{D}^{(k'_Q k'_L k'_S)} \equiv \alpha^{(q \ell s)}, W(\ell)^{(k_Q k_L k_S)}, [W(\ell)^{(k'_Q k'_L k'_S)} \times W(\ell)^{(k''_Q k''_L k''_S)}]^{(k_Q k_L k_S)}$$

т.е.

$$(\ell \alpha Q L S \parallel \mathcal{D}^{(k'_Q k'_L k'_S)} \times \mathcal{D}^{(k''_Q k''_L k''_S)} \parallel \ell \alpha' Q' L' S') =$$

$$= (-1)^{Q+Q'+k_Q+L'+L'+k_L+S'+S'+k_S} [k_Q, k_L, k_S]^{1/2} \sum_{\alpha_T Q_T L_T S_T} \left\{ \begin{matrix} k'_Q & k''_Q & k_Q \\ Q' & Q & Q_T \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} k'_L & k''_L & k_L \\ L' & L & L_T \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} k'_S & k''_S & k_S \\ S' & S & S_T \end{matrix} \right\} \times$$

$$\times (\ell \alpha Q L S \parallel \mathcal{D}^{(k'_Q k'_L k'_S)} \parallel \ell \alpha_T Q_T L_T S_T) (\ell \alpha_T Q_T L_T S_T \parallel \mathcal{D}^{(k''_Q k''_L k''_S)} \parallel \ell \alpha' Q' L' S').$$

(8.39)

При рассмотрении операторов (8.14)–(8.16) появляется квази-спиновый оператор обобщенного ранга $Q^{(k)}$, матричный элемент которого определяется формулой (см. (3.59) работы [48]):

$$(nl\alpha LS \| Q_m^{(k)} \| nl\alpha' L'S') = \frac{1}{\sqrt{[Q]}} \begin{bmatrix} Q' & k & Q \\ M'_{Qm} & & M_Q \end{bmatrix} \sqrt{[L, S]} \left(\frac{i}{2}\right)^k$$

$$\times \left[\frac{k!(2Q+k+1)!}{(2Q-k)!(2k-1)!!} \right]^{1/2} \delta(\alpha LS, \alpha' L'S') \quad (8.40)$$

Важно заметить, что в изучаемых нами случаях операторов (8.29), (8.33), (8.34) один из спиновых рангов k'_{S_2} или k''_{S_2} обязательно равен нулю, а для оператора (8.30) всегда $k'_{S_2} = 0$ и поэтому одно суммирование по спиновым рангам отпадает, тем самым значительно упрощая расчет матричных элементов.

Надо иметь в виду, что для полного набора различных типов операторов необходимо еще учесть операторы, получаемые заменой в (8.29)-(8.34) $l_1 \rightleftharpoons l_2$.

В настоящем разделе, применяя методику квазиспина для оболочки эквивалентных электронов, определены выражения для субматричных элементов операторов спин-угловой части эффективно-нерелятивистского гамильтониана атома (в первых двух порядках ТВ). Формулы приведены в такой форме, чтобы для частей субматричных элементов, зависящих от квантовых чисел α , Q , L , S отдельных оболочек, можно было бы составить таблицы субматричных элементов с целью их применения в практических расчетах на ЭВМ в виде входных данных. Отметим, что такие таблицы не зависят от числа электронов N в оболочке l^N и поэтому являются общими относительно диагональных и недиагональных конфигураций. Так, таблицы субматричных элементов операторов $W_{(l)}^{(k_Q k_L k_S)}$, $[W_{(l)}^{(k'_Q k'_L k'_S)} \times W_{(l)}^{(k''_Q k''_L k''_S)}]^{(k_Q k_L k_S)}$ могут использоваться при расчете субматричных элементов с $N'_1 = N_1$,

$N_1 - 2, N_1 + 2$, а операторы $\left[a^{\dagger} \sqrt{W}^{(q\ell s)}(k'_a k'_L k'_s) \right] (k_a k_L k_s)$,
 $\left[\sqrt{W}^{(q\ell s)}(k_a k_L k_s) \right] a^{(q\ell s)}$ - с $N'_1 = N_1, N_1 - 1, N_1 + 1, N_1 + 3,$
 $N_1 - 3$. Полученные выражения для спин-угловых частей членов ряда

ТВ, характеризующихся диаграммами с двумя, четырьмя и шестью свободными концами, также могут быть отправным пунктом для полумпирических исследований энергетического спектра эффективного гамильтониана атома [129, 130], так как в нашем подходе легко классифицировать члены ряда, имеющие одинаковую спин-угловую структуру, а их радиальную часть рассматривать как полумпирические параметры.

Таким образом, в этом разделе спин-угловые части эффективного гамильтониана атома выражены через неприводимые тензоры в квазиспиновых пространствах отдельных оболочек. Хотя в полученных выражениях не содержатся промежуточные суммы по Ψ'' и Ψ''' (в отличие от выражений седьмого раздела), однако при вычислении субматричных элементов требуется значительный объем оперативной памяти ЭВМ для размещения таблиц. Таким образом, при выборе одного из предложенных в работе вариантов вычисления спин-угловой части надо принять во внимание особенности решаемой задачи: экономить либо время вычисления, либо оперативную память ЭВМ.

$$H_{\text{эфф}} = H_0 + H_1 + H_2 + \dots \quad (9.3)$$

где первый член означает кинетическую энергию электронов, второй - энергию взаимодействия электронов с ядром, третий - взаимодействие с внешним полем.

Эффективный гамильтониан атома $H_{\text{эфф}}$ в первом порядке ТВ используется в следующем виде:

9. Краткое описание системы программ для расчета энергетического спектра эффективного гамильтониана атома [70]

Нахождение энергетического спектра по методу ТВ требует проведения большого объема вычислений, связанных с определением волновых функций атомов и ионов и расчетом матричных элементов различных физических операторов. Выполнение таких расчетов невозможно без применения ЭВМ, что, в свою очередь, вызывает необходимость создания соответствующего программного обеспечения.

Создаваемый в диссертации комплекс программ для нахождения энергетического спектра базируется на решении уравнения

$$H_{эф} |\psi_i\rangle = E_i |\psi_i\rangle \quad (i=1, \dots, d) \quad , \quad (9.1)$$

где $H_{эф}$ в первых двух порядках берется в следующем виде:

$$H_{эф} = PH_0P + H_{эф}^{(1)} + H_{эф}^{(2)} \quad . \quad (9.2)$$

Невозмущенный гамильтониан H_0 состоит из трех членов:

$$H_0 = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} - \sum_{i=1}^N \frac{Ze^2}{r_i} + U(r) \quad , \quad (9.3)$$

где первый член описывает кинетическую энергию электронов, второй - энергию взаимодействия электронов с ядром, третий - взаимодействие с внешним полем.

Эффективный гамильтониан атома $H_{эф}^{(1)}$ в первом порядке ТВ используется в следующем виде:

$$H_{\text{эф}}^{(1)} = PVP + PWP + PFP, \quad (9.4)$$

где V - электростатическое взаимодействие между электронами (см. формулу (3.14)). Операторы W и F представляют релятивистские поправки порядка α^2 (приближение Паули [6,131]):

$$W = H^{00} + H^{c''} + H^{ssc}, \quad (9.5)$$

$$F = H^{s0} + H^{c'} + H^M - U(r). \quad (9.6)$$

В (9.5) и (9.6)

$$H^{s0} = \sum_i^N \varphi(r_i) (\vec{l}_i \cdot \vec{s}_i) \quad (9.7)$$

- упрощенный оператор спин-орбитального взаимодействия;

$$H^{00} = -\frac{e^2}{2m^2c^2} \sum_{i>j}^N \frac{1}{r_{ij}} \left\{ (\vec{p}_i \cdot \vec{p}_j) + \frac{(\vec{r}_{ij} \cdot (\vec{r}_{ij} \cdot \vec{p}_i) \vec{p}_j)}{r_{ij}^2} \right\} \quad (9.8)$$

- оператор взаимодействия орбита-орбита;

$$H^c = H^{c'} + H^{c''} = \frac{Z\pi e^2 \hbar^2}{2m^2c^2} \sum_{i=1}^N \delta(\vec{r}_i) - \frac{\pi e \hbar^2}{m^2c^2} \sum_{i>j}^N \delta(\vec{r}_{ij}) \quad (9.9)$$

- оператор контактного взаимодействия (взаимодействие Дарвина);

$$H^{SSC} = -\frac{e^2 \hbar^2}{m^2 c^2} \frac{8\pi}{3} \sum_{i>j}^N (\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j) \delta(\vec{r}_{ij}) \quad (9.10)$$

- оператор контактного спин-спинового (спин-контактного) взаимодействия;

$$H^M = -\frac{1}{8m^3 c^2} \sum_{i=1}^N \vec{p}_i^4 \quad (9.11)$$

- поправка, обусловленная зависимостью массы электрона от скорости.

В формулах (9.3), (9.7)-(9.11) использованы следующие обозначения: α - постоянная тонкой структуры, e - абсолютная величина электрона, а m и \vec{p}_i - его масса и импульс соответственно, c - скорость света, \hbar - постоянная Планка, r_i - расстояние электрона с координатой i до ядра, ℓ, s - соответственно орбитальный и спиновой момент количества движения электрона, Ze - заряд ядра, r_{ij} - расстояние между электронами, $\delta(\vec{r})$ - δ -функция Дирака от векторного аргумента, $\psi(r)$ - радиальный интеграл, определенный по формулам (27.10)-(27.14) работы [47], N - число электронов.

Второй порядок эффективного гамильтониана согласно выражению (5.6) используется в виде

$$H_{эф}^{(2)} = H_{эф,в}^{(2)} + F_{эф}^{(2)}, \quad (9.12)$$

где $H_{эф,в}^{(2)}$ определен в пятом разделе (см. (5.8)), а $F_{эф}^{(2)}$ выражается формулой (5.9), в которой последний член отбрасывается. Оператор F состоит из суммы одноэлектронных операторов, т.е. $F = H^{so} + H^{c'} + H^M$. Алгебраические выражения для отдельных

членов $F_{эф}^{(2)}$ получаются из общих формул (см. приложение). Для H^{so} ранги принимают значения $K=L=1$ и $\Gamma=0$, а для $H^{c'}$ и H^M - $K=L=\Gamma=0$.

Модельные функции $|\varphi_i\rangle$ строятся из собственных функций Φ_i ($i = 1, \dots, d$) нулевого гамильтониана H_0 (9.3).

Уравнение (9.1) решается следующим образом. В первую очередь формируется матрица энергии в базисе волновых функций Φ_i ($i = 1, \dots, d$) в LS-связи. Для этого вычисляются все матричные элементы оператора $H_{эф}$ внутри и между конфигурациями. Отсюда следует, что для формирования матрицы $H_{эф}$ во втором порядке ТВ могут быть использованы программы определения энергетической матрицы гамильтониана H по методу наложения конфигураций [6, 16]. Таким образом, за основу были взяты уже существующие программы расчета спектра методом наложения конфигураций [132, 133, 134], которые входят в подсистему автоматизированного вычисления спектров многоэлектронных атомов (ПАВС) [135]. В диссертационной работе данный комплекс был дополнен программами, которые вычисляют матричные элементы операторов $H_{эф}^{(2)}$, $F_{эф}^{(2)}$. Эти операторы отличаются своей более сложной структурой от операторов, матричные элементы которых вычисляет система ПАВС, и поэтому появляются дополнительные трудности при вычислении их матричных элементов. Для того, чтобы лучше представить структуру комплекса программ, рассчитывающего энергетический спектр в первых двух порядках ТВ, сначала проведем краткий анализ выражений для операторов $H_{эф}^{(2)}$ и $F_{эф}^{(2)}$, а только потом рассмотрим сам алгоритм определения матричных элементов этих операторов.

Операторы $H_{эф}^{(2)}$, $F_{эф}^{(2)}$ могут быть представлены в виде

суммы фейнмановских диаграмм, просуммированных по одночастичным магнитным квантовым числам. Каждая такая фейнмановская диаграмма разделяется на две части. Первая часть (спин-угловая часть) содержит операторы вторичного квантования, представленные в виде неприводимых тензорных произведений, а вторая часть (амплитуда фейнмановской диаграммы) – оставшиеся величины. Амплитуда в свою очередь состоит из радиальной части, в которую входит энергетический множитель и радиальные интегралы, матрицы преобразования, которая в общем случае состоит из суммы произведений обобщенных коэффициентов К.-Г., и субматричных элементов операторов $\bar{f}^{(k\lambda)}$, $C^{(k)}$. Обе эти части вычисляются отдельно, что позволяет лучше использовать возможности ЭВМ.

Все фейнмановские диаграммы подразделяются на две группы по числу операторов вторичного квантования и по кратности бесконечных сумм. В первую группу входят диаграммы, которые не имеют операторов вторичного квантования. Вторая группа состоит из диаграмм, которые имеют два оператора вторичного квантования. В третью группу входят диаграммы, которые имеют четыре, а в четвертую – шесть операторов вторичного квантования. При классификации диаграмм по кратности бесконечных сумм выделяются три разные группы. Первая содержит диаграммы, которые не имеют бесконечных сумм. Вторая группа состоит из диаграмм, которые имеют одну бесконечную сумму, а третья – две бесконечные суммы.

Такая классификация диаграмм удобна тем, что позволяет разделить решение всей задачи на самостоятельные части и проводить расчеты диаграмм каждой группы независимо. Так, например, классификация по числу операторов вторичного квантования поз-

воляет объединять вычисления ряда диаграмм, которые имеют одинаковые спин-угловые части.

Теперь, после анализа операторов $H_{эф}^{(2)}$, $F_{эф}^{(2)}$, перейдем к более подробному описанию разработанного в диссертации комплекса программ, который включен в программное обеспечение ПАВС и представлен на схеме (см. рис. 9.1). Связь в комплексе между программами осуществляется как передачей информации через общие блоки, так и с помощью архивов, содержащих исходную и промежуточную информацию. Для обмена информацией с внешними запоминающими устройствами широко используется зонная запись и чтение информации [136].

Поскольку, как было отмечено выше, фейнмановские диаграммы, представляющие отдельные члены операторов $H_{эф}^{(2)}$, $F_{эф}^{(2)}$, разделяются на две самостоятельные части, то вычисления матричных элементов операторов $H_{эф}^{(2)}$, $F_{эф}^{(2)}$ производятся поэтапно. В первую очередь проводится генерация характеристик, которые нужны для вычисления радиальных интегралов и их однократных и двукратных сумм (см. блок ГИ). Так как для вычисления интегралов и особенно их сумм требуется большой ресурс времени и оперативной памяти ЭВМ, то полученные характеристики помещаются в архив АИ. Генерацию и заполнение архива АИ численными значениями радиальных интегралов осуществляет комплекс программ получения радиальных орбиталей, расчета интегралов и бесконечных сумм для операторов $H_{эф}^{(2)}$, $F_{эф}^{(2)}$ (ПИ).

После заполнения архива АИ рассчитываются амплитудные части фейнмановских диаграмм (см. блок ВАЧФ). Для этого вычисляются матрицы преобразования фейнмановской диаграммы и одноэлектронные субматричные элементы операторов $\bar{f}^{(k)}$, $C^{(k)}$,

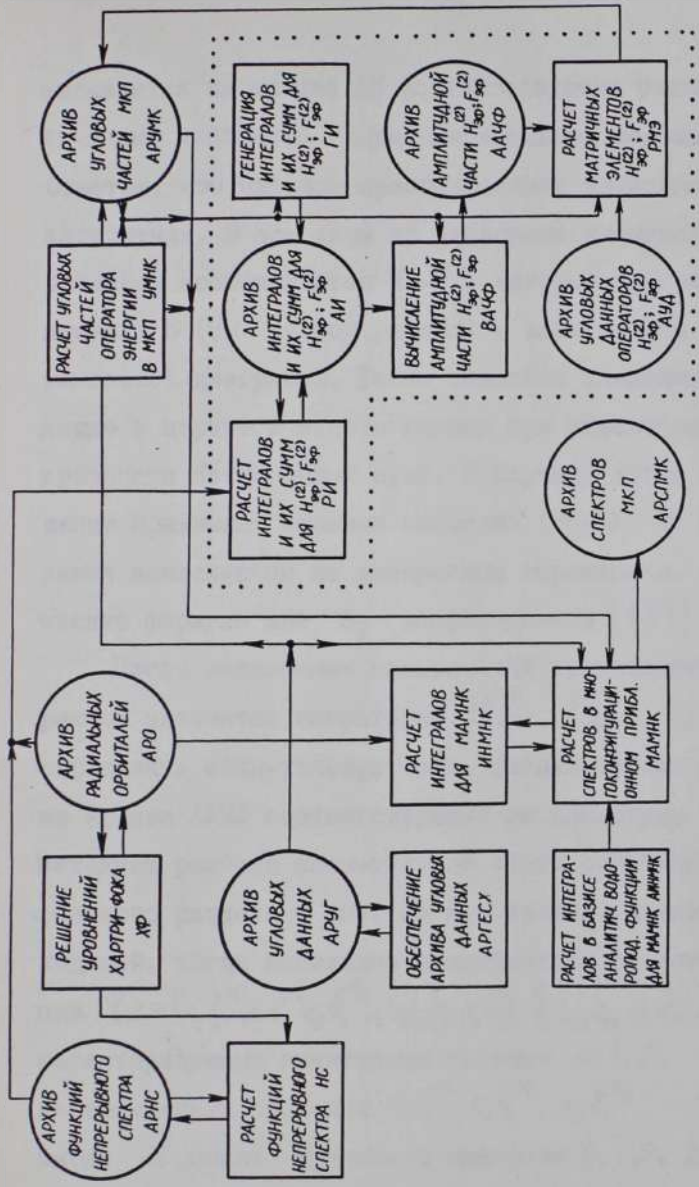


Рис.9.1. Блок-схема программ для расчета энергетического спектра в первых двух по-
 рядках ТВ. (Часть блок-схемы, которая выделена точечным контуром, изображает
 созданный комплекс программ для вычисления матричных элементов операторов
 $H_{эФ}^{(2)}, F_{эФ}^{(2)}$).

вызываются из архива АИ соответствующие радиальные части. Полученные численные значения амплитуд помещаются в архив ААЧФ. Отметим, что матрицы преобразования вычисляются по нескольким алгоритмам. В основном их численные значения получаются суммированием коэффициентов К.-Г., которые программа определяет по правилу 6 (см. шестой раздел) в зависимости от вида фейнмановской диаграммы. Таким способом вычисляются диаграммы, входящие в первую и вторую группу при классификации диаграмм по кратности бесконечных сумм. В случае, когда параметры суммирования принимают большие значения ($m_e \geq 8$) матрицы преобразования вычисляются по конкретным выражениям, используя аналитические формулы для b_j -коэффициентов [137].

После заполнения архива ААЧФ производятся вычисления матричных элементов операторов $H_{эф}^{(2)}$, $F_{эф}^{(2)}$. Для этого необходимо определить спин-угловую часть фейнмановских диаграмм и вызвать из архива ААЧФ соответствующие им амплитуды (см. блок РМЭ). Методика расчета спин-угловой части основана на материале седьмого раздела и она, на наш взгляд, является наиболее подходящей, когда модельное пространство состоит из волновых функций $|\Psi\rangle \equiv |n_1 \ell_1^{N_1} n_2 \ell_2^{N_2} n_3 \ell_3^{N_3} \alpha_1 Q_1 L_1 S_1 \alpha_2 Q_2 L_2 S_2 L_{12} S_{12} \alpha_3 Q_3 L_3 S_3 L_S M_L M_S\rangle$, характеризующихся квантовыми числами $\alpha_i L_i S_i$ ($i = 1, 2, 3$) трех незаполненных оболочек $n_1 \ell_1^{N_1}$, $n_2 \ell_2^{N_2}$, $n_3 \ell_3^{N_3}$, где квантовое число ℓ может принимать значения 0, 1, 2. Особенность разработанного алгоритма и программы вычисления спин-угловой части заключается в том, что характеристики $Q_i L_i S_i$ ($i = 1, 2, 3$) в промежуточных суммах по Ψ'' и Ψ''' (см. формулы (7.11), (7.13) и (7.16)) принимают только такие значения, при которых субматричные элементы не равны нулю и поэтому нет необходимости осу-

шествовать проверку по правилам отбора для субматричных элементов и тем самым значительно сокращается время вычисления спин-угловых частей. Более простая реализация такого суммирования возможна при использовании методики квазиспина и создания соответствующих массивов (подробнее см. [70]).

Для расчета матричных элементов в формализме квазиспина были созданы таблицы соответствующих стандартных величин (см. блок АУД): массив характеристик термов Q, L, S , массив значений субгенеалогических коэффициентов [138] и массив WA , который заполнен матричными элементами тройного тензора $W_{(nl, nl)}^{(k_1 k_2 k_3)}$, действующего внутри ns, np, nd оболочек. Генерация таблиц субгенеалогических коэффициентов производится с помощью формулы (7.14), а субматричных элементов оператора $W_{(nl, nl)}^{(k_1 k_2 k_3)}$ - с помощью формулы (7.13). Массив WA заполняется с применением следующих свойств симметрии:

$$\begin{aligned}
 (\ell \alpha QLS \parallel \parallel W_{(nl, nl)}^{(k_1 k_2 k_3)} \parallel \parallel \ell \alpha' Q' L' S') = (-1)^{\delta(2S+1, 2n)(Q-Q) + \delta(2Q+1, 2n)(S'-S)} \times \\
 \times (\ell \alpha SLQ \parallel \parallel W_{(nl, nl)}^{(k_3 k_2 k_1)} \parallel \parallel \ell \alpha' S' L' Q'),
 \end{aligned}
 \tag{9.13}$$

$$\begin{aligned}
 (\ell \alpha QLS \parallel \parallel W_{(nl, nl)}^{(k_1 k_2 k_3)} \parallel \parallel \ell \alpha' Q' L' S') = (-1)^{Q+L+S-Q'-L'-S'} \times \\
 \times (\ell \alpha' Q' L' S' \parallel \parallel W_{(nl, nl)}^{(k_1 k_2 k_3)} \parallel \parallel \ell \alpha QLS)
 \end{aligned}
 \tag{9.14}$$

Общепринятый выбор фазы генеалогических коэффициентов для n_r -электронов [126] не позволяет использовать свойство (9.13) при заполнении массива WA . В этом случае непо помещенные в массив WA субматричные элементы оператора $W_{(n_r, n_r)}^{(k_1, k_2, k_3)}$ рассчитываются по формуле (7.13); в случае необходимости можно изменить фазу генеалогических коэффициентов так, чтобы было действительно соотношение (9.13).

Полученные после вычисления матричные элементы операторов $H_{эф}^{(2)}$, $F_{эф}^{(2)}$ заносятся в архив АРУМК [132] и дальнейшее управление вычислением спектра передается системе ПАВС.

Все созданные программы, как и система ПАВС, написаны на языке ФОРТРАН в версии для ЭВМ БЭСМ-6 [139] и используют программы из LIBRARY I [140]. При создании комплекса программы широко использовалась его фрагментация. При работе комплекс программы занимает расширенную оперативную память машины БЭСМ-6. Данный комплекс имеет несколько ограничений. Расширенное модельное пространство должно быть составлено из волновых функций $|\psi\rangle$, характеризующихся квантовыми числами не более чем трех незаполненных оболочек, причем оболочка n_f может входить либо в пространство G , либо F .

Вычисление спин-угловой части фейнмановской диаграммы организовано так, чтобы в случае необходимости было возможно добавить к существующим программам другие программы, расширяющие возможности данного комплекса. Так, например, в случае появления оболочки n_f или четырех незаполненных оболочек методика восьмого раздела становится предпочтительнее, и целесообразно, на наш взгляд, создавать программное обеспечение, основанное на этой методике.

10. Применение метода эффективных операторов для теоретического исследования энергетических спектров изоэлектронной последовательности углерода [71]

Настоящий раздел посвящен применению разработанной в диссертационной работе методики эффективных операторов и программ для ЭВМ к конкретным расчетам. В качестве примера взята изоэлектронная последовательность углерода, так как она хорошо изучена как экспериментально, так и разными теоретическими методами [4, 141]. Рассчитывается энергетический спектр в первых двух порядках ТВ.

В изучаемом нами случае расширенное модельное пространство построено из волновых функций двух конфигураций, т.е. $1s^2 2s^2 2p^2$ и $1s^2 2p^4$. Тогда одноэлектронные волновые функции с $n\ell \equiv 1s$ принадлежат пространству F , $n\ell \equiv 2s$ и $n\ell \equiv 2p$ — пространству F' . Одноэлектронные волновые функции с $n \geq 3$ составляют G пространство. Расчеты выполняются с водородным и хартри-фоковским базисом одноэлектронных волновых функций.

В первом случае невозмущенный гамильтониан H_0 состоит из двух членов, которые описывают кинетическую энергию электронов и энергию взаимодействия электронов с ядром (см. (9.3)). Тогда эффективный гамильтониан атома в первом порядке есть $H_{эф}^{(1)} = PVP$ (см. (9.4)). $H_{эф}^{(1)}$ изображается четырьмя первыми диаграммами рис. 5.4, а эффективный гамильтониан второго порядка $H_{эф}^{(2)} = H_{эф, V}^{(2)}$ (см. выражение (5.3)) — диаграммами рис. 5.7.

Во втором случае хартри-фоковские орбитали $1s, 2s, 2p$ определяются, решая уравнения ХФ с потенциалом [142]

$$U(r) \equiv V(r) = \sum_{n'l'} q_{n'l'} [J_{n'l'}(r) - K_{n'l'}(r)] \quad , \quad (10.1)$$

где

$$q_{n'l} = \frac{4l+2}{4l+1} (N_{n'l} - 1) \quad , \quad (10.2)$$

$$J_{n'l'}(r) P_{n'l}(r) = \frac{1}{2} Y_0(n'l', n'l'/r) P_{n'l}(r) \quad , \quad (10.3)$$

$$K_{n'l'}(r) P_{n'l}(r) = \frac{1}{2(2l+1)(2l'+1)} \sum_k (l \| C^{(k)} \| l')^2 \times$$

$$\times \frac{1}{2} Y_k(nl, n'l'/r) P_{n'l'}(r) \quad , \quad (10.4)$$

$$Y_k(nl, n'l'/r) = r^{-k} \int_0^r z_1^k P_{n'l}(z_1) P_{n'l'}(z_1) dz_1 +$$

$$+ r^{k+1} \int_r^\infty z_1^{-(k+1)} P_{n'l}(z_1) P_{n'l'}(z_1) dz_1 \quad . \quad (10.5)$$

В выражениях (10.3)-(10.5) $P_{n'l}(r)$ - одноэлектронная радиальная волновая функция, а в рассматриваемом нами случае параметры суммирования $n'l'$ в (10.1) принимают значения $1s, 2s, 2p$. Выбор потенциала в виде $U(r) = V(r)$ обеспечивает автоматическую ортогональность радиальных орбиталей с одинаковыми l при $n \neq n'$. Потенциал $V(r)$ можно представить суммой диаграмм F_2, F_3 (см. рис. 10.1). Диаграмма F_2 изображает

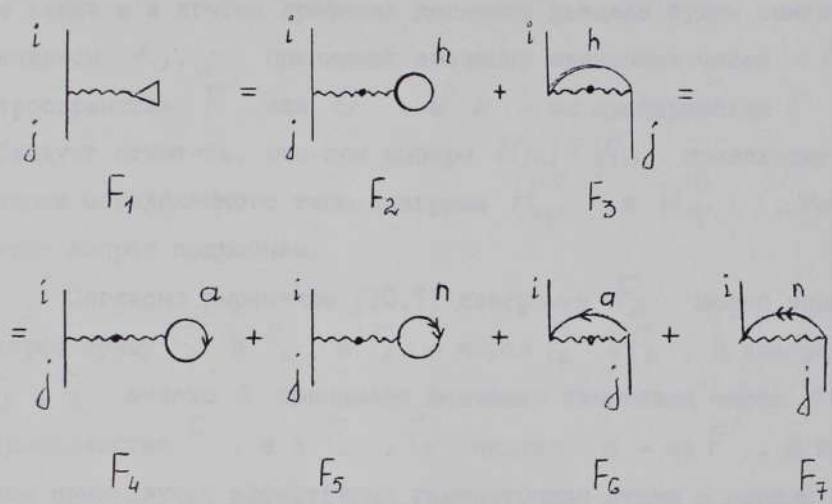


Рис.10.1. Диаграммы, изображающие потенциал $V(r)^m$

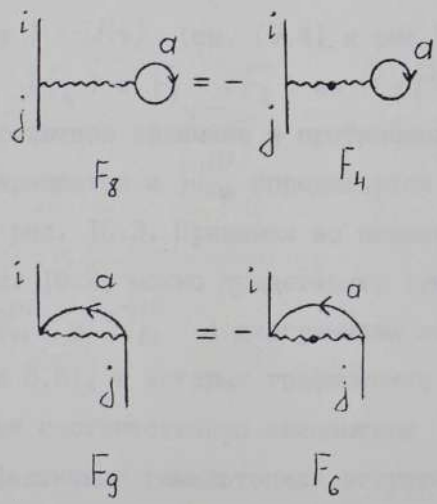


Рис. 10.2. Связь некоторых фейнмановских диаграмм, изображающих оператор электростатического взаимодействия, с диаграммами, представляющими потенциал $V(r)^m$

прямую часть потенциала $V(r)$, а F_3 - обменную. В них, а также и в других графиках десятого раздела будем считать, что индексы i, j принимают значения квантовых чисел $n\ell$ из пространства F' или G , а k - из пространства F или F' . Следует отметить, что при выборе $U(r) = V(r)$ происходит сокращение определенного типа диаграмм $H_{эф}^{(1)}$ и $H_{эф}^{(2)}$. Рассмотрим этот вопрос подробнее.

Согласно выражению (10.1) диаграмму F_2 можно записать через сумму F_4 и F_5 , а F_3 - через F_6 и F_7 . В диаграммах F_4, F_6 индекс α принимает значения квантовых чисел $n\ell$ из пространства F , а в F_5, F_7 индекс n - из F' . В изучаемом нами случае эффективный гамильтониан атома в первом порядке

$$H_{эф}^{(1)} = PVP + PFP, \quad (10.6)$$

где $F = -U(r)$ (см. (9.4) и рис 5.4). Отметим, что диаграммы F_4 (F_6) и F_5 (F_7) из PVP вносят одинаковый вклад по абсолютной величине и противоположный по знаку. Поэтому они сокращаются и $H_{эф}^{(1)}$ определяется диаграммами, представленными на рис. 10.3. Принимая во внимание диаграммные соотношения на рис. 10.2, можно представить сумму операторов PV_1Q и PF_1Q ($\Omega_{V1}^{(1)}$ и $\Omega_{F1}^{(1)}$) диаграммами операторов PV_1Q ($\Omega_{V1}^{(1)}$) (см. рис 5.5), в которых графические элементы F_8 и F_{10} заменяются соответственно элементами F_5 и F_7 . Таким образом, сам эффективный гамильтониан второго порядка $H_{эф}^{(2)}$ изображается диаграммами рис. 5.7, в которых вместо графических элементов F_5 и F_7 ставятся соответственно элементы F_8 и F_{10} .

Так как

$$H_{\text{эф}}^{(1)} = 2 \text{ (diagram)} + \text{ (diagram)} +$$

$$+ 2 \text{ (diagram)} + \text{ (diagram)} + \text{ (diagram)}$$

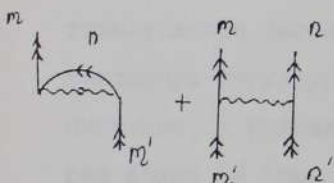


Рис. 10.3. Диаграммы, изображающие эффективный оператор $H_{\text{эф}}^{(1)}$

$$H_{эф}^{(0)} + H_{эф}^{(1)} = H, \quad (10.7)$$

то для расчета матричных элементов $H_{эф}^{(0)} + H_{эф}^{(1)}$ используются программы системы ПАВС. В рассматриваемом подходе $H_{эф}$ в общем случае является неэрмитовым оператором. Однако, в работе [35] показано, что до третьего порядка имеется следующая связь между эрмитовым $\mathcal{H}_{эф}$ и неэрмитовым эффективным гамильтонианом:

$$\mathcal{H}_{эф} \approx \frac{1}{2} (H_{эф} + H_{эф}^{\dagger}). \quad (10.8)$$

После анализа эффективного гамильтониана в первых двух порядках ТВ в базисе водородных и хартри-фоковских функций видно, что при расчете энергетического спектра в одном и другом случае программа практически работает в том же самом режиме, так как спин-угловые части эффективных операторов имеют ту же самую тензорную структуру, фейнмановские диаграммы отличаются незначительно, а радиальные интегралы в обоих случаях вводятся через архив АИ (см. рис. 9.1) тем же самым программным обеспечением.

В таблице 10.1 сравниваются результаты, полученные методом эффективных операторов, разработанным в диссертационной работе, и временной ТВ по $1/z$, развиваемой У.И.Сафроновой [143]. Расчет энергетического спектра в нерелятивистском приближении выполнен в базисе водородных функций для CI, OIII и Ca XV. Учитываются первые два порядка ТВ. Наши результаты для CI и OIII более близки к экспериментальным данным по сравнению с результатами работы [143]. Отличие наших результатов от результатом У.И.Сафроновой, по-видимому, объясняются незначительным

Энергетический спектр (ат.) CI, OIII, Ca XU, полученный в различных приближениях
(без релятивизма)

Кон- фигу- ра- ции	Тер- мы	CI $\Delta E(^3P - ^1S)$ (ат. ед.)		OIII $\Delta E(^3P - ^1S)$ (ат. ед.)		Ca XU $\Delta E(^3P - ^1S)$ (ат. ед.)	
		(ЭКП [144])	(ТВ [143])	(ЭКП [144])	(ТВ [143])	(МК а) [145] б) [146])	(ТВ [143])
3P		0	0	0	0	0	0
1D		0,0463I	0,05204	0,05173I	0,09142	0,09422	0,09407
1S		0,1056	0,12258	0,11557I	0,1958I	0,21024	0,20618
3P		0,80218	0,805109		I,36302	I,36430	4,7283
1D		0,82018	0,83347		I,42324	I,43469	5,0416
1S		0,96642	0,97625		I,65056	I,65577	5,7554
							0,3473
							0,09652
							0,09925
							0,19668
							0,2038I
							4,7283
							5,0416
							5,7554

расхождением численных значений отдельных бесконечных сумм.

В таблице 10.2 представлены результаты расчета энергетического спектра Fe XXI, найденные в различных базисах и приближениях (все расчеты нерелятивистские). В третьем столбце таблицы помещены результаты, полученные методом Хартри-Фока, в четвертом - методом Хартри-Фока с потенциалом $V(r)$. Оба эти результата рассчитаны, не включая корреляции. Энергетический спектр во втором порядке ТВ, полученный У.И.Сафроновой [143], помещен в пятом столбце таблицы 10.2, а рассчитанный нами в базисе водородных функций - в шестом столбце, и в базисе хартри-фоковских функций - в седьмом столбце. Отличие наших результатов от результатов работы [143] объясняется аналогично случаю Si, OIII и Ca XV. Хартри-фоковские результаты с потенциалом V^S [147] и $V(r)$ (третий-четвертый столбцы, соответственно) друг от друга практически не отличаются.

Из сравнения результатов четвертого и седьмого столбцов видно, что при учете корреляционных поправок ширина энергетического спектра сужается по сравнению с шириной, получаемой во втором порядке ТВ в базисе водородных функций или определяемой с $V(r)$ в первом порядке ТВ.

Выше-описанные расчеты были проведены с целью апробации разработанной в диссертации методики и для тестирования созданного комплекса программ. Из полученных результатов можно сделать вывод, что созданный комплекс программ дает надежные результаты. Для того, чтобы сравнить наши результаты для Fe XXI с экспериментальными данными, необходимо учесть релятивистские поправки. В данной работе они учитываются в приближении Паули (см. девятый раздел и [131]). Для сравнения в табл. 10.3 представлены экспериментальные данные (третий столбец) и результаты дру-

Энергетический спектр (см^{-1}) Fe XXI, полученный в различных приближениях (без релятивизма)

Конфигура- ции	Термы $LS+L$	Без корреляции		Во втором порядке ТВ	
		$\Delta E(3P_0 - 2S+1L)$ см^{-1}	$\Delta E(3P_0 - 2S+1L)$ см^{-1}	$\Delta E(3P_0 - 2S+1L)$	ТВ водород
		$X\Phi$ V^S [147]	$X\Phi$ V^m	[143]	V^m
$1s^2 2s^2 2p^2$	$3P$	0	0	0	0
	$1D$	106780	106744	103996	104011
	$1S$	215573	214512	219295	219155
$1s^2 2p^4$	$3P$	1416760	1414506	1407050	1406914
	$1D$	1523540	1521251	1503572	1505663
	$1S$	1735086	1733716	1713618	1713639

Энергетический спектр (см^{-1}) Fe XXI, полученный в различных приближениях (включая релятивистские поправки)

Конфигурации	Термы	Fe XXI									
		$\Delta E(3p_{-2s+1}L)$					(см^{-1})				
		ЭКСП [148]	HTФ [441]	ТВ [4]	МК [145]	Т-В водород,	Т-В v^m	Т-В v^m	Т-В v^s	Т-В [441]	
I	2	3	4	5	6	7	8	9	10		
$1s^2 2s^2 2p^2$	$3p_0$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	$3p_1$	73850	72298	72507	74426	102885	71412	71722	71757		
	$3p_2$	117350	118358	115611	121533	152604	116592	117577	117647		
	$1D_2$	244030	244734	241521	258086	300045	240472	243026	243199		
	$1S_0$	371520	370068	366272	376018	427178	366293	365245	366046		
$1s^2 2p^4$	$3p_2$	1646290	1648831	1650271		1501122	1639890	1655035	1649024		
	$3p_1$	1735690	1737849	1738886		1611306	1727446	1743327	1737328		
	$3p_0$	1740420	1741058	1742951		1642034	1732355	1746466	1740577		
	$1D_2$	1817240	1820435	1818533		1715179	1810045	1832366	1826498		
	$1S_0$	2047800	2051661	2050663		1980982	2039017	2065062	2058735		

гих авторов. В работе [141] учитываются корреляции методом, описанным в работе [19], в [4] проведены расчеты по ТВ в базисе водородных функций при включении корреляционных поправок к релятивистским операторам. В работе [145] получен энергетический спектр в многоконфигурационном приближении. В таблице также включены результаты в первом порядке ТВ с потенциалом $V_{(2)}^m$ (девятый столбец) и с потенциалом V^s [147] (десятый столбец).

Результаты, полученные с хартри-фоковскими функциями, хорошо согласуются с экспериментальными данными, но остаются еще некоторые различия. Поэтому для улучшения результатов необходимо также учесть корреляционные поправки к релятивистским операторам. Такой вывод можно сделать и в случае водородного базиса. (см. пятый и седьмой столб^ы).

В заключение следует, что таким образом предложенная методика и разработанные программы дают возможность рассчитывать энергетические спектр^ы атомов и ионов с незаполненными оболочками во втором порядке ТВ.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. В работе разработана расширенная графическая техника теории момента количества движения, специально приспособленная к особенностям метода вторичного квантования в неприводимом тензорном виде.

2. В диссертации предложено единое графическое представление для одноэлектронных и двухэлектронных операторов в неприводимом тензорном виде, учитывающее суммы по одноэлектронным магнитным квантовым числам, что может служить исходным пунктом для построения ряда ТВ в связанной форме.

3. Сформулированные графические аналоги теоретико-полевых методов (техника спариваний, теорема Вика, приведение операторов к нормальной форме и определение их вакуумных средних) расширяют возможности применения диаграммной техники угловых моментов в ТВ для атомных систем с несколькими незаполненными оболочками.

4. Предложенные в работе диаграммные и алгебраические методы позволяют определить в неприводимом тензорном виде замкнутые операторные выражения для членов ряда стационарной ТВ в случае неограниченного числа незаполненных оболочек, чего не допускает использование других известных методов.

5. Полученное в работе разложение по неприводимым тензорным операторам эффективного гамильтониана атома во втором порядке ТВ является наиболее подходящим способом проведения практических расчетов атомных систем с незаполненными оболочками, так как матричные элементы спин-угловых частей такого эффективного гамильтониана выражаются через минимальное число простых и легко поддающихся алгоритмизации формул.

6. Применение методики квазиспина позволяет выразить спин-угловые части эффективного гамильтониана атома через неприводимые тензорные произведения тройных тензоров $\alpha^{(q\ell s)}$ и $W_{(\ell)}^{(k_q k_L k_s)}$, действующих в пространстве состояний оболочки эквивалентных электронов, что дает возможность объединить в эффективном гамильтониане группы членов, имеющих одинаковую неприводимую тензорную структуру в квазиспиновом пространстве.

7. Предлагаемый алгоритм и созданная универсальная программа расчета спин-угловых частей эффективного гамильтониана атома позволяет автоматизированным способом получить энергетические спектры атомов и ионов с несколькими незаполненными оболочками во втором порядке ТВ.

5. Бунд Н.А., Рудник В.В., Соловьев В.В. // Журнал физики атома. - М.: Наука, 1978. - 10 с.

6. Бунд Н.А., Рудник В.В., Соловьев В.В. // Журнал физики атома. - М.: Наука, 1978. - 10 с.

7. Бунд Н.А. // Журнал физики атома. - М.: Наука, 1978. - 10 с.

8. Bunker G., Delbecq L. // Phys. Rev. A. 1977. 15. 10. 2000.

9. Bunker G., Delbecq L. // Phys. Rev. A. 1977. 15. 10. 2000.

10. Bunker G., Delbecq L. // Phys. Rev. A. 1977. 15. 10. 2000.

ЛИТЕРАТУРА

1. Kelly H.P. Applications of many-body diagram techniques in atomic physics // Adv. Chem. Phys. 1969. V. 14. P. 129-190.
2. Lindgren I., Morrison M. Atomic many-body theory. /Springer series in chemical physics. V. 13. - Berlin: Springer-Verlag, 1982. -469 p.
3. Дмитриев Ю.Ю., Климчицкая Г.Л., Лабзовский Л.Н. Релятивистские эффекты в спектрах атомных систем. - М.: Энергоатомиздат, 1984. -224 с.
4. Сафронова У.И., Сенашенко В.С. Теория спектров многозарядных ионов. М.: Энергоиздат, 1984. -268 с.
5. Браун М.А., Гурцумелия А.Д., Сафронова У.И. Релятивистская теория атома. - М.: Наука, 1984. -272 с.
6. Никитин А.А., Рудзикас З.Б. Основы теории спектров атомов и ионов. - М.: Наука, 1983. -320 с.
7. Юцис А.П. О современной теории атома и дальнейшем ее развитии // Лит.физ.сб. 1974. Т. 14, № 3. С. 417-430.
8. Shorer P., Dalgarno A. Relativistic random-phase approximation calculations on the Zinc isoelectronic sequence // Phys. Rev. A. 1977. V. 16, No 4. P. 1502-1506.
Armstrong L.J. An open-shell random phase approximation // J.Phys.B. : At. Mol. Phys. 1974. V. 7, No 17. P. 2320-2331.
Amusia M.Yu., Cherepkov N.A. Many-electron correlations in scattering processes // Case Stud. in Atom.Phys. 1975. V. 5, No 2. P. 47-179.
9. Amusia M.Yu. Collective effects in photoionization of atoms // Adv. Atom. Molec. Phys. 1981. V. 17. P. 1-54.

10. Фок В.А., Веселов М.Г., Петрашень М.И. Неполное разделение переменных для двухвалентных атомов // ЖЭТФ, 1940. Т. 10, № 7. С. 723-739.
11. Ушпалис К.К., Ванагас В.В., Радамьсельский С.И., Юцис А.П. Применение метода неполного разделения переменных к любому числу эквивалентных элементов // Труды АН ЛитССР. 1956. Сер. Б. Т. 5(8). С. 11-20.
12. Юцис А.П., Уравнения Фока в многоконfigurационном приближении // ЖЭТФ. 1952. Т. 23. Вып. 2(8). С. 129-139.
13. Юцис А.П., Визбарайте Я.И., Строките Т.Д., Бандзайтис А.А. О многоконfigurационном приближении и его сходимости // Опт. Спектр. 1962. Т. 12. Вып. 2. С. 157-162.
14. Cheng K.T., Kim Y.-K., Desclaux J.P. Electric dipole, quadrupole and magnetic dipole, transition probabilities of ions isoelectric to the first-row atoms, Li through F // ADNDT, 1979. V. 24, No 2. P. 111-189.
Froese-Fischer Ch.F., Saha H.P. Multiconfiguration Hartree-Fock results with Breit-Pauli corrections for Forbidden transitions in the $2p^4$ configuration // Phys. Rev. A. 1983. V. 28, No 6. P. 3169-3178.
15. Собельман И.И. Введение в теорию атомных спектров. - М.: Физматгиз, 1963. -640 с.
16. Froese-Fischer Ch. The Hartree-Fock method for atoms. - N.Y.: John Wiley, 1977. -308 p.
17. Morrison J.C., Froese-Fischer Ch. Multiconfiguration Hartree-Fock method and many-body perturbation theory. A unified approach // Phys. Rev. A: Gen. Phys. 1987. V. 35, No 6. P. 2429-2439.

18. Veseth L. Many-body calculations of spectroscopic properties of $3s3p\ ^3P$ and $3s3d\ ^3D$ states in Mg // J.Phys.B: Atom. Molec. Phys. 1987. V. 20, No 2. P. 235-250.
19. Богданович П.О., Жукаускас Г.Л. Приближенный учет суперпозиции конфигураций в атомных спектрах // Лит.физ.сб., 1983. Т. 23, № 3. С. 18-33.
20. Амусья М.Я. Атомный фотоэффект. - М.: Наука, 1987. -272 с.
21. Dzuba V.A., Flambaum V.V., Sushkov O.P. Relativistic many-body calculations of energy levels and of fine-structure intervals in the cesium atom // J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 1983. V. 16, No 5. P. 715-722.
Dzuba V.A., Flambaum V.V., Sushkov O.P. Relativistic many-body calculations of the hyperfine-structure intervals in the cesium and francium atoms // J.Phys.B: Atom. Molec. Phys. 1984. V. 17, No 10. P. 1953-1968.
22. Morrison J., Salomonson S. Many-body perturbation theory of the effective electron-electron interaction for open-shell atoms // Phys.Scrip. 1980. V. 21. P. 343-350.
23. Salomonson S., Lindgren I., Martensson A.-M. Numerical many-body perturbation calculations on Be-like systems using a multi-configurational model space // Physica Scripta, 1980. V. 21. P. 351-356.
24. Толмачев В.В. Теория Ферми газа. - М.: Изд. МГУ, 1973. -353с.
25. Меркелис Г.В., Каняускас Ю.М., Рудзикас З.Б. Формальные методы стационарной теории возмущений в атомах // Лит.физ. сб. 1985. Т 25, № 5. С. 21-30.
26. Tolmachev V.V. The field-theoretical form of the perturbation theory for many-electron atoms. I. Abstract theory // Adv. Chem. Phys. 1969. V. 14. P. 421-470.

27. Tolmachev V.V. The field-theoretical form of the perturbation theory for many-electron atoms. II. Atomic systems // Adv. Chem. Phys. 1969. V. 14. P. 471-520.
28. Гурчумелия А.Д., Сафронова У.И. Современные методы квантовой механики многих тел и теория атома. - Тбилиси: ТГУ, 1983. -554 с.
29. Аглицкий Е.В., Сафронова У.И. Спектроскопия автоионизационных состояний атомных систем. - М.: Энергоатомиздат, 1985. -160 с.
30. Johnson W.R., Blundell S.A., Sapirstein J. Many-body perturbation-theory calculations of energy levels along the lithium isoelectronic sequence // Phys.Rev., 1988. V. 37, No 8. P. 2764-2777.
31. Gell-Man M., Low F. Bound states in quantum field theory// Phys. Rev. 1951. V. 84, No 2. P. 350-354.
32. Веселов М.Г., Лабзовский Л.Н. Теория атома: Строение электронных оболочек. - М.: Наука, 1986. -328 с.
33. Brandow B.H. Linked-cluster expansions for the nuclear many-body problem // Rev. Mod. Phys. 1967. V. 39, No 4. P. 771-792.
34. Sandars P.G.H. A linked diagram treatment of configuration interaction in open-shell atoms. // Adv. Chem. Phys. 1969. V. 14. P. 365-420.
35. Kvasnička V. Construction of model hamiltonians in framework of Rayleigh-Schrodinger perturbation theory // Czech. J.Phys. 1974. V. B24, No 6. P. 605-615.
36. Макушкин Ю.С., Тюперев Вл.Г. Методы возмущений и эффективные гамильтонианы в молекулярной спектроскопии. -М.: Наука, 1984. -239 с.

37. Lindgren I. The Rayleigh-Schrodinger perturbation and the linked-diagram theorem for a multi-configurational model space // J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 1974. V. 7, No 18. P. 2441-2470.
38. Гугенгольц И. Теория возмущений для больших систем / Проблемы современной физики . - М.: ИЛ, 1958. Вып. 3. С. 3.
39. Болотин А.Б., Левинсон И.Б., Толмачев В.В. Интегрирование фейнмановских диаграмм по угловым переменным в полевой форме теории возмущений для атома // Лит.физ.сб. 1964. Т. 4, № 1. С. 25-33.
40. Юцис А.П., Бандзайтис А.А. Теория момента количества движения в квантовой механике // Вильнюс: Мокслас, 1988. -470 с.
41. Матулис А.Ю., Напленас Э.П., Бандзайтис А.А. К определению ряда теории возмущений для энергии атомов с незаполненными электронными оболочками // Лит.физ.сб. 1965. Т. 5, № 3. С. 289-298.
42. Матулис А.Ю., Бандзайтис А.А. К определению ряда теории возмущений для матричного элемента оператора перехода // Лит.физ.сб. 1965. Т. 5, № 4. С. 453-462.
43. Камунтавичюс Г.П. Графическое представление обобщенных генеалогических коэффициентов и его применение к теории возмущений // Лит.физ.сб. 1967. Т. 7, № 3. С. 553.
44. Толмачев В.В. Атомные фейнмановские диаграммы и эффекты конфигурационного взаимодействия для конфигураций / Вторичное квантование и атомная спектроскопия под ред Б.Джадда . -М.: Мир, 1970. -135 с.
45. Джадд Б. Вторичное квантование и атомная спектроскопия. - М.: Мир, 1970. -135 с.

46. Feneuille S. Interaction de configurations lointanes pour les configurations $(l+l')$ // J. Physique. 1967. V. 28, No 5-6. P. 497-504.
47. Дцис А.П., Савукина А.Д. Математические основы теории атома. - Вильнюс: Минтис, 1973. -480 с.
48. Рудзикас З.Б., Каняускас Ю.М. Квазиспин и изоспин в теории атома. - Вильнюс: Мокслас, 1984. -140 с.
49. Дцис А.П., Левинсон И.Б., Ванагас В.В. Математический аппарат теории момента количества движения. - Вильнюс: Гос. изд-во полит и научн. лит. ЛитССР, 1960. -244 с.
50. Каняускас Ю.М., Рудзикас З.Б. К выражению матриц преобразования через $3n_j$ -коэффициенты и некоторые $2j_j$ -коэффициенты // Лит.физ.сб. 1973. Т. 13, № 2. С. 191-205.
51. Бандзайтис А.А. Связь диаграмм сумм произведений коэффициентов Клебша-Гордана и диаграмм сумм произведений коэффициентов Вигнера // Лит.физ.сб. 1977. Т. 17, № 1. С. 15-20.
52. Дцис А.П., Рудзикас З.Б., Бандзайтис А.А. Графическое изображение матричных элементов неприводимых тензорных операторов // Лит.физ.сб. 1965. Т. 5, № 1. С. 5-12.
53. Brink D.M., Satcher G.R. Angular momentum. - Oxford: Clarendon Press, 1968. -160 p.
54. El-Baz E. Traitement graphique de l'algebra des moments angulaires. - Paris: Masson, 1969. -179 p.
55. Варшалович Д.А., Москалев А.И., Херсонский В.К. Квантовая теория углового момента. - Л.: Наука, 1975. -440 с.
56. Купляускис З.Й., Купляускене А.В., Тутлис В.И. Об изучении возбужденных состояний атомов с использованием неортогональных радиальных орбиталей // Изв. ВУЗ, физика. 1981. Т. 24, № 3. С. 7-11.

57. Гайгалас Г.А., Каняускас Ю.М., Рудзикас З.Б. Графическая техника теории момента количества движения и вторичное квантование // Лит.физ.сб. 1986. Т. 25, № 6. С. 3-13.
58. Меркелис Г.В., Гайгалас Г.А., Каняускас Ю.М., Рудзикас З.Б. Применение графических методов теории момента количества движения к изучению ряда стационарной теории возмущений // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1986. Т. 50, № 7. С. 1403-1410.
59. Gaigalau G.A., Merkelis G.V. Application of the method of irreducible tensorial operators to study the expansion of stationary perturbation theory // Acta Phys. Hung. 1987. V. 61, No 1. P. 111-114.
60. Гайгалас Г.А., Меркелис Г.В. Неприводимый тензорный вид эффективного одночастичного гамильтониана . - ВИНТИ 19.09.88 № 7030-В88. Деп., Вильнюс Ред. ж. Лит.физ.сб. 1988. -25 с.
61. Гайгалас Г.А. Графические методы определения вакуумных средних в случае одной оболочки эквивалентных электронов / УП республиканская конференция молодых ученых по спектроскопии и квантовой электронике. Тезисы докладов. Паланга, 1985 .- Вильнюс: Институт физики АН ЛитССР. С. 5.
62. Гайгалас Г.А., Каняускас Ю.М. Графические методы определения эффективного гамильтониана теории возмущений в неприводимой тензорной форме / IX Всесоюзная конференция по теории атомов и атомных спектров. Ужгород, 24-26 сентября 1985. Тезисы докладов. - Ужгород: УжГУ, 1985. С.74.
63. Гайгалас Г.А. Диаграммный подход к неприводимым тензорным операторам и его применение в теории возмущений / Спектроскопия автоионизационных состояний атомов и ионов. - М.: Научный совет по спектроскопии, 1985. С. 43-61.

64. Гайгалас Г.А., Меркелис Г.В. Представление эффективного гамильтониана атома в неприводимом виде в первых двух порядках теории возмущений / VI Республиканская конференция молодых ученых по спектроскопии и квантовой электронике. Тезисы докладов. Паланга, 1983. - Вильнюс: ВГУ, 1983. С. 12.
65. Меркелис Г.В., Гайгалас Г.А. Тензорный вид эффективного гамильтониана атома для незаполненных оболочек в теории возмущений / Всесоюзная конференция по теории атомов и атомных спектров. Тезисы докладов. - Минск, 1983. С. 73.
66. Меркелис Г.В., Гайгалас Г.А., Рудзикас З.Б. Неприводимый тензорный вид и графическое представление эффективного гамильтониана атома в первых двух порядках стационарной теории возмущений // Лит.физ.сб., 1985. Т. 25, № 6. С. 14-31.
67. Гайгалас Г.А. Неприводимый тензорный вид эффективного одноэлектронного оператора / VIII Республиканская конференция молодых ученых по спектроскопии и квантовой электронике. Тезисы докладов. Паланга, 1987. - Вильнюс: Институт физики АН ЛитССР, 1987, С. 17.
68. Меркелис Г.В., Гайгалас Г.А., Рудзикас З.Б. Определение матричных элементов нерелятивистского эффективного гамильтониана атома в первых двух порядках теории возмущений в случае конфигураций с двумя незаполненными оболочками $n_1 \ell_1^{N_1} n_2 \ell_2^{N_2}$ / IX Всесоюзная конференция по теории атомов и атомных спектров. Ужгород, 24-26 сентября 1985. Тезисы докладов. - Ужгород: УжГУ, 1985. С. 75.
69. Меркелис Г.В., Гайгалас Г.А. Определение выражений для субматричных элементов нерелятивистского эффективного гамильтониана атома в первых двух порядках стационарной тео-

- рии возмущений в случае конфигурации с двумя незаполненными оболочками $f_4^N f_2^N$ / Спектроскопия автоионизационных состояний атомов и ионов. - М.: Научный совет по спектроскопии, 1985. С.20-42.
70. Гайгалас Г.А., Меркелис Г.В. Программа расчета субматричных элементов неприводимых тензорных произведений операторов рождения и уничтожения / Сборник программ по математическому обеспечению атомных расчетов. Вып. 7. - Вильнюс: Институт физики АН ЛитССР, 1986. С. 78-132.
71. Меркелис Г.В., Гайгалас Г.А., Вилкас М.Й. Изучение ряда эффективного гамильтониана атома с незаполненными оболочками с учетом одноэлектронного возмущающего оператора / Всесоюзный семинар "Теория атомов и атомных спектров". Тезисы докладов. - Тбилиси, 1988. С. 110.
72. Каразия Р. Введение в теорию рентгеновских и электронных спектров свободных атомов. - Вильнюс: Мокслас, 1987. -276 с.
73. Feschbach H. A unified theory of nuclear reactions. II. // Ann. Phys. 1962. V. 19, No 2. P. 287-313.
74. Lowdin P.-O. Studies in perturbation theory. XIII // Int. J. Quant. Chem. 1968. V. 2, No 6. P. 867-931.
75. Lowdin P.-O. Studies in perturbation theory. IV. Solution of eigenvalue problem by projection operator formalism. // J.Math.Phys. 1962. V. 3, No 5. P. 969.
76. Lowdin P.-O. Studies in perturbation theory. Pt.1 // J. Mol.Spectrosc. 1963. V. 10, No 1. P.12-33.
77. Primas H. Eine varallgenleinerte störungstheorie für quanten mechanische mehrteilchenprobleme // Helv. Phys. Acta. 1961. V. 34, No 4. P. 331-451;

- Primas H. Generalized perturbation theory in operator form // Rev. Mod. Phys. 1963. V. 35, No 3. P. 710-712.
78. Des Cloizeaux J. Extension d'une formule de lagrange a des problemes de valeurs propres // Nucl. Phys. 1960. V. 20, No 3. P. 321-346.
79. Soliveres C.E. An effective hamiltonian and time-independent perturbation theory // J.Phys. C: Solid State Phys. 1969. V. 2, No 12. P.2161-2174.
80. Van Vleck J.H. On σ -type doubling and electron spin in the spectra of diatomic molecules // Phys. Rev. 1929. V. 33. P. 467-506.
81. Kemble E.C. Fundamental of quantum mechanics. - N.Y.: Pover, 1937. P.-395 p. ;
Roussy G. An approximate block diagonalization for hermition matrices as an improvement on successive Van Vleck transformations // Mol. Phys. 1973. V. 26, No 5. P. 1085-1092.
82. Тютчев Вл. Г. Эффективные гамильтонианы / Внутримолекулярные взаимодействия и инфракрасные спектры атмосферных газов. - Томск: ИОА АН СССР, 1975. С. 3-46.
83. Klein D.J. Degenerate perturbation theory // J.Chem. Phys. 1974. V. 61, No 3. P. 786-798.
84. Jorgensen F. Effective hamiltonians // Mol. Phys. 1975. V. 29, No 4. P. 1137-1164.
85. Jorgensen F., Pedersen T., Chedin A. A projector formulation for the Van Vleck transformation // Mol. Phys. 1975. V. 30, No 5. P. 1377-1395.
86. Brandow B.H. Formal theory of effective π -electron hamiltonians // Int. J. Quantum Chem. 1979. V. 15, No 2. P. 207-242.

87. Lowdin P.-O., Goscinski O. Studies in perturbation theory. XIV // Int. J. Quant. Chem. Symp. 1971. V. 5, P. 685-705.
88. Bloch C. Sur la theorie des perturbations des etats lies // Nucl. Phys. 1958. V. 6, No 3. P. 329-347.
89. Morita T. Perturbation theory for degenerate problems of many-fermion systems // Progr. Theor. Phys. 1963. V. 29, No 3. P. 351-369.
90. Боголюбов Н.Н., Тябликов С.В. Об одном применении теории возмущений полярной модели металла // ЖЭТФ. 1949. Т. 19, С. 251-253.
91. Jorgensen E., Pedersen T. A projector formulation for the Van Vleck transformation // J. Mol.Phys. 1974. V. 27, No 1. P. 33-47.
92. Brandow B.H. Lectures in theoretical physics, XI-B. - N.Y.: Gordon and Breach, 1969. -55 p.
93. Макушкин Д.С. О методе неместного эффективного волчка в теории КВ - спектров молекул // Опт. и спектр. 1974. Т.37, вып. 4. С. 662-667.
94. Lindgren I. Linked-diagram and coupled-cluster expansions for multi-configurational, complete and incomplete model spaces // Physica scripta. 1985. V. 32, No 4. P. 291-302.
95. Уимон С. Электронные корреляции в молекулах. - М.: Мир, 1987. -304 с.
96. Brueckner K.A. Many-body problem for strongly interacting particles. II. Linked cluster expansion // Phys. Rev. 1955. V. 100, No 1. P. 36-45.
97. Goldstone J. Derivation of the Brueckner many-body theory // Proc. Roy. Soc. 1957. V. 239, No 1217. P. 267-279.

98. Толмачев В.В. Метод полевых функций Грина в атомных и молекулярных задачах // Лит. физ. сб. 1963. Т. 3, № 1-2. С. 47-72.
99. Kelly H.P. Correlation effects in atoms // Phys. Rev. 1963. V. 131, No 2. P. 684-699.
100. Watson K.M. Multiple scattering and the many-body problem-applications to photomeson production in complex nuclei // Phys. Rev. 1953. V. 89, No 3. P. 575-587.
101. Фейнман Р. Теория позитронов / Новейшие развитие квантовой электродинамики. - М.: ИЛ, 1954. С. 138-160;
Фейнман Р. Пространственно-временная трактовка квантовой электродинамики. - М.: ИЛ, 1954. С. 161-204.
102. Дайсон Ф. Теории излучения Томанага, Швингера и Фейнмана / Сдвиг уровней атомных электронов. - М.: ИЛ, 1950. С. 94-122;
Дайсон Ф. S - матрица в квантовой электродинамике / Новейшие развитие квантовой электродинамики. - М.: ИЛ, 1954. С. 205-238.
103. Wick G.C. The evaluation of the collision matrix // Phys. Rev. 1950. V. 80, No 2. P. 268-272.
104. Сафронова У.И., Толмачев В.В. Полевая форма теории возмущений в случае двух заполненных состояний в открытых оболочках на примере первых двух порядков // Лит. физ. сб. 1964. Т. 4, № 2. С. 249-261.
105. Kvasnička V. Quasi-degenerate many-body Rayleigh-Schrodinger perturbation theory // Czech.J.Phys. 1975. V. B25, No 4. P. 371-391.
106. Durand P. Direct determination of effective hamiltonians by wave-operator methods. I. General formalism // Phys. Rev.

A. 1983. V. 28, No 6. P. 3184-3192.

107. Hubbard J. The description of collective motions in terms of many-body perturbation theory // Proc. Roy. Soc. 1957. V. 240, No 1223. P. 539-560.
108. Hubbard J. The descriptopn of collective motions in terms of many-body perturbation theory. II. The correlation energy of a free-electron gas // Proc.Roy.Soc. 1958. V. 243, No 1234. P. 336-352;
108. Coester F. Bound states of a many-particle system // Nucl. Phys. 1958. V. 7, No 4. P. 421-424.
109. Coester F., Kummel H. Short-range correlations in nuclear wave functions // Nucl. Phys. 1960. V. 17, No 3. P. 477-485.
110. Sinanoglu O. Many-electron theory of atoms and molecules. I. Shells, electron pairs VS many-electron correlation // J.Chem.Phys. 1962. V. 36, No 3. P. 706-717;
Sinanoglu O. Many-electron theory of atoms and molecules // Adv. Chem. Phys. 1964. V. 6. P. 315-412;
Sinanoglu O. Electron correlation in atoms and molecules // Adv. Chem. Phys. 1969. V. 14. P. 237-282.
111. Čížek J. On the use of the cluster expansion and the technique of diagrams in calculations of correlations effects in atoms and molecules // Adv. Chem. Phys. 1969. V. 14. P. 35-89;
Paldus J., Čížek J., Shavitt J. Correlation problem in atomic and molecular systems. IV. Extended coupled-pair many-electron theory and its application to the BH_3 molecule // Phys. Rev. A. 1972. V. 5, No 1. P. 50-67.

- Paldus J., Čížek J. Time-independent diagrammatic approach to perturbation theory of Fermions systems // Adv. Quantum Chem. 1975. V. 9. P. 105-197.
112. Lindgren I. A coupled-cluster approach to the many-body perturbation theory for open-shell systems // Int. J. Quantum Chem. Symp. 1978. No 12. P. 33-58.
113. Paldus J., Čížek J. Saute M., Laforgue A. Correlation problems in atomic and molecular systems. VII. Coupled-cluster approach to open-shell systems // Phys. Rev. A. 1978. V. 17, No 3. P. 805-815.
114. Kvasnička V. Caupled-cluster approach for open-shell systems // Chem. Phys. Lett. 1981. V. 79, No 1. P. 89.
115. Suzuki K., Okamoto R. General structure of effective interaction in degenerate perturbation theory // Prog. Theor. Phys. 1984. V. 71, No 6. P. 1221-1238.
116. Suzuki K., Okamoto R. Degenerate perturbation theory in quantum-mechanics // Prog. Theor. Phys. 1983. V. 4, No 2. P. 439.
117. Shavitt J., Redmon L.T. Quasidegenerate perturbation theories A canonical van Vleck formalism and its relationship to other approaches // J. Chem. Phys. 1980. V. 73, No 11. P. 5711.
118. Vainshtein L.A. On the calculation of the energy matrix for many-electron atomic system // Physica scripta, 1986. V. 33, No 4. P. 336-341.
119. Каянюскас Д.М., Рудзикас З.Б. К теории неприводимых тензорных наборов // Лит.физ.сб. 1973. Т. 13, № 5. С. 657-666.

120. Racah G. Theory of complex spectra. III // Phys. Rev. 1943. V. 63. P. 367-382.
121. Lawson R.D., Mac Farlane M.H. The quasi-spin formalism and the dependence of nuclear matrix elements on particle number // Nucl. Phys. 1965. V. 66, No 1. P. 80-96.
122. Боголюбов Н.Н., Ширков Д.В. Введение в теорию квантованных полей. - М.: Наука, 1973. -416 с.
123. Толмачев В.В. Техника спариваний и применение ее к расчету матричных элементов гамильтониана / С.Реймс "Теория многоэлектронных систем". - М.: Мир, 1976. -333 с.
124. Марч Н., Янг У., Сампантхар С. Проблема многих тел в квантовой механике. - М.: Мир, 1969. -496 с.
125. Реймс С. Теория многоэлектронных систем. - М.: Мир, 1976. -334 с.
126. Шпакаускас В.В., Каяускас Ю.М., Рудзикас З.Б. Приведенные в квазиспиновом пространстве генеалогические коэффициенты и субматричные элементы тензорных операторов // Лит.физ.сб. 1978. Т. 18, № 3. С. 293-315.
127. Шпакаускас В.В., Каяускас Ю.М., Рудзикас З.Б. Тензорные свойства операторов в квазиспиновом пространстве применительно к теории многоэлектронных атомов // Лит.физ.сб. 1977. Т. 17, № 5. С. 563-574.
128. Шпакаускас В.В., Меркелис Г.В. Трехчастичный эффективный оператор р-оболочки эквивалентных электронов / Всесоюзная конференция по теории атомов и атомных спектров. Тезисы докладов. - Минск, 1983. С. 74.
129. Uylings P.H.M. Effective electrostatic operators calculated with second quantization // J.Phys. B: Atom. Molec. Phys. 1985. V. 18, No 7. P. 1267-1285.

130. Wybourne B.G. Generalization of the "linear theory" of configuration interaction // Phys. Rev. A. 1965. V. 137, No 2. P. 364-368.
131. Бете Г., Солпитер Э. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. - М.: Физматгиз, 1960. -502 с.
132. Тутлис В.И. Программы расчета матричных элементов многоконфигурационного приближения / Сборник программ по математическому обеспечению атомных расчетов. Вып. 4.- Вильнюс: Институт физики АН ЛитССР, 1980. С. 3-100.
133. Тутлис В.И. Программа расчета энергетических спектров атомов и ионов методом наложения конфигураций / Сборник программ по математическому обеспечению атомных расчетов. Вып. 6. - Вильнюс: Институт физики АН ЛитССР, 1980. С. 3-85.
134. Купляускене А.В. Программа расчета энергетических спектров атомов и ионов методом наложения конфигураций / Сборник программ по математическому обеспечению атомных расчетов. Вып. 6. - Вильнюс: Институт физики АН ЛитССР, 1980. С. 86-108;
- Богданович П.О. Программа расчета энергетических спектров с учетом наложения конфигураций в базисе численных хартри-фоковских функций / Сборник программ по математическому обеспечению атомных расчетов. Вып. 6. - Вильнюс: Институт физики АН ЛитССР, 1980. С. 109-122.
135. Богданович П.О. Подсистема автоматизированного вычисления спектров многоэлектронных атомов : Сборник программ по математическому обеспечению атомных расчетов. Вып. 14. - Вильнюс: Институт физики АН ЛитССР, 1985. С. 3-13.

136. Рипските П. Программа обмена с внешними запоминающими устройствами SKZONA . - Вильнюс: ГРАП 001380, 1974.
137. Канцерявичюс А.Ю., Рамонас А.А. Программа полуэмпирического расчета уровней энергии и вероятностей переходов атомов / Сборник программ по математическому обеспечению атомных расчетов. Вып. 13. - Вильнюс: Институт физики АН ЛитССР, 1984. С. 1-95.
138. Сургайлене Р.Т., Меркелис Г.В. Программная система для вычисления генеалогических коэффициентов и субматричных элементов (АРТЕСУ). Описание применения. 3536966-00003-013101. - Вильнюс, 1985. (Гос. ФАП, 50360000291).
139. Язык ФОРТРАН./ Под ред. В.П.Ширинова. - Дубна, 1963; ФОРТРАН для БЭСМ-6 / Под ред. П.Румшаса. - Вильнюс: Институт физики и математики АН ЛитССР, 1974.
140. Мазный Г.Л. Программирование на БЭСМ-6 в системе "Дубна" - М.: Наука, 1978. -272 с.
141. Богданович П.О., Жукаускас Г.Л. Расчет характеристик электронных переходов с использованием уточненных значений энергии / Спектроскопия автоионизационных состояний атомов и ионов. - М.: Научный совет по спектроскопии, 1985. С. 55-84.
142. Morrison John. C. Effect of core polarization upon the $f-f$ interactions of rare-earth and actinide ions // Phys. Rev. V . V. 6, No 2. P. 643-650.
143. Сафронова У.И., Иванова А.И., Толмачев В.В. Изучение фейнмановских диаграмм первых двух порядков некоторых состояний легких атомов. III. Численный расчет вкладов и диаграмм // Лит.физ.сб. 1967. Т. 7, № 2. С. 303-319.
144. Fawcett B.C. Wavelengths and classifications of emission li-

nes due to $2s^2 2p^N - 2s 2p^{N+1}$ and $2s 2p^N - 2p^{N+1}$ transitions,
 $Z \leq 28$ // Atomic data and nuclear data tables. 1975.
V. 16. P. 135-164.

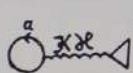
145. Froese-Fischer Ch., Saha H.P. Multiconfiguration Hartree-Fock results with Breit-Pauli corrections for transitions in carbon sequence // Phys.Scrip. 1985. V. 32. P. 181-190.
146. Nussbaumer H., Rusca C. Forbidden transitions in the CI sequence // Astron.Astrophys. 1979. V. 72, No 1-2. P. 129-133.
147. Богданович П.О. Программа численного решения уравнений Хартри-Фока /Сборник программ по математическому обеспечению атомных расчетов. Вып.2. -Вильнюс, ИФ АН ЛитССР. 1978. С. 3-100.
148. Corliss Ch., Sugar J. Energy levels of Iron, Fe I through Fe XXVI // P.Phys.Chem. Ref. Data. 1982. V. 11, No 1. P. 135-241.

П Р И Л О Ж Е Н И Е

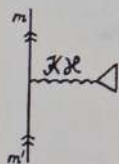
Алгебраические выражения для диаграмм эффективных операторов $F_{эф}^{(1)}, H_{эф}^{(1)}, F_{эф}^{(2)}, H_{эф}^{(2)}$

В приложении помещены алгебраические выражения для тех диаграмм, по которым можно легко найти окончательные алгебраические выражения для операторов $F_{эф}^{(1)}, H_{эф}^{(1)}, F_{эф}^{(2)}$ и $H_{эф}^{(2)}$, используя как основу диаграммы, приводимые на рисунках 5.4, 5.7 и 5.8.

Диаграммы, определяющие оператор $F_{эф}^{(1)}$:



$$= \sqrt{2[l_a]} (a || f^{(ЖЛ)} || a) \delta(ЖЛ, 00)$$



$$= -\frac{1}{\sqrt{[Ж, Л]}} (m || f^{(ЖЛ)} || m') [a^{(\lambda_m)} \times \tilde{a}^{(\lambda_{m'})}]_{m'}^{(ЖЛ)\Gamma}$$

Диаграммы, определяющие оператор $H_{эф}^{(1)}$:

$$\text{Diagram 1} = 2 \sum_{abk} \sqrt{[l_a, l_b]} X_k(aa, bb) \delta(k, 0)$$

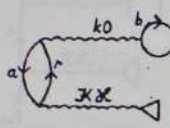
$$\text{Diagram 2} = - \sum_{abk} X_k(ab, ba)$$

$$\text{Diagram 3} = 2\sqrt{2} \sum_{ak} \sqrt{[l_a]} X_k(aa, mm') \delta(k, 0) W^{(00)}(m, m')$$

$$\text{Diagram 4} = -\sqrt{2} \sum_{i \in F} \frac{1}{\sqrt{[l_m]}} X_k(im', mi) W^{(00)}(m, m')$$

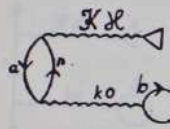
$$\text{Diagram 5} = \sum_k \frac{1}{\sqrt{[k]}} X_k(mm', nn') [W^{(k0)}(m, m') \times W^{(k0)}(n, n')]^{(00)}$$

Диаграммы, определяющие оператор $F_{\text{эф}}^{(2)}$:



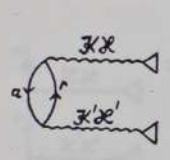
$$= 2\sqrt{2} \sum_{abzk} \frac{\sqrt{[l_b]}}{(\varepsilon_a - \varepsilon_z)} X_k(bb, \alpha z) (z \| f^{(X X)} \| a) \times$$

$$\times \delta(k, 0) \delta(X X, 00)$$



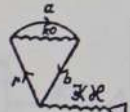
$$= 2\sqrt{2} \sum_{abzk} \frac{\sqrt{[l_b]}}{(\varepsilon_a - \varepsilon_z)} X_k(bb, \alpha a) (a \| f^{(X X)} \| z) \times$$

$$\times \delta(k, 0) \delta(X X, 00)$$

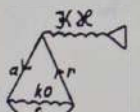


$$= \sum_{\alpha z} \frac{(-1)^{l_a + l_z + X + X' + \Gamma - m_r}}{\sqrt{[X, X, X', X']}} \frac{1}{(\varepsilon_a - \varepsilon_z)} (a \| f^{(X X)} \| z) (z \| f^{(X X')} \| a) \times$$

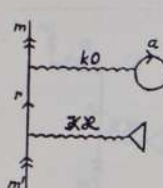
$$\times \delta(X X, X' X') \delta(\Gamma m_r, \Gamma' - m_r)$$



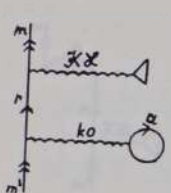
$$= -\sqrt{2} \sum_{abzk} \frac{1}{\sqrt{[l_b]}} \frac{1}{(\varepsilon_b - \varepsilon_z)} X_k(\alpha z, ba) (z \| f^{(X X)} \| b) \delta(X X, 00)$$



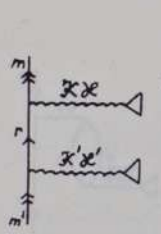
$$= -\sqrt{2} \sum_{abzk} \frac{1}{\sqrt{[l_b]}} \frac{1}{(\varepsilon_a - \varepsilon_z)} X_k(ba, \alpha b) (a \| f^{(X X)} \| z) \delta(X X, 00)$$



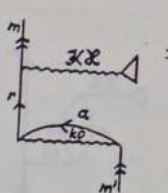
$$= -2 \sum_{ark} \sqrt{\frac{[l_a]}{[l_2, X, X]}} \frac{1}{(\epsilon_{m'} - \epsilon_2)} X_k(a\alpha, m_2)(z) f^{(X, X)} \|m'\rangle \times \delta(k, 0) [a^{(\lambda_m)} \times \tilde{a}^{(\lambda_{m'})}]_{m_r}^{(X, X) \Gamma}$$



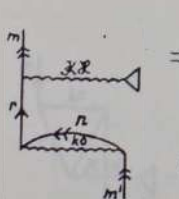
$$= -2 \sum_{ark} \sqrt{\frac{[l_a]}{[l_2, X, X]}} \frac{1}{(\epsilon_{m'} - \epsilon_2)} X_k(a\alpha, m') (m) f^{(X, X)} \|z\rangle \times \delta(k, 0) [a^{(\lambda_m)} \times \tilde{a}^{(\lambda_{m'})}]_{m_r}^{(X, X) \Gamma}$$



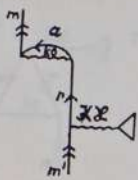
$$= \sum_{\substack{R \\ z, R_1, R_2}} \frac{(-1)^{l_m + l_{m'} + R_1 + R_2}}{(\epsilon_{m'} - \epsilon_2)} \sqrt{\frac{[\Gamma, \Gamma', R_1, R_2]}{[X', R_1, l_{m'}] [X', R_2, s] [X', X', \Gamma']}} \times [\Gamma, \Gamma', R]_{M_r, M_r, M_r} (m) f^{(X, X)} (z) f^{(X, X)} \|m'\rangle [a^{(l_m, s)} \times \tilde{a}^{(l_{m'}, s)}]_{M_r}^{(R_1, R_2) R}$$



$$= \sum_{ark} \frac{\delta(l_2, l_{m'})}{[l_2] \sqrt{[X, X]}} \frac{1}{(\epsilon_{m'} - \epsilon_2)} X_k(a m', z\alpha) (m) f^{(X, X)} \|z\rangle \times [a^{(\lambda_m)} \times \tilde{a}^{(\lambda_{m'})}]_{m_r}^{(X, X) \Gamma}$$

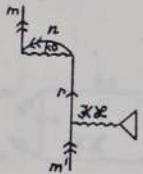


$$= \sum_{rnk} \frac{\delta(l_2, l_{m'})}{[l_2] \sqrt{[X, X]}} \frac{1}{(\epsilon_{m'} - \epsilon_2)} X_k(n m', z n) (m) f^{(X, X)} \|z\rangle \times [a^{(\lambda_m)} \times \tilde{a}^{(\lambda_{m'})}]_{m_r}^{(X, X) \Gamma}$$



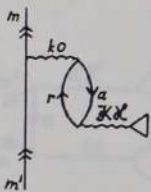
$$= \sum_{ark} \frac{\delta(l_m, l_r)}{[l_r] \sqrt{[X, X]}} \frac{1}{(\epsilon_{m'} - \epsilon_r)} X_k(ar, ma)(z \| f^{(X, X)} \| m') \times$$

$$\times [a^{(\lambda_m)} \times a^{(\lambda_{m'})}]_{m_r}^{(X, X) \Gamma}$$



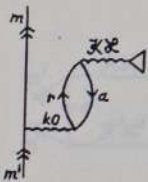
$$= \sum_{rnk} \frac{\delta(l_m, l_r)}{[l_r] \sqrt{[X, X]}} \frac{1}{(\epsilon_{m'} - \epsilon_r)} X_k(nr, mn)(z \| f^{(X, X)} \| m') \times$$

$$\times [a^{(\lambda_m)} \times \tilde{a}^{(\lambda_{m'})}]_{m_r}^{(X, X) \Gamma}$$



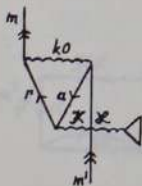
$$= - \sum_{ark} \frac{2}{[k] \sqrt{[k]}} \frac{1}{(\epsilon_a - \epsilon_r)} X_k(mm', ar)(z \| f^{(X, X)} \| a) \times$$

$$\times \delta(X, X, 00) [a^{(\lambda_m)} \times \tilde{a}^{(\lambda_{m'})}]_{m_r}^{(X, X) \Gamma}$$



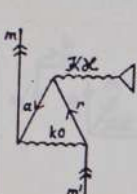
$$= - \sum_{ark} \frac{2}{[k] \sqrt{[k]}} \frac{1}{(\epsilon_{m'} + \epsilon_a - \epsilon_m - \epsilon_r)} X_k(ra, mm')(a \| f^{(X, X)} \| r) \times$$

$$\times \delta(X, X, k0) [a^{(\lambda_m)} \times \tilde{a}^{(\lambda_{m'})}]_{m_r}^{(X, X) \Gamma}$$



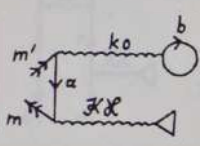
$$= \sum_{ark} \frac{(-1)^{l_r + l_a - k}}{\sqrt{[X, X]}} \frac{1}{(\epsilon_a - \epsilon_r)} \begin{Bmatrix} l_m & l_r & k \\ l_a & l_{m'} & X \end{Bmatrix} X_k(mr, am') \times$$

$$\times (z \| f^{(X, X)} \| a) [a^{(\lambda_m)} \times \tilde{a}^{(\lambda_{m'})}]_{m_r}^{(X, X) \Gamma}$$



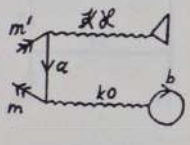
$$= \sum \frac{(-1)^{l_m + l_2 - k}}{a r k \sqrt{[k, \mathcal{L}]}} \frac{1}{(\epsilon_a + \epsilon_{m'} - \epsilon_m - \epsilon_2)} \left\{ \begin{matrix} l_m & l_a & k \\ l_2 & l_{m'} & k \end{matrix} \right\} X_k(m a, r m') \times$$

$$\times (a \| f \| r) [a^{(\lambda_m)} \tilde{\alpha}^{(\lambda_{m'})}]^{(\mathcal{L}, \mathcal{L})} \Gamma_{m_r}$$



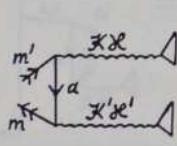
$$= 2 \sum \frac{(-1)^{l_m + l_{m'} - k - \mathcal{L}}}{a b k \sqrt{[k, \mathcal{L}]}} \frac{\sqrt{[l_b]}}{\sqrt{[l_{m'}]}} \frac{1}{(\epsilon_a - \epsilon_m)} X_k(b b, a m') \times$$

$$\times (m \| f \| a) \delta(k, 0) [\tilde{\alpha}^{(\lambda_{m'})} \times a^{(\lambda_m)}]^{(\mathcal{L}, \mathcal{L})} \Gamma_{m_r}$$



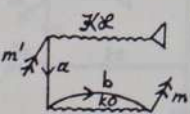
$$= 2 \sum \frac{(-1)^{l_m + l_{m'} - k - \mathcal{L}}}{a b k \sqrt{[k, \mathcal{L}]}} \frac{\sqrt{[l_b]}}{\sqrt{[l_a]}} \frac{1}{(\epsilon_a - \epsilon_m)} X_k(b b, m a) \times$$

$$\times (a \| f \| m') \delta(k, 0) [\tilde{\alpha}^{(\lambda_{m'})} \times a^{(\lambda_m)}]^{(\mathcal{L}, \mathcal{L})} \Gamma_{m_r}$$



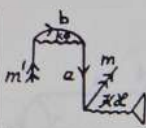
$$= - \sum \frac{(-1)^{R_1 + R_2 - k - \mathcal{L} - k' - \mathcal{L}'}}{a, R_1, R_2, R} \frac{1}{(\epsilon_a - \epsilon_m)} \left\{ \begin{matrix} l_m & l_a & k \\ k' & R_1 & l_m \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} s & s & \mathcal{L} \\ \mathcal{L}' & R_2 & s \end{matrix} \right\} \times$$

$$\times \left\{ \begin{matrix} \mathcal{L}' & k' & \Gamma' \\ \mathcal{L} & k & \Gamma \end{matrix} \right\} \left[\begin{matrix} \Gamma & \Gamma' & R \\ M_r & M_r' & M_r \end{matrix} \right] (a \| f \| m') (m \| f \| a) [\tilde{\alpha}^{(l_m s)} \times \alpha^{(l_m s)}]^{(R_1, R_2) R} \Gamma_{M_r}$$



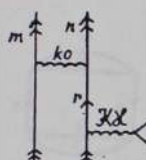
$$= - \sum \frac{(-1)^{l_{m'} + l_m - k - \mathcal{L}}}{a b k [l_m] \sqrt{[k, \mathcal{L}]}} \frac{1}{(\epsilon_a - \epsilon_m)} X_k(b a, m b) (a \| f \| m') \times$$

$$\times \delta(l_m, l_a) [\tilde{\alpha}^{(\lambda_{m'})} \times a^{(\lambda_m)}]^{(\mathcal{L}, \mathcal{L})} \Gamma_{m_r}$$



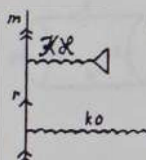
$$= -\sum_{abk} \frac{(-1)^{l_m+l_{m'}-k-l}}{[l_{m'}] \sqrt{[k, k, l]}} \frac{1}{(\epsilon_a - \epsilon_m)} X_k(l_{m'}, ab) (m \| f \| a)^{(\mathcal{K}l)} \times$$

$$\times \delta(l_{m'}, l_a) [\tilde{\alpha}^{(\lambda_{m'})} \times \alpha^{(\lambda_m)}]_{m_r}^{(\mathcal{K}l)\Gamma}$$



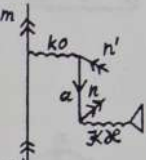
$$= \sqrt{2} \sum_{zk} \frac{(-1)^{l_n+l_{n'}+k}}{\sqrt{[k, k, l]}} \frac{1}{(\epsilon_{n'} - \epsilon_n)} \left\{ \begin{matrix} l_n' & l_n & j_{12} \\ k & k & l_2 \end{matrix} \right\} X_k(m m', n r) (r \| f \| n')^{(\mathcal{K}l)} \times$$

$$\times \left[\alpha^{(\lambda_m)} \times \tilde{\alpha}^{(\lambda_{m'})} \right]^{(k_0)} \times \left[\alpha^{(\lambda_n)} \times \tilde{\alpha}^{(\lambda_{n'})} \right]^{(j_{12} l)} \Big]_{m_r}^{(\mathcal{K}l)\Gamma}$$



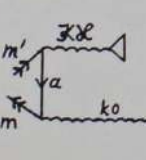
$$= \sqrt{2} \sum_{zk} \frac{(-1)^{l_m+l_{m'}+k}}{\sqrt{[k, k, l]}} \frac{1}{(\epsilon_{m'} + \epsilon_n - \epsilon_n - \epsilon_n)} \left\{ \begin{matrix} k & l_{m'} & l_2 \\ l_m & k & j_{12} \end{matrix} \right\} X_k(r m', n n') \times$$

$$\times (m \| f \| r) \left[\alpha^{(\lambda_m)} \times \tilde{\alpha}^{(\lambda_{m'})} \right]^{(j_{12} l)} \times \left[\alpha^{(\lambda_n)} \times \tilde{\alpha}^{(\lambda_{n'})} \right]^{(k_0)} \Big]_{m_r}^{(\mathcal{K}l)\Gamma}$$



$$= -\sqrt{2} \sum_{ak} \frac{(-1)^{\mathcal{K}l}}{\sqrt{[k, k, l]}} \frac{1}{(\epsilon_a - \epsilon_n)} \left\{ \begin{matrix} l_n & l_n' & j_{12} \\ k & k & l_a \end{matrix} \right\} X_k(m m', a n') (n \| f \| a)^{(\mathcal{K}l)} \times$$

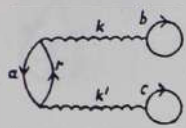
$$\times \left[\alpha^{(\lambda_m)} \times \tilde{\alpha}^{(\lambda_{m'})} \right]^{(k_0)} \times \left[\tilde{\alpha}^{(\lambda_n')} \times \alpha^{(\lambda_n)} \right]^{(j_{12} l)} \Big]_{m_r}^{(\mathcal{K}l)\Gamma}$$



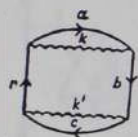
$$= -\sqrt{2} \sum_{ak} \frac{(-1)^{\mathcal{K}l}}{\sqrt{[k, k, l]}} \frac{1}{(\epsilon_a + \epsilon_{n'} - \epsilon_m - \epsilon_n)} \left\{ \begin{matrix} l_m & k & l_a \\ k & l_{m'} & j_{12} \end{matrix} \right\} X_k(m a, n n') \times$$

$$\times (a \| f \| m') \left[\tilde{\alpha}^{(\lambda_{m'})} \times \alpha^{(\lambda_m)} \right]^{(j_{12} l)} \times \left[\alpha^{(\lambda_n)} \times \tilde{\alpha}^{(\lambda_{n'})} \right]^{(k_0)} \Big]_{m_r}^{(\mathcal{K}l)\Gamma}$$

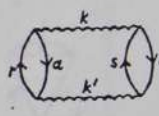
Диаграммы, определяющие оператор $H_{\text{эф}}^{(2)}$:



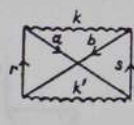
$$= 8 \sum_{\substack{abc \\ rkk'}} \frac{\sqrt{[\ell_b, \ell_c]}}{(\varepsilon_a - \varepsilon_{r'})} X_k(bb, ar) X_{k'}(cc, ra) \delta(k, 0) \delta(k', 0)$$



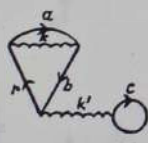
$$= 2 \sum_{\substack{abc \\ rkk'}} \frac{1}{[\ell_b]} \frac{1}{(\varepsilon_b - \varepsilon_r)} X_k(ar, ba) X_{k'}(cb, rc)$$



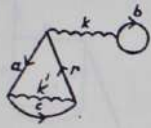
$$= 2 \sum_{\substack{abz \\ s k k'}} \frac{1}{[k]} \frac{1}{(\varepsilon_a + \varepsilon_b - \varepsilon_r - \varepsilon_s)} X_k(ra, sb) X_{k'}(ar, bs)$$



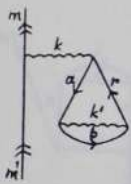
$$= - \sum_{\substack{abz \\ s k k'}} \frac{1}{(\varepsilon_a + \varepsilon_b - \varepsilon_r - \varepsilon_s)} \left\{ \begin{matrix} \ell_a k' \ell_s \\ \ell_b k \ell_r \end{matrix} \right\} X_k(bs, ar) X_{k'}(rb, sa)$$



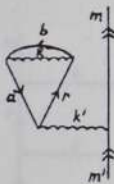
$$= -4 \sum_{\substack{abc \\ rkk'}} \frac{\sqrt{[\ell_c]}}{[\ell_b]} \frac{1}{(\varepsilon_b - \varepsilon_r)} X_k(ar, ba) X_{k'}(cc, rb) \delta(k', 0)$$



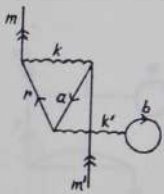
$$= -4 \sum_{\substack{abc \\ zkk'}} \sqrt{\frac{[l_b]}{[l_a]}} \frac{1}{(\epsilon_a - \epsilon_r)} X_k(bb, ar) X_{k'}(ca, rc) \delta(k, 0)$$



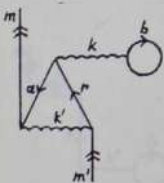
$$= -2\sqrt{2} \sum_{\substack{abz \\ kk'}} \frac{1}{\sqrt{[l_r]}} \frac{1}{(\epsilon_a - \epsilon_r)} X_k(mm', ar) X_{k'}(ba, rb) \times \\ \times \delta(k, 0) W^{(00)}(m, m')$$



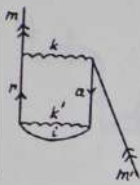
$$= -2\sqrt{2} \sum_{\substack{abz \\ kk'}} \frac{1}{\sqrt{[l_r]}} \frac{1}{(\epsilon_a + \epsilon_{m'} - \epsilon_r - \epsilon_m)} X_k(ab, br) X_{k'}(ra, mm') \times \\ \times \delta(k, 0) W^{(00)}(m, m')$$



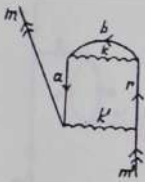
$$= -2\sqrt{2} \sum_{\substack{abz \\ kk'}} \sqrt{\frac{[l_b]}{[l_m, l_r]}} \frac{1}{(\epsilon_a - \epsilon_r)} X_k(mr, am') X_{k'}(ra, bb) \times \\ \times \delta(k', 0) W^{(00)}(m, m')$$



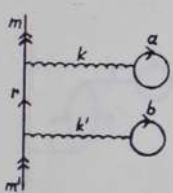
$$= -2\sqrt{2} \sum_{\substack{abz \\ kk'}} \sqrt{\frac{[l_b]}{[l_m, l_r]}} \frac{1}{(\epsilon_a + \epsilon_{m'} - \epsilon_r - \epsilon_m)} X_k(ar, bb) \times \\ \times X_{k'}(ma, rm') \delta(k, 0) W^{(00)}(m, m')$$



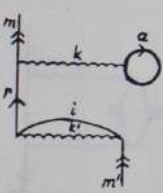
$$= \sqrt{2} \sum_{i \in F} \frac{1}{a_2 k k'} \frac{1}{\sqrt{[l_2] \sqrt{[l_m]}}} \frac{1}{(\epsilon_a - \epsilon_2)} X_k(mz, am') X_{k'}(zi, ia) \times W(m, m')^{(00)}$$



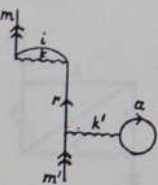
$$= \sqrt{2} \sum_{k k'} \frac{1}{a b z} \frac{1}{\sqrt{[l_a] \sqrt{[l_m]}}} \frac{1}{(\epsilon_a + \epsilon_{m'} - \epsilon_m - \epsilon_2)} X_k(ab, bz) X_{k'}(ma, zm') \times W(m, m')^{(00)}$$



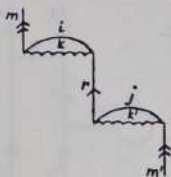
$$= 4\sqrt{2} \sum_{k k'} \frac{1}{a b z} \sqrt{\frac{[l_a, l_b]}{[l_2]}} \frac{1}{(\epsilon_{m'} - \epsilon_2)} X_k(aa, mz) X_{k'}(bb, zm') \times \delta(k, 0) \delta(k', 0) W(m, m')^{(00)}$$



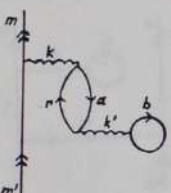
$$= -2\sqrt{2} \sum_{i \in F} \frac{1}{a_2 k k'} \frac{1}{\sqrt{[l_a] \sqrt{[l_2]}}} \frac{1}{(\epsilon_{m'} - \epsilon_2)} X_k(aa, mz) X_{k'}(im', zi) \times \delta(k, 0) W(m, m')^{(00)}$$



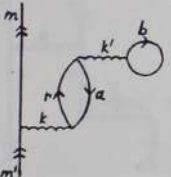
$$= -2\sqrt{2} \sum_{i \in F} \frac{1}{a_2 k k'} \frac{1}{\sqrt{[l_a] \sqrt{[l_2]}}} \frac{1}{(\epsilon_{m'} - \epsilon_2)} X_k(ir, mi) X_{k'}(aa, zm') \times \delta(k', 0) W(m, m')^{(00)}$$



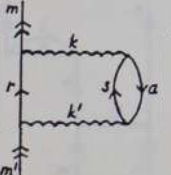
$$= \sqrt{2} \sum_{\substack{rkk' \\ ij \in F}} \frac{1}{[l_m]^{3/2}} \frac{1}{(\epsilon_{m'} - \epsilon_r)} X_k(ir, mi) X_{k'}(jm', rj) \times \\ \times W^{(00)}(m, m')$$



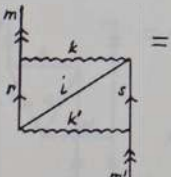
$$= 4\sqrt{2} \sum_{\substack{abz \\ kk'}} \frac{\sqrt{[l_b]}}{(\epsilon_a - \epsilon_r)} X_k(az, mm') X_{k'}(bb, za) \times \\ \times \delta(k, 0) \delta(k', 0) W^{(00)}(m, m')$$



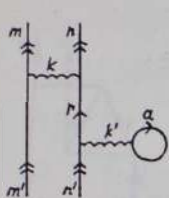
$$= 4\sqrt{2} \sum_{\substack{abz \\ kk'}} \frac{\sqrt{[l_b]}}{(\epsilon_a + \epsilon_{m'} - \epsilon_r - \epsilon_m)} X_k(mm', za) X_{k'}(az, bb) \times \\ \times \delta(k, 0) \delta(k', 0) W^{(00)}(m, m')$$



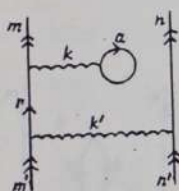
$$= 2\sqrt{2} \sum_{\substack{ars \\ kk'}} \frac{1}{[k] \sqrt{[l_{m'}]}} \frac{1}{(\epsilon_{m'} + \epsilon_a - \epsilon_r - \epsilon_s)} X_k(mz, as) \times \\ \times X_{k'}(zm', sa) W^{(00)}(m, m')$$



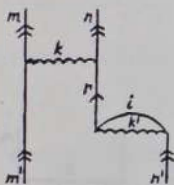
$$= -\sqrt{2} \sum_{\substack{rskk' \\ i \in F}} \frac{1}{\sqrt{[l_m]}} \frac{1}{(\epsilon_{m'} + \epsilon_i - \epsilon_s - \epsilon_r)} \left\{ \begin{matrix} k & l_m & l_2 \\ k' & l_i & l_s \end{matrix} \right\} X_k(mz, is) \times \\ \times X_{k'}(zi, sm') W^{(00)}(m, m')$$



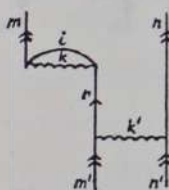
$$= 4 \sum_{\substack{r a \\ k k'}} \frac{\sqrt{[l_a]}}{\sqrt{[k, l_2]}} \frac{1}{(\epsilon_{n'} - \epsilon_2)} X_k(m m', n z) X_{k'}(r n', a a) \delta(k', 0) \times \\ \times [W(m, m') \times W(n, n')]^{(00)}$$



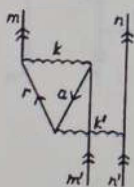
$$= 4 \sum_{\substack{r a \\ k k'}} \frac{\sqrt{[l_a]}}{\sqrt{[k', l_2]}} \frac{1}{(\epsilon_{m'} + \epsilon_{n'} - \epsilon_2 - \epsilon_n)} X_k(m r, a a) X_{k'}(r m', n n') \times \\ \times \delta(k, 0) [W(m, m') \times W(n, n')]^{(k'0)}$$



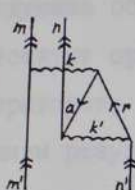
$$= -2 \sum_{\substack{r k k' \\ i \in F}} \frac{1}{[l_2] \sqrt{[k]}} \frac{1}{(\epsilon_{n'} - \epsilon_2)} X_k(m m', n z) X_{k'}(r i, i n') \times \\ \times [W(m, m') \times W(n, n')]^{(k'0)}$$



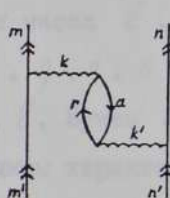
$$= -2 \sum_{\substack{r k k' \\ i \in F}} \frac{1}{[l_2] \sqrt{[k]}} \frac{1}{(\epsilon_{m'} + \epsilon_{n'} - \epsilon_2 - \epsilon_n)} X_k(m i, i z) X_{k'}(r m', n n') \times \\ \times [W(m, m') \times W(n, n')]^{(k'0)}$$



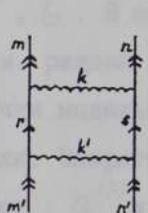
$$= -2 \sum_{\substack{r a \\ k k'}} \frac{1}{\sqrt{[k']}} \frac{1}{(\epsilon_a + \epsilon_{n'} - \epsilon_2 - \epsilon_n)} \left\{ \begin{matrix} l_2 & k & l_m \\ l_m & k' & l_a \end{matrix} \right\} X_k(m r, a m') \times \\ \times X_{k'}(r a, n n') [W(m, m') \times W(n, n')]^{(k'0)}$$



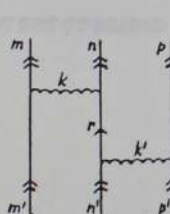
$$= 2 \sum_{\substack{k \\ k'}} \frac{1}{a^2} \frac{1}{\sqrt{[k]}} \frac{1}{(\varepsilon_a + \varepsilon_{n'} - \varepsilon_n - \varepsilon_r)} \left\{ \begin{matrix} l_a & k' & l_n \\ l_{n'} & k & l_r \end{matrix} \right\} X_k(mm', ar) \times \\ \times X_{k'}(na, rn') [W(m, m') \times W(n, n')]^{(ko)}$$



$$= 4 \sum_{\substack{k \\ k'}} \frac{1}{a^2} \frac{1}{[k]^{3/2}} \frac{1}{(\varepsilon_a + \varepsilon_{n'} - \varepsilon_r - \varepsilon_n)} X_k(mm', ar) X_{k'}(ra, nn') \times \\ \times [W(m, m') \times W(n, n')]^{(ko)}$$



$$= \sum_{\substack{rsk \\ k'j_{12}}} \frac{\sqrt{[j_{12}]}}{(\varepsilon_{m'} + \varepsilon_{n'} - \varepsilon_r - \varepsilon_s)} \left\{ \begin{matrix} k & k' & j_{12} \\ l_{m'} & l_m & l_r \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} k & k' & j_{12} \\ l_{n'} & l_n & l_s \end{matrix} \right\} X_k(mr, ns) \times \\ \times X_{k'}(rn', sn') [W(m, m') \times W(n, n')]^{(j_{12}0)}$$



$$= 2 \sqrt{2} \sum_{\substack{r \\ k'j_{12}}} \frac{\sqrt{[j_{12}]}}{\sqrt{[k, k']}} \frac{1}{(\varepsilon_{n'} + \varepsilon_{r'} - \varepsilon_r - \varepsilon_p)} \left\{ \begin{matrix} k & k' & j_{12} \\ l_{n'} & l_n & l_r \end{matrix} \right\} X_k(mm', nr) \times \\ \times X_{k'}(rn', rp') [W(m, m') \times W(n, n')]^{(ko)} \times W(r, p')^{(k'o)}$$

В приложении, как и в тексте диссертации, используются следующие обозначения: буквы $k, \mathcal{K}, j_\mu, R_1 (\mathcal{L}, R_2)$ соответствуют орбитальным (спиновым) рангам неприводимых тензорных операторов; Γ, R - результирующим рангам; m_Γ или M_R - проекциям результирующего ранга Γ или R ; ϵ - энергетическому множителю; $f^{(\mathcal{K}\mathcal{L})}$ - одночастичному оператору с орбитальным рангом \mathcal{K} и спиновым рангом \mathcal{L} ; ℓ, s - орбитальным и спиновым квантовым числам, соответственно; λ - определяет пару квантовых чисел ℓ, s , а латинские буквы $a, b, c, d, m, n, p, q, r, s, t, v, g, h, i, j$ - пару квантовых чисел n, ℓ . Буквы a, b, c, d указывают, что рассматриваемые величины характеризуются квантовыми числами совокупности F , а $m, n, p, q (r, s, t, v)$ - совокупности $F' (G)$, и, наконец, буквами g, h, i, j - любой из совокупностей F, F', G . В совокупность $F (F')$ включаются спин-орбитали $|i\rangle$ (см. раздел 5), определяющие заполненные (незаполненные) оболочки модельного пространства, а в G - виртуальные спин-орбитали. Операторы рождения и уничтожения соответственно обозначает $a^{(\lambda)}$ и $\tilde{a}^{(\lambda)}$ (см. определение в разделе 2). Субматричные элементы оператора $f^{(\mathcal{K}\mathcal{L})}$ обозначаются $(z \| f^{(\mathcal{K}\mathcal{L})} \| a)$, а обозначения $X_k(n_i \ell_i; n'_i \ell'_i; n_j \ell_j; n'_j \ell'_j)$, $W_{(n_i \ell_i; n'_i \ell'_i)}^{(k_i k_s)}$ соответственно даны в (3.16), (3.19).

Vilniaus
Valstybinė
Universiteto
Mokslinė
Biblioteka

F76-3107