Vilniaus Darbo raudonosios vėliavos ir Tautų draugystės
ordinų valstybinis V.Kapsuko universitetas

F I Z I K O S fakultetas

Teorinės fizikos katedra

G.Gaigalas

D I P L O M I N I S D A R B A S

EFEKTYVINIŲ OPERATORIŲ ANTRINIAME KVANTAVIME NEREDUKUOTINIS PAVIDALAS

Katedros vedėjas.....
/prof. A.Bandzaitis/

Darbo vadovas.....
/f.k. J.Kaniauskas/

Diplomantas.....
/G.Gaigalas/

Vilnius - 1 9 8 2.

Vilniaus Darbo raudonosios vėliavos ir Tautų draugystės ordinų valstybinis V.Kapsuko universitetas

F I Z I K O S fakultetas

Teorinės fizikos katedra

T V I R T I N U

Katedros vedėjas

/prof. A. Bandzaitis/

1982 m.....mėn.....d.

Diplominio darbo užduotis

Studentas G. Gaigalas

Diplominio darbo tema: EFEKTYVINIŲ OPERATORIŲ ANTRINIAME KVANTAVIME NEREDUKUOTINIS PAVIDALAS

Patvirtinta..... Rektoriaus įsakymu.....

Diplominio darbo pateikimo data 1982 .....

Užduotis duota 1982 m. sausio mėn. 19 d.

Vadovas ...J. Kaniauskas.....

Užduotį gavau 1982 m. vasario mėn. 25 d.

Diplomantas .....

T U R I N Y S

1. Įvadas .....3.

2. Antrinis kvantavimas tenzoriniame pavidale..... 4.

3. Gimimo ir išnykimo operatoriai surištame pavidale ..... 7.

4. Elektrostatinės sąveikos energijos operatorius tenzoriniame pavidale .....12.

5. Centrinės simetrijos artutinumas .....15.

6. Efektyvinis aprašymo atvejis .....26.

7. Išvados..... 39.

08. Literatūra ..... 42.

1. ĮVADAS

Daugiaelektroninio atomo ir jono spektroskopija pasilieka viena iš svarbiausių sričių dabartinėje fizikoje. Pagrindinis jos bruožas - suderinti eksperimentinių ir teorinių tyrimų metodikas, kurios viena kitą papildo. Atomo teorijoje plačiai naudojami šiuolaikiniai matematinių funkcijų ir lauko teorijos metodai (antrinis kvantavimas, grupių teorija ir kt.). Taikant antrinį kvantavimą tenzoriniame pavidale, galima padidinti teorinių skaičių efektyvumą, teoriškai išanalizuoti sudėtingesnius atomus. Išraiškos, kuriose gimimo ir išnykimo operatoriai surišti į tenzorinę sandaugą, ypač patogios tuo, kad, analizuojant sudėtingų elektronų konfiguracijas, pilnai išnaudojamos judesio kiekio momento simetrijos savybės ir antrinio kvantavimo aparato privalumai. Kadangi efektyvinių operatorių išraiškos antrinio kvantavimo surištame pavidale prieinamoje literatūroje neteko sutikti, todėl šio darbo tikslas - pabandyti gauti elektrostatinės sąveikos energijos operatoriaus išraiškas sluoksnio viduje ir sudėtingoms konfiguracijoms per gimimo ir išnykimo operatorių tenzorines sandaugas. Iš šių operatorių pasistengti išskirti narius, turinčius centrinę simetriją, o po to, mėginti gauti efektyvinio operatoriaus pataisas nereliatyvistinei energijai antrajame pertirbacijų teorijos artutinume.

2. ANTRINIS KVANTAVIMAS TENZORINIAME PAVIDALE

Daugelio dalelių teorijoje plačiai naudojamas antrinio kvantavimo metodas. Jo pagrindinė idėja - suteikti operatoriams tas savybes, kurias paprastai turi viendalelinė banginė funkcija:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{p_1}(\xi_1) & \cdots & \psi_{p_1}(\xi_N) \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \psi_{p_N}(\xi_1) & \cdots & \psi_{p_N}(\xi_N) \end{vmatrix} \qquad (2.1)$$

Antrinio kvantavimo metode sistemos būsena aprašoma bangine funkcija $\Phi(N_1, N_2, \ldots N_n)$ "dalelių užpildymo erdvėje". Ji sudaroma gimimo operatorių pagalba. Gimimo operatorių $\hat{a}^+$ ir išnykimo operatorių $\hat{a}$ antikomutacijos sąlygos (žt. [4,6]).

$$\hat{a}_i \hat{a}_k^+ + \hat{a}_k^+ \hat{a}_i = \delta_{ik} \qquad (2.2)$$

$$\hat{a}_i \hat{a}_k + \hat{a}_k \hat{a}_i = 0 \qquad (2.3)$$

$$\hat{a}_i^+ \hat{a}_k^+ + \hat{a}_k^+ \hat{a}_i^+ = 0 \qquad (2.4)$$

kur atomų atveju indeksai i, K reiškia kvantinių skaičių n, l, s, m_l, m_s rinkinį.

Atitinkamai viendalelinis ir dvidalelinis operatoriai antriniame kvantavime užrašomi:

$$\hat{F}^{(1)} = \sum_{i,k} \langle i | f^{(1)} | k \rangle \hat{a}_i^+ \hat{a}_k \qquad (2.5)$$

$$\hat{F}^{(2)} = \sum_{i,k,l,m} \frac{1}{2} \langle ik | f^{(2)} | lm \rangle \hat{a}_i^+ \hat{a}_k^+ \hat{a}_m \hat{a}_l \qquad (2.6)$$

Remdamiesi principu, jeigu dviejų operatorių matriciniai ele-

mentai sutampa, tai sutaps ir operatoriai, galima įrodyti, jog operatorių išraiškos (2.5) ir (2.6) yra teisingos. Tam reikia su viendalelinėmis banginėmis funkcijomis (2.1) apskaičiuoti operatorių (2.5), (2.6) matricinius elementus ir gautas išraiškas sulyginti su įprastai užrašytų viendalelinių ir dvidalelinių operatorių matriciniais elementais, apskaičiuotais viendalelinėje banginių funkcijų bazėje ([4, 6]).

Rinkinys $T^{(k)}_q$ $(q=-k,-k+1,\dots,k)$ yra tenzorius $T^{(k)}$ kampinio momento $j^{(1)}$ atžvilgiu, jeigu jo komponentės tenkina (žt. [2, 3]),

$$\left[j^{(1)}_q, T^{(k)}_p \right] = i\sqrt{k(k+1)} \begin{bmatrix} k & 1 & q \\ p & q & p+q \end{bmatrix} T^{(k)}_{p+q} \qquad (2.7)$$

Paimame gimimo operatorių $\hat{a}^+_i$ rinkinį, kurie turi vienodus kvantinius skaičius n, l ir skirtingus kvantinius skaičius m_s ir m_l. Pažiūrėsime, kaip komutuoja gimimo operatorių rinkinys su sukinių ir orbitinių momentų operatorių rinkiniais, užrašytais tenzoriniame pavidale. Tikriname komutaciją:

$$\left[S^{(1)}_q, \hat{a}^+_{m_l m_s} \right] \qquad (2.8)$$

Pasinaudoję išraiška (2.5), sukinio operatorių užrašome antriniame kvantavime:

$$\left[S^{(1)}_q, \hat{a}^+_{m''_l m''_s} \right] = \sum_{\substack{m_s m_l \\ m'_s m'_l}} \left[\hat{a}^+_{m_l m_s} (n l s m_l m_s | S^{(1)}_q | n l s m'_l m'_s) \hat{a}_{m'_l m'_s} \times \right.$$

$$\left. \times \hat{a}^+_{m''_l m''_s} - \hat{a}^+_{m''_l m''_s} \hat{a}^+_{m_l m_s} (n l s m_l m_s | S^{(1)}_q | n l s m'_l m'_s) \hat{a}_{m'_l m'_s} \right] \qquad (2.9)$$

Remiantis A.Jucio ir A.Bandzaičio [11] formulėmis (37.1)

(37.2) ir (37.15), sukinio operatoriaus matricinis elementas atrodys:

$$(n l s m_l m_s | S_q^{(1)} | n l s m_l' m_s') = i\sqrt{s(s+1)} \begin{bmatrix} s & 1 & s \\ m_s - q & q & m_s \end{bmatrix} \times$$

$$\times \delta(m_s, q - m_s') \, \delta(m_l, m_l') \qquad (2.10)$$

Prisimindami (2.2) ir (2.4) gimimo ir išnykimo operatorius pertvarkome taip, kad formulėje (2.9) pirmame ir antrame naryje operatorių stovėjimo tvarka sutapyų. Tada gausime:

$$[S_q^{(1)}, \hat{a}^+_{m_l m_s}] = i\sqrt{s(s+1)} \begin{bmatrix} s & 1 & s \\ m_s & q & q+m_s \end{bmatrix} \hat{a}^+_{m_l \, m_s + q} \qquad (2.11)$$

Analogiškai randame komutacijos išraišką:

$$[L_q^{(1)}, \hat{a}^+_{m_l m_s}] = i\sqrt{l(l+1)} \begin{bmatrix} l & 1 & l \\ m_l & q & q+m_l \end{bmatrix} \hat{a}^+_{m_l + q \, m_s} \qquad (2.12)$$

Sulyginę (2.11) ir (2.12) su (2.7) matome, jog operatorių $\hat{a}^+_{m_l m_s}$ rinkinys $(2s+1)(2l+1)$, kur - $-s \leq m_s \leq s$, $-l \leq m_l \leq l$, sudaro komponentes dvigubo tenzoriaus $\hat{a}^+_{m_l m_s}$ su rangu s sukinio erdvėje ir rangu l orbitinio momento erdvėje. Toks tenzorius žymimas $a^{+(ls)}_{m_l m_s}$

Sudarant dvigubą tenzorių iš išnykimo operatorių, reikia įskaityti papildomą fazę. Nagrinėjant operatorių pavidalu

$$\tilde{\hat{a}}_{m_l m_s} = (-1)^{s+l-m_s-m_l} \hat{a}_{-m_l -m_s} \qquad (2.13)$$

ir tokiu pat keliu, kaip anksčiau, radę komutacijas

$$\left[S^{(1)}_{q}, \hat{\tilde{a}}_{-m_\ell -m_s} \right] = i\sqrt{s(s+1)} \begin{bmatrix} s & 1 & s \\ -m_s & q & -m_s+q \end{bmatrix} \hat{\tilde{a}}_{m_\ell -m_s+q} \qquad (2.14)$$

$$\left[L^{(1)}_{q}, \hat{\tilde{a}}_{-m_\ell -m_s} \right] = i\sqrt{\ell(\ell+1)} \begin{bmatrix} \ell & 1 & \ell \\ -m_\ell & q & -m_\ell+q \end{bmatrix} \hat{\tilde{a}}_{-m_\ell+q -m_s} \qquad (2.15)$$

matome, kad operatorių $\hat{\tilde{a}}_{m_\ell m_s}$ rinkinys sudaro dvigubą tenzorių $\tilde{a}^{(\ell s)}_{m_\ell m_s}$ su rangu s sukinio erdvėje ir rangu ℓ orbitinio momento erdvėje.

3. GIMIMO IR IŠNYKIMO OPERATORIAI SURIŠTAME PAVIDALE

Žinant tenzorių $\tilde{a}^{(\ell s)}$ ir $a^{+(\ell s)}_{m_\ell m_s}$ rangus, galima sudaryti tenzorinę sandaugą. Pasinaudoję [11] (38.2), gimimo ir išnykimo operatorių tenzorinė sandauga atrodys:

$$\left[a^{+(\ell s)} \times \tilde{a}^{(\ell s)} \right]^{(\varkappa\kappa)}_{\pi q} = \sum_{\substack{m_s m_\ell \\ m'_s m'_\ell}} a^{+(\ell s)}_{m_\ell m_s} \tilde{a}^{(\ell s)}_{m'_\ell m'_s} \begin{bmatrix} s & s & \kappa \\ m_s & m'_s & q \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ell & \ell & \varkappa \\ m_\ell & m'_\ell & \pi \end{bmatrix} \qquad (3.1)$$

Įrodome, kad dydis $\left[a^{+(\ell s)} \times a^{(\ell s)} \right]^{(\varkappa\kappa)}$ yra tenzorius $W^{(\varkappa\kappa)}$ antriniame kvantavime, kur tenzoriaus $W^{(\varkappa\kappa)}$ redukuotas matricinis elementas lygus

$$(s\ell \| W^{(\varkappa\kappa)} \| s\ell) = \sqrt{(2\kappa+1)(2\varkappa+1)} \qquad (3.2)$$

Užrašę $W^{(\varkappa\kappa)}$ komponentes antriniame kvantavime, pritaikę Vignerio-Ekarto teoremą, atitinkamai pertvarkę Klepšo-Gordano koeficientus, rendamiesi formule (13.2B) iš [11] ir (2.13) turime:

$$W^{(\varkappa\kappa)}_{\pi q} = \sum_{\substack{m_s m_\ell \\ m'_s m'_\ell}} (-1)^{2m'_s} a^{+(\ell s)}_{m_\ell m_s} \frac{\begin{bmatrix} \ell & \ell & \varkappa \\ m_\ell & m'_\ell & \pi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s & s & \kappa \\ m_s & m'_s & q \end{bmatrix}}{\sqrt{(2\kappa+1)(2\varkappa+1)}} (s\ell \| \omega^{(\varkappa\kappa)} \| s\ell)\, \tilde{a}^{(\ell s)}_{m_\ell m_s} \qquad (3.3)$$

Prisiminę (3.1) ir (3.2) gauname:

$$\left[a^{+(\ell s)} \times \tilde{a}^{(\ell s)} \right]^{(\varkappa\kappa)}_{\pi q} = - W^{(\varkappa\kappa)}_{\pi q} \qquad (3.4)$$

Lygybė (3.4) galioja bet kokiems π ir q, t.y. bet kokioms $W^{(\varkappa\kappa)}$ ir $\left[a^{+(\ell s)} \times \tilde{a}^{(\ell s)} \right]^{(\varkappa\kappa)}$ komponentėms. Vadinasi, galios lygybė ir tarp tenzorių. $W^{(\varkappa\kappa)}$ naudingas tuo, kad per jį galima išreikšti visus operatorius, kurie turi pavidalą (2.5). Pasinaudojant formule (15.20) iš [11] ir (3.1) nesunku parodyti, jog nulinio rango tenzorius lygus

$$W^{(00)} = - \frac{\hat{N}}{\sqrt{(2s+1)(2\ell+1)}} \qquad (3.5),$$

kur $\hat{N}$ sluoksnio $n\ell$ dalelių užpildymo skaičiaus operatorius.

Prisiminę (2.5) užrašome operatoriaus $S^{(1)}_q$ išraišką antriniame kvantavime; pritaikę Vignerio-Ekarto teoremą, panaudoję (2.13), remdamiesi formulėmis (13.2B), (37.15) iš [11] ir prasumavę pagal m_s, m_ℓ turėsime operatoriaus $S^{(1)}_q$ išraišką antrame kvantavime:

$$S^{(1)}_q = - \sum_{n\ell} i \sqrt{\frac{2\ell+1}{2}}\, W^{(01)}_{0q} \qquad (3.6)$$

arba sluoksnio viduje

$$S^{(1)}_q(\ell) = - i \sqrt{\frac{2\ell+1}{2}}\, W^{(01)}_{0q} \qquad (3.7)$$

Tolimesniems skaičiavimams reikalinga lygybė:

$$\hat{N}_{\varkappa} = \sqrt{(2s+1)(2l+1)}\,\left[\tilde{a}^{(ls)} \times a^{+(ls)}\right]^{(00)} \qquad (3.8),$$

kur $\hat{N}_{\varkappa}$ - sluoksnio $n\,l$ skylučių užpildymo skaičiaus operatorius. Išraiškos (3.8) gavimo kelias toks pats, kaip formulės

Toliau nagrinėjame tenzoriaus $W^{(\varkappa\kappa)}$ savybes ir sąryšius, kurie bus reikalingi gaunant tarp elektronų elektrostatinės sąveikos energijos operatorių antrame kvantavime. Analizuojame $\left[\tilde{a}^{(ls)} \times a^{+(ls)}\right]^{(\varkappa\kappa)}_{\pi q}$. Prisiminę gimimo, išnykimo operatorių komutacijos sąlygą (2.2), prasumavę pagal projekcijas, turėsime:

$$\left[\tilde{a}^{(ls)} \times a^{+(ls)}\right]^{(\varkappa\kappa)} + (-1)^{2l+2s-\varkappa-\kappa}\left[a^{+(ls)} \times \tilde{a}^{(ls)}\right]^{(\varkappa\kappa)} =$$

$$= \delta(\varkappa,0)\,\delta(\kappa,0)\sqrt{(2s+1)(2l+1)} \qquad (3.9)$$

Įrodysime lygybę:

$$\left[\left[a^{+(ls)} \times a^{+(ls)}\right]^{(\varkappa\kappa)} \times \left[\tilde{a}^{(ls)} \times \tilde{a}^{(ls)}\right]^{(\varkappa\kappa)}\right]^{(00)} -$$

$$-\left[\left[\tilde{a}^{(ls)} \times \tilde{a}^{(ls)}\right]^{(\varkappa\kappa)} \times \left[a^{+(ls)} \times a^{+(ls)}\right]^{(\varkappa\kappa)}\right]^{(00)} =$$

$$= \sqrt{\frac{(2\varkappa+1)(2\kappa+1)}{(2l+1)(2s+1)}}\left(1+(-1)^{\varkappa+\kappa}\right)\left(\left[a^{+(ls)} \times \tilde{a}^{(ls)}\right]^{(00)} + \left[\tilde{a}^{(ls)} \times a^{+(ls)}\right]^{(00)}\right) \qquad (3.10)$$

Nagrinėjame lygybės (3.10) pirmą dalį. Pasinaudoję (3.1), išskleidžiame tenzorinę sandaugą. Perstatę atitinkamai gimimo ir išnykimo operatorius, gausime penkis narius iš kurių keturi turės

po vieną gimimo ir išnykimo operatorių, o vienas - du gimimo ir du išnykimo. Pastarąjį narį galima surišti į tenzorinę sandaugą. Dar lieka keturi nariai. Pasinaudodami Klepšo-Gordano koeficientų simetrijos savybėmis, šiuos koeficientus perstatome taip, kad pirmame stulpelyje būtų kvantiniai skaičiai tų gimimo ir išnykimo operatorių, kurie, kilnojant operatorius, išnyko, o antrame - stovėtų kvantiniai skaičiai $K, \mathcal{H}$ ir jų projekcijos. Tą ątliekame todėl, kad prasumuotume, pasinaudojant formule (11.19) iš [11]. Kad fazėje neliktų kintamųjų pagal kuriuos sumuosime, pasinaudojame Klepšo-Gordano koeficientų savybe (11.11) iš [11]. Prasumavus ateis delta funkcija, kuri suvienodins gimimo ir išnykimo operatorių kvantinius skaičius. Tada, pasinaudodami formule (15.20) iš [11], galime gauti gimimo ir išnykimo operatorių tenzorinę sandaugą. Galutinai turėsime (3.10)

Įrodysime sąryšį:

$$\left[\left[a^{+(\ell s)} \times a^{+(\ell s)}\right]^{(L,S)} \times \left[\tilde{a}^{(\ell s)} \times \tilde{a}^{(\ell s)}\right]^{(L,S)}\right]^{(00)} =$$

$$= \sum_{j_{12} j'_{12}} \left[(2S+1)(2L+1)(2j_{12}+1)(2j'_{12}+1)\right]^{\frac{1}{2}} (-1)^{-j_{12}-j'_{12}} \begin{Bmatrix} s & s & S \\ s & s & j_{12} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \ell & \ell & L \\ \ell & \ell & j'_{12} \end{Bmatrix} \times$$

$$\times \left[W^{(j'_{12} j_{12})} \times W^{(j'_{12} j_{12})}\right]^{(00)} + \left\{\frac{(2S+1)(2L+1)}{(2s+1)(2\ell+1)}\right\}^{\frac{1}{2}} W^{(00)} \qquad (3.11)$$

Formulės (3.11) kairį narį išskleidžiame prisiminę (3.1). Atitinkamai perstatę tenzorius, gausime du narius. Viename naryje bus vienas gimimo ir vienas išnykimo operatorius, o kitame - po du gimimo ir išnykimo operatorius. Pasinaudoję Klepšo-Gordano koeficientų simetrijos savybėmis ir (11.11) iš [11], galime abejuose nariuose gimimo ir išnykimo operatorius surišti į tenzorinę san-

daugą. Gauta išraiška sutaps su formule (3.11) .

Paanalizuosime tenzorinės sandaugos

$$\left[a^{+(\ell s)} \times a^{+(\ell s)} \right]^{(LS)}$$

savybes.

Išskleidę tenzorinę sandaugą ir pasinaudojus komutacijos sąlyga (2.4) vėl surišame gimimo ir išnykimo operatorius į tenzorinę sandaugą. Iš čia matome, jog, kai $S+L$ nelyginis skaičius, tai

$$\left[a^{+(\ell s)} \times a^{+(\ell s)} \right]^{(LS)} = 0 \qquad (3.12)$$

Lygybę

$$\left[\left[a^{+(\ell_1 s)} \times a^{+(\ell_2 s)} \right]^{(LS)} \times \left[\tilde{a}^{(\ell_1 s)} \times \tilde{a}^{(\ell_2 s)} \right]^{(LS)} \right]^{(00)} =$$

$$= (-1)^{-S-L+\ell_1+\ell_2} \left[\left[a^{+(\ell_1 s)} \times a^{+(\ell_2 s)} \right]^{(LS)} \times \left[\tilde{a}^{(\ell_1 s)} \times \tilde{a}^{(\ell_2 s)} \right]^{(LS)} \right]^{(00)} \qquad (3.13)$$

gauname, atskleidę formulės (3.13) kairę pusę, atitinkamai sukiloję gimimo ir išnykimo opertorius ir pasinaudoję Klepšo-Goedano koeficientų simetrijos savybėmis.

Šiame skirsnyje gautos išraiškos (3.5) - (3.13) bus reikalingos, ieškant tenzoriniame pavidale elektrostatinės sąveikos energijos operatoriaus ir, išskiriant iš jo narį, turintį centrinę simetriją.

4. ELEKTROSTATINĖS SĄVEIKOS ENERGIJOS OPERATORIUS TENZORINIAME PAVIDALE

Remiantis antrinio kvantavimo tenzoriniame pavidale metodu, gausime tarp elektronų elektrostatinės sąveikos operatorių sluoksnio viduryje. Pasinaudoję formulėmis (5.9) ir (5.11) iš [10], perstatę operatorius vietomis, prisiminę išraišką ir pritaikę Ekarto-Vignerio teoremą, turėsime:

$$\hat{G} = -\frac{1}{2}\sum_{\substack{m_s m_e \\ m'_e m'''_e}}\sum_{k=0}^{2l}\sum_{q=-k}^{k}(-1)^{k-q}\frac{(l\|C^{(k)}\|l)^2}{(2l+1)}R_k(nlnl,nlnl)\,a^{+(es)}_{m_e m_s}\begin{bmatrix} l & k & l \\ m''_e & -q & m_e \end{bmatrix}\times$$

$$\times\begin{bmatrix} l & k & l \\ m'''_e & q & m'_e \end{bmatrix}(-1)^{-s-l-m'''_e-m'_s}\tilde{a}^{(es)}_{-m'''_e-m_s} + \frac{1}{2}\sum_{\substack{m_s m_e m'_s m'_e \\ m''_e m''_s}}\sum_{k=0}^{2l}\sum_{q=-k}^{k}(-1)^{k-q}\frac{(l\|C^{(k)}\|l)^2}{(2l+1)}\times$$

$$\times R_k(nlnl,nlnl)\,a^{+(es)}_{m_e m_s}\begin{bmatrix} l & k & l \\ m''_e & -q & m_e \end{bmatrix}(-1)^{-s-l-m_s-m''_e}\tilde{a}^{(es)}_{-m''_e-m_s}\,a^{+(es)}_{m'_e m'_s}\begin{bmatrix} l & k & l \\ m'''_e & q & m'_e \end{bmatrix}\times$$

$$\times(-1)^{-s-l-m'''_s-m'''_e}\tilde{a}^{(es)}_{-m'''_e-m'_s} = -G_1 + G_2 \qquad (4.1)$$

Nagrinėjame pirmą narį. Remdamiesi savybe (11.11) iš [11] gausime, jog sumavimas liks pagal kintamuosius m_s, m_e, m'_e, k, ir q. Pasinaudoję Klepšo-Gordano koeficientų savybėmis, formule (28.9) iš [11], gimimo ir išnykimo operatorius surišę į tenzorinę sandaugą, prirašę $\delta(kq,kq)$, užrašytą per Klepšo- Gordano koeficientus ir prasumavę pagal q, gausime $6j$ koeficientą, kurio vertė parodyta A.Jucio ir A.Bandzaičio monografijoje [11] (29.15). Tada turėsime:

$$G_1 = \frac{\hat{N}}{(2l+1)}\sum_{k=0}^{2l}R_k(nlnl,nlnl)(l\|C^{(k)}\|l)^2 \qquad (4.2)$$

Ieškome antro nario vertės. Prirašę prie jo $\delta(sm_s, s-m_s)$, galima gimimo ir išnykimo operatorius parašyti per tenzorinę sandaugą:

$$G_2 = (2s+1)\sum_{k=0}^{2l} R_k(nlnl,nlnl)\,\frac{(l\|C^{(k)}\|l)^2}{\sqrt{2k+1}}\times$$
$$\times\left[W^{(k0)}\times W^{(k0)}\right]^{(00)} \qquad (4.3)$$

Sudėję (4.2) su (4.3) ir iš sumos pagal K išskyrę du narius, kur $K=0$ ir kur $K>0$ turėsime sluoksnio viduje, antriniame kvantavime elektrostatinės sąveikos energijos operatorių:

$$\hat{G} = \frac{e^2}{2}R_0(nlnl,nlnl)\,\hat{N}(\hat{N}-1) + \frac{e^2}{2}\sum_{k>0}^{2l} R_k(nlnl,nlnl)\times$$
$$\times(l\|C^{(k)}\|l)^2\left\{\frac{2s+1}{\sqrt{2k+1}}\left[W^{(k0)}\times W^{(k0)}\right]^{(00)} - \frac{\hat{N}}{(2l+1)}\right\} \qquad (4.4)$$

Remdamiesi antrinio kvantavimo tenzoriniame pavidale metodu, rasime elektrostatinės sąveikos energijos operatorių, kai elektronai turi įvairius kvantinius skaičius n ir l. Užrašę antriniame kvantavime elektrostatinės sąveikos energijos operatorių, pritaikome Vignerio-Ekarto teoremą; atitinkamai pakeitus gimimo ir išnykimo operatorių išsidėstymo tvarką ir išnykimo operatorių perrašius per išnykimo operatoriaus tenzorines komponentes, gauname išraišką:

$$\hat{G}(nln'l',n''l''n'''l''') = -\frac{1}{2}\sum_{\substack{m_s m_e\\ m'_e m'''_e}}\sum_{\substack{nln'l'\\ n'''l'''}}\sum_{k=0}^{2l}\sum_{q=-k}^{k}(-1)^{k-q}\,\frac{(l\|C^{(k)}\|l')(l'\|C^{(k)}\|l''')}{\sqrt{(2l+1)(2l'+1)}}\times$$
$$\times R_k(nln'l',n'''l'''l)\,a^{+(es)}_{m_e m_s}\begin{bmatrix} l' & k & l\\ m'_e & -q & m_e\end{bmatrix}\begin{bmatrix} l''' & k & l'\\ m'''_e & q & m'_e\end{bmatrix}(-1)^{-s-l'''-m'''_e-m'_s}\,\tilde{a}^{(l'''s)}_{-m'''_e-m'_s}\,+$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\substack{m_s m_\ell m_s' m_\ell' \\ m_\ell'' m_\ell'''}}\sum_{\substack{n\ell n'\ell' \\ n''\ell'' n'''\ell'''}}\sum_{k=0}^{2\ell}\sum_{q=-k}^{k}(-1)^{k-q}\frac{(\ell\|C^{(k)}\|\ell'')(\ell'\|C^{(k)}\|\ell''')}{\sqrt{(2\ell+1)(2\ell'+1)}}R_k(n\ell n'\ell', n''\ell'' n'''\ell''')\times$$

$$\times a^{+(\ell s)}_{m_\ell m_s}\begin{bmatrix}\ell'' & k & \ell \\ m_\ell'' & -q & m_\ell\end{bmatrix}(-1)^{-s-\ell''-m_s-m_\ell''}\tilde{a}^{(\ell'' s)}_{-m_\ell''-m_s}\,a^{+(\ell' s)}_{m_\ell' m_s'}\begin{bmatrix}\ell''' & k & \ell' \\ m_\ell''' & q & m_\ell'\end{bmatrix}(-1)^{-s-\ell'''-m_s'''-m_\ell'''}\tilde{a}^{(\ell''' s)}_{-m_\ell'''-m_s'} = G_{I}+G_{II} \qquad (4.5)$$

Nagrinėjame pirmą narį. Pasinaudoję formule (28.9) iš [11], Klepšo-Gordano koeficientų simetrijos savybėmis ir sąlyga, jei turime koeficientą $(\ell\|C^{(k)}\|\ell)$, tai tada $\ell+\ell'+k$ turi būti lyginis, gauname:

$$G_{I}=\sum_{k=0}^{2\ell}\sum_{\substack{n\ell n'\ell' \\ n'''}}R_k(n\ell n'\ell', n'\ell' n'''\ell)\sqrt{\frac{2s+1}{2\ell+1}}(\ell\|C^{(k)}\|\ell')^2\,W^{(00)}(\ell,\ell) \qquad (4.6)$$

kur

$$\left[a^{+(\ell s)}\times\tilde{a}^{(\ell' s)}\right]^{(ab)}=-W^{(ab)}(\ell,\ell') \qquad (4.7)$$

Nagrinėjame (4.5) antrą narį. Pasinaudoję Klepšo-Gordano koeficientų simetrijos savybėmis, iš karto galima gauti gimimo ir išnykimo operatorių tenzorinę sandaugą, kuri atrodys:

$$G_{II}=\sum_{\substack{n\ell n'\ell' n''\ell'' \\ n'''\ell'''}}\sum_{k=0}^{2\ell}R_k(n\ell n'\ell', n''\ell'' n'''\ell'')\frac{(2s+1)}{\sqrt{2k+1}}(\ell\|C^{(k)}\|\ell'')\times$$

$$\times(\ell'\|C^{(k)}\|\ell''')\left[W^{(k0)}(\ell,\ell'')*\left[W^{(k0)}(\ell',\ell''')\right]^{(00)}\right. \qquad (4.8)$$

Sudėję (4.6) su (4.8) ir išskyrę iš sumos pagal k du narius, kur $k=0$ ir $k>0$, gausime elektrostatinės sąveikos energijos operatoriaus išraišką surištame pavidale, kai elektronų skai-

čiai n ir ℓ nebūtinai turi būti lygūs:

$$\hat{G} = -\frac{1}{2}\sqrt{2s+1}\sum_{\substack{nln'l'\\ n'''}}\sum_{k=0}^{2\ell}\frac{(\ell\|C^{(k)}\|\ell')^2}{\sqrt{2\ell+1}}R_k(nln'l',n'l'n'''l)\,W^{(00)}(\ell,\ell)+$$

$$+\frac{1}{2}(2s+1)\sum_{\substack{nln'l'\\ n''l''n'''l'''}}\sum_{k=0}^{2\ell}R_k(nln'l',n''l''n'''l''')\frac{(\ell\|C^{(k)}\|\ell'')}{\sqrt{2k+1}}(\ell'\|C^{(k)}|\ell''')\times$$

$$\times\left[W^{(k0)}(\ell,\ell'')\times W^{(k0)}(\ell',\ell''')\right]^{(00)} \qquad (4.9)$$

4 skirsnyje elektrostatinės sąveikos energijos operatorius sluoksnio viduje (4.4) ir įvairioms konfiguracijoms (4.9) užrašomas antriniame kvantavime surištame pavidale. Formulėse (4.4), (4.9) esantys dvigubi tenzoriai apskaičiuojami per kilminius koeficientus [9]. Visi kiti dydžiai yra apibrėžti A.Jucio ir A. Savukyno [10]. Todėl šias išraiškas patogu naudoti tenzoriniuose skaičiavimuose.

5. CENTRINĖS SIMETRIJOS ARTUTINUMAS

Atomams, kurie turi daugiau, negu vieną elektroną, Šredingerio lygtis tiksliai neišsprendžia nei analiziniu, nei skaitmeniniu būdu, todėl, norint teoriškai gauti atomo energijos spektrą, reikia ją spręsti, naudojantis supaprastintu atomo modeliu. Pasirodo, kad eksperimentas patvirtina artutinį modelį, kuriame laikoma, jog atome išlieka elektronų individualios būsenos, o atomo

banginė funkcija susideda iš visų jo elektronų būsenų.

Aprašant elektronų būsenas atome, skaitome, kad elektronai atome juda efektyviniame centrinės simetrijos lauke, kurį sukuria branduolys ir visi likusieji elektronai. Šis modelis vadinamas centrinės simetrijos artutinumu.

Šredingerio lygtis bet kokiame centrinės simetrijos lauke $U(r)$ atrodo:

$$\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - U(r)\right]\Psi = 0 \qquad (5.1)$$

Judant elektronams centrinės simetrijos lauke, išsilaiko $\hat{L}_z$, todėl kiekvieną stacionarinę būseną galima aprašyti, užduodant kvantinius skaičius l, m_l. Banginė funkcija stacionarinėms būsenoms turės pavidalą:

$$\Psi = R(r)\,Y_{lm}(\theta,\varphi) \qquad (5.2)$$

kur $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ - vadinama sferine funkcija. Jos pavidalas pateiktas A.Jucio ir A. Savukyno [10] (formulės 4.29; 4.5; 4.20).

Radialinei funkcijos daliai $R(r)$ galioja lygybė:

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}R + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - U(r)\right]R = 0 \qquad (5.3)$$

Šios lygties efektyvinis potencialas yra:

$$U_l(r) = U(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} \qquad (5.4)$$

Ji priklauso nuo kvantinio skaičiaus l ir nepriklauso nuo kvantinio skaičiaus m_l. Kitaip tariant, energijos lygmenys yra pagal m_l išsigimę.

Centrinio lauko artutinume pilna atomo energija priklauso nuo elektronų konfiguracijos, t.y. nuo kiekvieno elektrono kvantinių

skaičių n ir ℓ, ir nepriklauso nuo pilno orbitinio momento bei pilno sukininio momento S.

Elektrostatinės sąveikos išraiškos, gautos 4 skirsnyje, tiek sluoksnio viduje, tiek ir bendresnėje formulėje, neturi centrinės simetrijos, todėl tolimesnė užduotis - iš (4.4) ir (4.9) išskirti narius, kurie turėtų centrinę simetriją.

Pirmiausia iš (4.4) išskiriame dalį, kuri nepriklausys nuo L ir S. Tuo tikslu elektrostatinės sąveikos energijos operatorių sluoksnio viduje užrašome pavidale:

$$\hat{G}_k = -\frac{1}{2}\sum_{SL}(2L+1)^{\frac{1}{2}}(2S+1)^{\frac{1}{2}}\left[\left[a^{+(\ell s)}\times a^{+(\ell s)}\right]^{(LS)}\times\left[\tilde{a}^{(\ell s)}\times\tilde{a}^{(\ell s)}\right]^{(LS)}\right]^{(00)}\times$$

$$\times\left[n\ell s n\ell s LS\|F^{(kk00\,00)}\|n\ell s n\ell s LS\right] \qquad (5.5)$$

Jei matricinį elementą pravidurkinsime pagal termus, pasinaudoję (4.5) iš [10] bei (29.15) iš [11] ir prisiminę [5] priedo V formulės (35a), (35b), tai likusią išraiškos dalį galima prasumuoti, išskleidus tenzorinę sandaugą, sukilojus atitinkamai gimimo ir išnykimo operatorius, remdamiesi [11], (28.9), [5], (35b) ir, prisiminus (3.5). Tada formulės (4.4) dalis, turinti centrinę simetriją, atrodys:

$$\hat{\bar{G}} = \frac{1}{2}\bar{A}\left[\hat{N}^2 - \hat{N}\right] \qquad (5.6)$$

kur

$$\bar{A} = \frac{2(\ell\|C^{(k)}\|\ell)^2}{(4\ell+1)}R_k(n\ell n\ell, n\ell n\ell)\left[\delta(k,0) - \frac{1}{2(2\ell+1)}\right] \qquad (5.7)$$

Dabar ieškosime elektrostatinės sąveikos energijos operatorių, sąveikaujant dalelė-dalelė, skylutė-skylutė (t.y., kai gimimo

ir išnykimo operatorių tvarka sekanti $a\,a\,a^{+}a^{+}$), suvidurkinant pagal visus termus sluoksnio viduje. Galutinis pavidalas tokio operatoriaus:

$$\hat{\bar{G}}_k = \left[\tfrac{1}{2}\hat{N}_{sk}(\hat{N}_{sk}-1)-(4l+1)\hat{N}_{sk}+(2l+1)(4l+1)\right]\bar{A}_k \qquad (5.8)$$

Norint jį gauti, formulę (5.5) , pasinaudoję (3.10) , perrašome:

$$-\frac{1}{2}\sum_{LS}(2L+1)^{\frac{1}{2}}(2S+1)^{\frac{1}{2}}\left[\left[a^{+(ls)}\times a^{+(ls)}\right]^{(LS)}\times\left[\tilde{a}^{(ls)}\times\tilde{a}^{(ls)}\right]^{(LS)}\right]^{(00)}\bar{A}_k =$$

$$= -\frac{1}{2}\sum_{LS}(2L+1)^{\frac{1}{2}}(2S+1)^{\frac{1}{2}}\left[\left[\tilde{a}^{(ls)}\times\tilde{a}^{(ls)}\right]^{(LS)}\times\left[a^{+(ls)}\times a^{+(ls)}\right]^{(LS)}\right]^{(00)}\bar{A}_k -$$

$$-\frac{1}{2}\sum_{LS}\frac{(2L+1)(2S+1)}{\sqrt{(2l+1)(2s+1)}}\left(1+(-1)^{L+S}\right)\left(W^{(00)}+\left[\tilde{a}^{(ls)}\times a^{+(ls)}\right]^{(00)}\bar{A}_k\right. \qquad (5.9)$$

Analizuojame formulės (5.9) pirmą narį. Jo vertę gausime prisiminę (3.8) ir prasumuodami, kaip ir formulėje (5.5) , pagal L ir S .

Ieškome (5.9) antrojo nario išraiškos. Tuo tikslu išskleidžiame tenzorinę sandaugą, atitinkamai perstatome gimimo ir išnykimo operatorius. Turėsime du narius, kur pirmame nebus gimimo ir išnykimo operatorių, o antrame - bus viena jų pora. Pirmame naryje prirašome $\delta(sm_s, sm_s)\,\delta(lm_l, lm_l)$, prasumuojame pagal m_s m_l ir tokiu pat būdu, kaip anksčiau, susumuojame pagal L , S .

Antrame naryje, remdamiesi Klepšo-Gordano koeficientų simetrijos savybėmis, surišame gimimo ir išnykimo operatorius į tenzorinę sandau-

gą ir prasumuojame pagal L, S.

Suradę trečio nario sumą pagal L, S ir sudėję visų narių vertes, galutinai gausime (5.8)

Dabar rasime elektrostatinės sąveikos energijos operatorių, sąveikaujant skylutė-dalelė, skylutė-dalelė (t.y., kai gimimo ir išnykimo peratorių tvarka sekanti, $a^+a\,a^+a$), suvidurkinant pagal visus termus sluoksnio viduje. Tuo tikslu (5.5) pertvarkome pasinaudoję (3.11) .Turėsime:

$$\hat{\bar{G}}_k = -\frac{1}{2}\sum_{SL}(2L+1)^{\frac{1}{2}}(2S+1)^{\frac{1}{2}}\left[\left[a^{+(ls)}\times a^{+(ls)}\right]^{(LS)}\times\left[\tilde{a}^{(ls)}\times\tilde{a}^{(ls)}\right]^{(LS)}\right]^{(00)}\bar{A}_k =$$

$$=\sum_{LSL'S'}(2L+1)(2S+1)\sqrt{(2L'+1)(2S'+1)}(-1)^{L'+S'}\left[W^{(LS)}\times W^{(L'S')}\right]^{(00)}\times$$

$$\times\bar{A}_k\begin{Bmatrix} l & l & L \\ l & l & L' \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} s & s & S \\ s & s & S' \end{Bmatrix} + \sum_{LS}\frac{(2L+1)(2S+1)}{\sqrt{(2s+1)(2l+1)}}W^{(00)}\bar{A}_k \qquad (5.10)$$

Analizuojame pirmą narį. Atskleidę tenzorinę sandaugą ir pasinaudoję [11] formule (11.18) ; išskleidę atitinkamai gimimo ir išnykimo operatorius, surišę juos į tenzorinę sandaugą ir prisiminę (3.5) , gausime šio nario išraišką.

Skaičiuojame antrą narį.Pasinaudoję [5] priedo V formule (3.5b) prasumuojame $6j$ koeficientus ir,prisiminę (3.5) , turėsime antro nario vertę. Sudėję šiuos du narius, galutinai gausime:

$$\hat{\bar{G}}_k = \frac{1}{2}\left(\hat{N}^2 - \hat{N}\right)\bar{A}_k \qquad (5.11)$$

Suvidurkinsime tarp dviejų sluoksnių elektrostatinės sąveikos energijos operatorių. Skaitysime, kad vieno sluoksnio kvantiniai skaičiai yra $n_1 l_1$, o kito - $n_2 l_2$. Remdamiesi (5.5) ,elektrostatinės sąveikos energijos operatorių užrašome:

$$\hat{G}_k = -\frac{1}{2}\sum_{SL}(2L+1)^{\frac{1}{2}}(2S+1)^{\frac{1}{2}}\left[\left[a^{+(l_1s)}\times a^{+(l_2s)}\right]^{(LS)}\times\left[\tilde{a}^{(l_1s)}\times\tilde{a}^{(l_2s)}\right]^{(LS)}\right]^{(00)}\times$$

$$\times\left[n_1 l_1 s\, n_2 l_2 s\, L\, S \| F^{(\kappa\kappa 0 0 0 0)} \| n_1 l_1 s\, n_2 l_2 s\, L\, S\right] -$$

$$-\frac{1}{2}\sum_{LS}(2L+1)^{\frac{1}{2}}(2S+1)^{\frac{1}{2}}\left[\left[a^{+(l_1 s)}\times a^{+(l_2 s)}\right]^{(LS)}\times\left[\tilde{a}^{(l_1 s)}\times\tilde{a}^{(l_2 s)}\right]^{(LS)}\right]^{(00)}\times$$

$$\times\left[n_2 l_2 s\, n_1 l_1 s\, L\, S \| F^{(\kappa\kappa 0 0 0 0)} \| n_1 l_1 s\, n_2 l_2 s\, L\, S\right] -$$

$$-\frac{1}{2}\sum_{LS}(2L+1)^{\frac{1}{2}}(2S+1)^{\frac{1}{2}}\left[\left[a^{+(l_1 s)}\times a^{+(l_2 s)}\right]^{(LS)}\times\left[\tilde{a}^{(l_2 s)}\times\tilde{a}^{(l_1 s)}\right]^{(LS)}\right]^{(00)}\times$$

$$\times\left[n_1 l_1 s\, n_2 l_2 s\, L\, S \| F^{(\kappa\kappa 0 0 0 0)} \| n_2 l_2 s\, n_1 l_1 s\, L\, S\right] -$$

$$-\frac{1}{2}\sum_{LS}(2L+1)^{\frac{1}{2}}(2S+1)^{\frac{1}{2}}\left[\left[a^{+(l_2 s)}\times a^{+(l_1 s)}\right]^{(LS)}\times\left[\tilde{a}^{(l_2 s)}\times\tilde{a}^{(l_1 s)}\right]^{(LS)}\right]^{(00)}\times$$

$$\times\left[n_2 l_2 s\, n_1 l_1 s\, L\, S \| F^{(\kappa\kappa 0 0 0 0)} \| n_2 l_2 s\, n_1 l_1 s\, L\, S\right] \tag{5.12}$$

Pasinaudoję [10] formule (4.5), galima gauti kiekvieno matricinio elemento išraišką. Suvidurkinę kiekvieną jų atskirai ir prisiminę (3.13), gauname:

$$\hat{G}_\kappa = -\frac{1}{2}\sum_{SL}(2L+1)^{\frac{1}{2}}(2S+1)^{\frac{1}{2}}\left[\left[a^{+(l_1 s)}\times a^{+(l_2 s)}\right]^{(LS)}\times\left[\tilde{a}^{(l_1 s)}\times\tilde{a}^{(l_2 s)}\right]^{(LS)}\right]^{(00)}\times$$

$$\times\left\{2\,\frac{(l_1\|C^{(\kappa)}\|l_1)(l_2\|C^{(\kappa)}\|l_2)}{(2l_1+1)(2l_2+1)}F_\kappa(n_1 l_1, n_2 l_2)\,\delta(\kappa,0)+\frac{(l_2\|C^{(\kappa)}\|l_1)^2}{(2l_1+1)(2l_2+1)}G_\kappa(n_1 l_1, n_2 l_2)\right\} \tag{5.13}$$

Formulėje (5.13) prasumuojame pagal L, S. Tuo tikslu išskleidžiame tenzorinę sandaugą, atitinkamai pertvarkome gimimo ir išnykimo operatorių išsidėstymo tvarką. Narys, kuriame bus po vieną

gimimo ir išnykimo operatorių, bus lygus nuliui, nes jis turės $\delta(n_1 l_1, n_2 l_2)$. Pasinaudoję Klepšo -Gordano koeficientų simetrijos savybėmis ir atlikę sumavimą pagal L, S bei pasinaudoję [11] formule (15.20) , turime:

$$\hat{\overline{F}}_0 = f_0(l_1 l_2) F_0(n_1 l_1, n_2 l_2) + g_0(l_1 l_2) G_0(n_1 l_1, n_2 l_2) \delta(l_1, l_2) \qquad (5.14)$$

$$\hat{\overline{G}}_{k\neq 0} = g_k(l_1 l_2)\, G_k(n_1 l_1, n_2 l_2) \qquad (5.15)$$

$$f_0 = \hat{N}(l_1)\hat{N}(l_2) \qquad (5.16)$$

$$g_0 = \frac{\hat{N}(l_1)\hat{N}(l_2)}{2(2l_1+1)} \qquad (5.17)$$

$$g_k = \frac{\hat{N}(l_1)\hat{N}(l_2)}{2(2l_1+1)(2l_2+1)} (l_2 \| C^{(k)} \| l_1)^2 \qquad (5.18)$$

Išskiriame iš (4.4) , (4.9) narius, kurie nepriklausytų nuo L ,o skirtingiems S turėtų skirtingus pavidalus. Šiuo atveju visus termus suskirstome į grupes ir kiekvienai iš jų skirtingomis S reikšmėmis bus savas elektrostatinės sąveikos operatoriaus matricinis elementas.

Rasime elektrostatinės sąveikos energijos operatorių sluoksnio viduje, kai matricinis elementas suvidurkinamas atskirai pagal singletus ir tripletus, sąveikąujant skylutė-skylutė, dalelė-dalelė. perrašome sekančiai:

$$\hat{G}_k = -\frac{1}{2}\sum_{SL} (2L+1)^{\frac{1}{2}} (2S+1)^{\frac{1}{2}} \Big[\big[a^{+(ls)} \times a^{+(ls)} \big]^{(LS)} \times \big[\tilde{a}^{(ls)} \times \tilde{a}^{(ls)} \big]^{(LS)} \Big]^{(00)} \times$$

$$\times [nlsnlsLS \| F^{(kk000)} \| nlsnlsLS] =$$

$$= -\frac{1}{2}\sum_{L}(2L+1)^{\frac{1}{2}}\left[\left[a^{+(ls)}\times a^{+(ls)}\right]^{(L0)}\times\left[\tilde{a}^{(ls)}\times\tilde{a}^{(ls)}\right]^{(L0)}\right]^{(00)}\times$$

$$\times\left[nls\,nls\,L0\|F^{(kk0\,000)}\|nls\,nls\,L0\right]-$$

$$-\frac{1}{2}\sum_{L}(2L+1)^{\frac{1}{2}}\sqrt{3}\left[\left[a^{+(ls)}\times a^{+(ls)}\right]^{(L1)}\times\left[\tilde{a}^{(ls)}\times\tilde{a}^{(ls)}\right]^{(L1)}\right]^{(00)}\times$$

$$\times\left[nls\,nls\,L1\|F^{(kk0\,000)}\|nls\,nls\,L1\right] \qquad (5.19)$$

Suvidurkinus matricinius elementus pagal L, išraišką (5.19) galima prasumuoti. Nagrinėjame pirmą narį. Išskleidę tenzorinę sandaugą, atitinkamai perstatę gimimo ir išnykimo operatorius, remdamiesi (15.20) iš [11] ir sąryšiu

$$T^{k_1}_{q_1}U^{k_2}_{q_2}=\sum_{kq}\left[T^{k_1}\times U^{k_2}\right]^{k}_{q}\begin{bmatrix}k_1 & k_2 & k\\ q_1 & q_2 & q\end{bmatrix} \qquad (5.20)$$

opertorius surišame į tenzorinę sandaugą. Prisiminę (3.12), gausime:

$$\sum_{L}(2L+1)^{\frac{1}{2}}\left[\left[a^{+(ls)}\times a^{+(ls)}\right]^{(L0)}\times\left[\tilde{a}^{(ls)}\times\tilde{a}^{(ls)}\right]^{(L0)}\right]^{(00)}=-\frac{\hat{N}}{2}-\frac{\hat{N}^2}{4}+\left(S^{(2)}\cdot S^{(1)}\right) \qquad (5.21)$$

Sumuojame pagal L antrą narį. Tuo tikslu išskleidžiame tenzorinę sandaugą. Pasinaudoję formule (11.18) iš [11] ir atitinkamai perstačius gimimo ir išnykimo operatorius, gausime du narius, kur pirmame bus viena pora gimimo ir išnykimo operatorių, o antrame - dvi poros. Analizuojame pirmą narį. Pasinaudojus Klepšo-Gordano koeficientų simetrijos savybėmis, juos taip perstatome, kad, remiantis formule iš [11], prasumuojame pagal m_s', M_s ir pasinaudoję (15.20) iš [11] surišame gimimo ir išnykimo operatorius į tenzorinę sandaugą.

Skaičiuojame antrą narį. Pasinaudojus Klepšo-Gordano koeficientų simetrijos savybėmis, formulėmis (28.9), (15.20) iš [11] ir prisiminę (3.12), gausime formulei (5.19) antro nario vertę. Sudėję

šias abi išraiškas, turėsime:

$$\hat{\bar{G}}_k = \frac{1}{2}\Big\{\Big[\frac{\hat{N}^2}{4}+\frac{\hat{N}}{2}-(S^{(1)}\cdot S^{(2)})\Big]\frac{(l\|C^{(k)}\|l)^2}{2(2l+1)(2l+1)}R_k(nlnl,nlnl)\times$$

$$\times\big[\delta(k,0)(2l+1)+1\big]+\Big[\frac{3}{2}\hat{N}^2-\frac{3}{2}\hat{N}+(S^{(1)}\cdot S^{(2)})\Big]\times$$

$$\times\frac{(l\|C^{(k)}\|l)^2}{2l(2l+1)}R_k(nlnl,nlnl)\big[\delta(k,0)(2l+1)-1\big] \qquad (5.22)$$

Gavome elektrostatinės sąveikos energijos operatorių sluoksnio viduje, kai matricinis elementas suvidurkinamas atskirai pagal singletus ir tripletus, sąveikaujant skylutė- skylutė, dalelė-dalelė.

Tarp dviejų ekvivalenčių sluoksnių elektrostatinės sąveikos energijos operatorių suvidurkiname atskirai pagal singletus ir tripletus. Skaitysime, kad vieno sluoksnio kvantiniai skaičiai yra $n_1 l_1$, o kito - $n_2 l_2$. Remiantis (5.19) ir (3.13), galima užrašyti:

$$\hat{\bar{G}}_k = -\frac{1}{2}\sum_L (2L+1)^{\frac{1}{2}}\Big[\big[a^{+(l_1 s)}\times a^{+(l_2 s)}\big]^{(L0)}\times\big[\tilde{a}^{(l_1 s)}\times\tilde{a}^{(l_2 s)}\big]^{(L0)}\Big]^{(00)}\times$$

$$\times\Big\{\big[n_1 l_1 s n_2 l_2 s L0\|F^{(kk000)}\|n_1 l_1 s n_2 l_2 s L0\big]-$$

$$-(-1)^{-L+l_1+l_2}\big[n_2 l_2 s n_1 l_1 s L0\|F^{(kk000)}\|n_1 l_1 s n_2 l_2 s L0\big]-$$

$$-(-1)^{-L+l_1+l_2}\big[n_1 l_1 s n_2 l_2 s L0\|F^{(kk000)}\|n_2 l_2 s n_1 l_1 s L0\big]+$$

$$+\big[n_2 l_2 s n_1 l_1 s L0\|F^{(kk000)}\|n_2 l_2 s n_1 l_1 s L0\big]\Big\}-$$

$$-\frac{1}{2}\sum_L (2L+1)^{\frac{1}{2}}\sqrt{3}\Big[\big[a^{+(l_1 s)}\times a^{+(l_2 s)}\big]^{(L1)}\times\big[\tilde{a}^{(l_1 s)}\times\tilde{a}^{(l_2 s)}\big]^{(L1)}\Big]^{(00)}\times$$

$$\times\{[n_1 l_1 s\, n_2 l_2 s\, L1 \| F^{(kk00\,00)} \| n_1 l_1 s\, n_2 l_2 s\, L1] -$$

$$-(-1)^{-L-1+l_1+l_2}[n_2 l_2 s\, n_1 l_1 s\, L1 \| F^{(kk00\,00)} \| n_1 l_1 s\, n_2 l_2 s\, L1] -$$

$$-(-1)^{-L-1+l_1+l_2}[n_1 l_1 s\, n_2 l_2 s\, L1 \| F^{(kk00\,00)} \| n_2 l_2 s\, n_1 l_1 s\, L1] +$$

$$+[n_2 l_2 s\, n_1 l_1 s\, L1 \| F^{(kk00\,00)} \| n_2 l_2 s\, n_1 l_1 s\, L1]\} \qquad (5.23)$$

Suvidurkinus matricinius elementus, galima prasumuoti pagal L. Sumuojame pirmą narį. Išskleidus tenzorinę sandaugą, pasinaudojus formule (11.18) iš [11], atitinkamai perstačius gimimo ir išnykimo operatorius vietomis, vėl operatorius surišame į tenzorinį pavidalą. Pasinaudojus sąlygomis, jog arba $n_1 \neq n_2$ arba $l_1 \neq l_2$ ir prisiminus (3.6), turėsime:

$$\sum_L (2L+1)^{\frac{1}{2}} \left[\left[a^{+(l_1 s)} \times a^{+(l_2 s)}\right]^{(L0)} \times \left[\tilde{a}^{(l_1 s)} \times \tilde{a}^{(l_2 s)}\right]^{(L0)}\right]^{(00)} =$$

$$= -\frac{\hat{N}(l_1)\hat{N}(l_2)}{4} + \sum_{M_s} (-1)^{1-M_s} S^{(1)}_{M_s}(l_1)\, S^{(1)}_{\bar{M}_s}(l_2) \qquad (5.24),$$

kur $S^{(1)}_{M_s}(l_1)$ - sluoksnio $n_1 l_1$ viduje operatoriaus komponentės išraiška antriniame kvantavime. $S^{(1)}_{\bar{M}_s}(l_1)$ - sluoksnio $n_2 l_2$ viduje operatoriaus komponentės $S^{(1)}_{q}$ išraiška antriniame kvantavime.

Nagrinėjame antrą narį. Išskleidus tenzorinę sandaugą, pasinaudojus formule (11.18) iš [5], atitinkamai perstačius gimimo ir išnykimo operatprius vietomis ir pasinaudojus sąlyga $\delta(n_1 l_1, n_2 l_2) = 0$, gausime tik vieną narį. Remdamiesi formule (28.9) iš [11] ir priedo (35b) iš [5], surišame gimimo ir išnykimo operatorius į tenzorinę sandaugą. Prisiminus (29.18) iš [11], rasime antros sumos vertę:

$$\sum_L (2L+1)^{\frac{1}{2}} \sqrt{3} \left[\left[a^{+(l_1 s)} \times a^{+(l_2 s)}\right]^{(L1)} \times \left[\tilde{a}^{(l_1 s)} \times \tilde{a}^{(l_2 s)}\right]^{(L1)}\right]^{(00)} =$$

$$= -\frac{3}{4}\hat{N}(l_1)\hat{N}(l_2) - \sum_{M_s} (-1)^{1-M_s} S^{(1)}_{M_s}(l_1)\, S^{(1)}_{\bar{M}_s}(l_2) \qquad (5.25)$$

Užrašome galutinę elektrostatinės sąveikos energijos operatoriaus išraišką tarp ekvivalenčių sluoksnių, kai suvidurkinama atskirai pagal tripletus ir singletus:

$$\hat{\bar{G}}_{k\neq 0} = g_k(l_1 l_2)\, G_k(n_1 l_1, n_2 l_2) \qquad (5.26)$$

$$\hat{\bar{F}}_0 = f_0(l_1 l_2)\, \hat{F}_0(n_1 l_1 n_2 l_2) + g_0(l_1 l_2)\, \hat{G}_0(n_1 l_1 n_2 l_2)\, \delta(l_1, l_2) \qquad (5.27)$$

$$g_k(l_1 l_2) = \frac{(l_2 \| C^{(k)} \| l_1)^2}{(2l_1+1)(2l_2+1)} \left[2\left(S^{(k)}(l_1) \cdot S^{(k)}(l_2) \right) + \frac{1}{2} \hat{N}(l_1) \hat{N}(l_2) \right] \qquad (5.28)$$

$$g_0(l_1 l_2) = \left[2\left(S^{(k)}(l_1) \cdot S^{(k)}(l_2) \right) + \frac{1}{2} \hat{N}(l_1) \hat{N}(l_2) \right] \frac{1}{2l_1+1} \qquad (5.30)$$

$$f_0(l_1 l_2) = \frac{1}{2} \hat{N}(l_1) \hat{N}(l_2) \qquad (5.29)$$

Šiame skirsnyje gavome elektrostatinės sąveikos energijos operatoriaus dalį H_{av}, kuri turi centrinę simetriją. Visos sistemos hamiltonijaną galima užrašyti:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{av} + \hat{V} - \hat{H}_{av} \qquad (5.31)$$

kur

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \nabla_i^2 - Z e^2 \sum_i \frac{1}{r_i} \qquad (5.32)$$

$\hat{V}$ - pilnas tarp elektronų elektrostatinės sąveikos energijos operatorius.

Dabar Šredingerio lygtį galima spręsti, naudojant perturbacijų teoriją ir hamiltonijano dalį $\hat{H}_c = \hat{H}_0 + \hat{H}_{av}$ laikyti neperturbuotu hamiltonijanu, o $\hat{V}' = \hat{V} - \hat{H}_{av}$ - perturbacijos nariu.

6. EFEKTYVINIS APRAŠYMO ATVEJIS

Turime Šredingerio lygtį

$$\hat{H}_c |\alpha\rangle = E_c^{\alpha} |\alpha\rangle \qquad (6.1)$$

$\hat{H}_c$ - apibrėžtas 5 skirsnyje. Šios lygties tikrinės funkcijos yra ortogonalios ir tenkina sąryšį

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \delta(\alpha,\beta) \qquad (6.2)$$

Hilberto erdvė sudaryta iš funkcijų Ψ_c^a, atitinkančių tą pačią tikrinę vertę E_c^a, vadinama modeline erdve. Likusių banginių funkcijų Ψ_c poerdvį vadiname ortogonaliu.

Operatorius, kuris tikslios Šredingerio lygties tikrines funkcijas projektuoja į modelinę erdvę

$$\Psi_c^a = \hat{P}\Psi^a \qquad (6.3)$$

turi pavidalą:

$$\hat{P} = \sum_{\alpha\in P} |\alpha\rangle\langle\alpha| \qquad (6.4)$$

Operatorius, projektuojantis bangines funkcijas į ortogonalę erdvę, atrodys:

$$\hat{Q} = \sum_{\beta\notin P} |\beta\rangle\langle\beta| \qquad (6.5)$$

Tarp (6.4) ir (6.5) yra sąryšis

$$\hat{P} + \hat{Q} = 1 \qquad (6.6)$$

Operatoriui $\hat{P}$ atvirkštinis operatorius $\hat{\Omega}$, veikia į funkcijas taip:

$$\Psi^a = \hat{\Omega}\,\Psi_c^a \qquad (6.7)$$

Tikslią Šredingerio lygtį

$$\hat{H}\Psi^a = E^a\Psi^a \qquad (6.8)$$

perrašome per projektinius operatorius. Tuo tikslu, pasinaudojus (6.7), formulę (6.8) užrašome:

$$\hat{H}\hat{\Omega}\Psi_c^a = E^a\Psi^a \qquad (6.9)$$

Paveikę (6.9) abi puses iš kairės operatoriumi $\hat{P}$ ir prisiminę (6.3), turėsime užrašytą Šredingerio lygtį per efektyvinį hamiltonijaną:

$$\hat{H}_{eff}\Psi_c^a = E^a\Psi_c^a \qquad (6.10)$$

kur $H_{eff} = \hat{P}\hat{H}\hat{\Omega}$ (6.11)

Efektyvinio hamiltonijano išraišką galima parašyti sekančiai

$$H_{eff} = \hat{P}\hat{H}_c\hat{P} + \hat{P}\hat{V}'\hat{\Omega} \qquad (6.12)$$

kur $\hat{H}_c$ ir $\hat{V}'$ apibrėžti 5 skirsnyje.

Efektyvinio aprašymo atveju sistemos energija:

$$E = \langle\Psi_c|\hat{H}_{eff}|\Psi_c\rangle \qquad (6.13)$$

Išdėstę $\hat{H}_{eff}$ mažumo laipsniais $\hat{H}_{eff} = \hat{H}^{(1)} + \hat{H}^{(2)} + \dots$, Šredingerio lygtį (6.10) galima spręsti, taikant perturbacijų teoriją. Pirmos ir antros eilės perturbacijų nariai turi pavidalą:

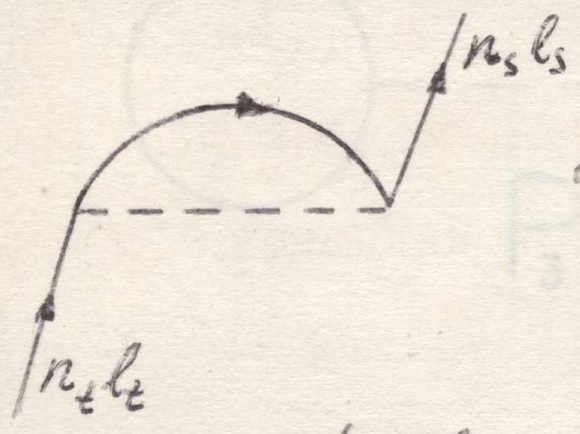
$$\hat{H}^{(1)} = \hat{P}(\hat{H}_c + \hat{V}')\hat{P} \qquad (6.14)$$

$$\hat{H}^{(2)} = \hat{P}\hat{V}'\hat{\Omega}^{(1)} \qquad (6.15)$$

$$[\hat{\Omega}^{(1)}, \hat{H}_c] = \hat{Q}\hat{V}\hat{P} \qquad (6.16)$$

Perturbacijų teorijoje, kuri naudojama tikslesnėms atomo termų energijų vertėms gauti, plačiai vartojamos Feimano diagramos. Vandeniliškų funkcijų bazėje, pirmame artutinume ateis diagramos P_1, P_2, P_3, P_4, P_5, kurios pateiktos 1 pav. 2 pav. pateiktos diagramos, ateinančios antrame perturbacijų artutinume. Pasirenkant ne vandeniliškas funkcijas, o hartri-fokiškas, diagramų skaičius sumažės.

Kaip parodyta A. Bolotino ir bend. darbe [1], Feimano diagramos topologiškai ekvivalenčios momentinėms diagramoms. Ryšium su tuo, galima kiekvienai Feimano diagramai surasti efektyvinį operatorių neredukuotiniame tenzoriniame pavidale. Paanalizuosime keletą pavyzdžių, kur $\hat{A}_c \equiv \hat{A}_0$; $\hat{V}' \equiv \hat{V}$. Tam tikslui diagramai P_4, pasinaudojus Goldstono taisyklėmis, gauname analizinę išraišką:

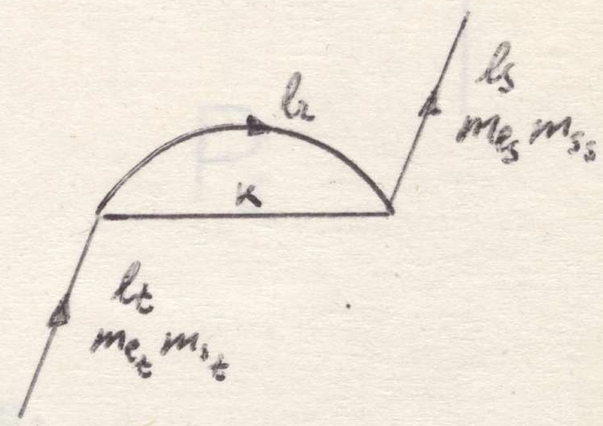


$$\sim \sum_{\substack{n_2 l_2 m_{l_2} m_{s_2} \\ m_{l_t} m_{s_t} m_{l_s} m_{s_s}}} \hat{a}^+_{n_s l_s m_{l_s} m_{s_s}} \hat{a}_{n_t l_t m_{l_t} m_{s_t}} \times$$

$$\times (n_2 l_2 s m_{l_2} m_{s_2}, n_s l_s s m_{l_s} m_{s_s} | \tfrac{1}{r_{12}} | n_t l_t s m_{l_t} m_{s_t}, n_2 l_2 s m_{l_2} m_{s_2}) =$$

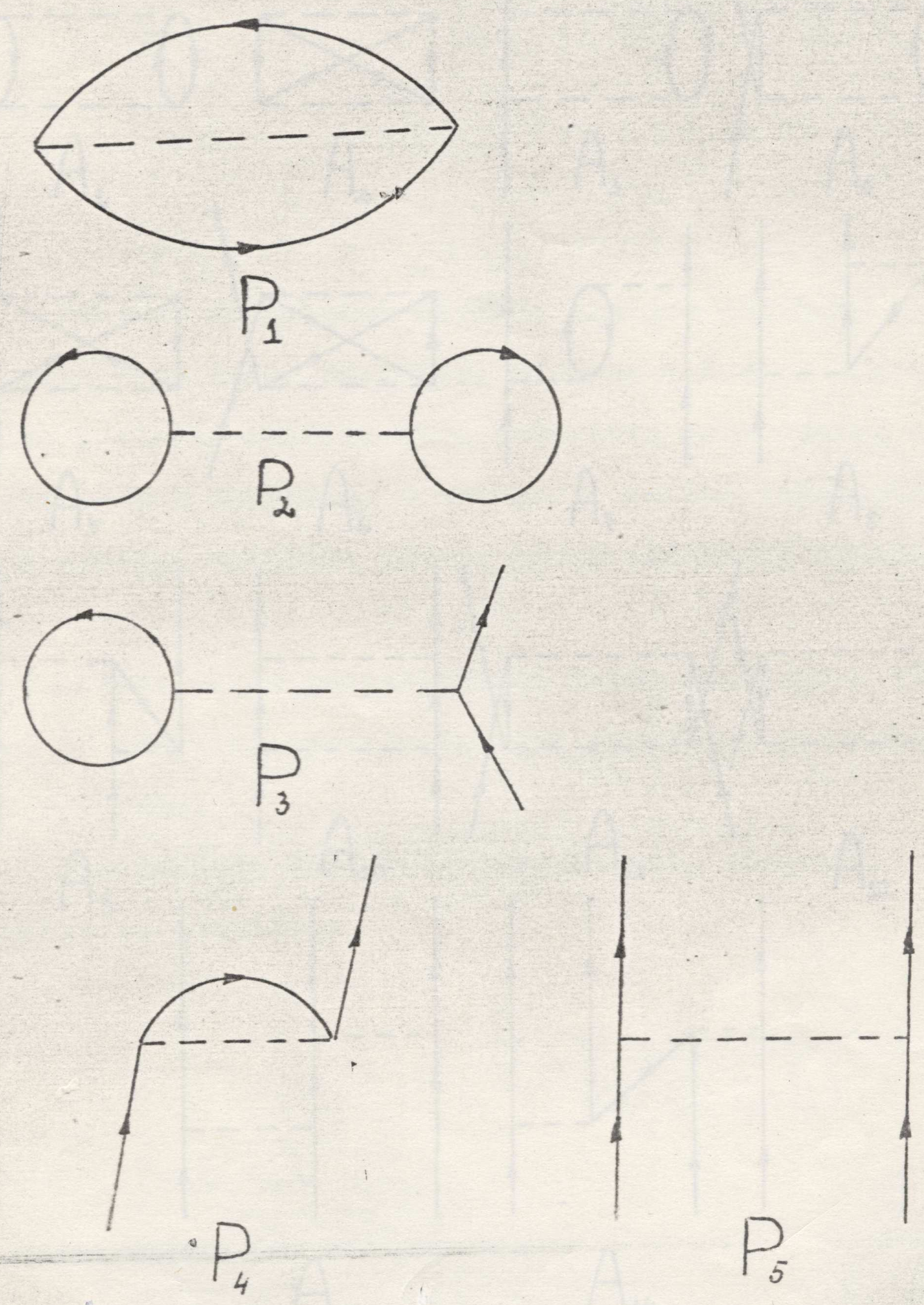
$$= \sum_{\substack{n_2 l_2 m_{l_t} m_{s_t} \\ m_{l_s} m_{s_s}}} \sum_{\varkappa} \hat{a}^+_{n_s l_s m_{l_s} m_{s_s}} \hat{a}_{n_t l_t m_{l_t} m_{s_t}} (l_2 \| C^{(\varkappa)} \| l_t)(l_s \| C^{(\varkappa)} \| l_2) \times$$

$$\times R_\varkappa (n_2 l_2 n_t l_t, n_s l_s n_2 l_2)$$

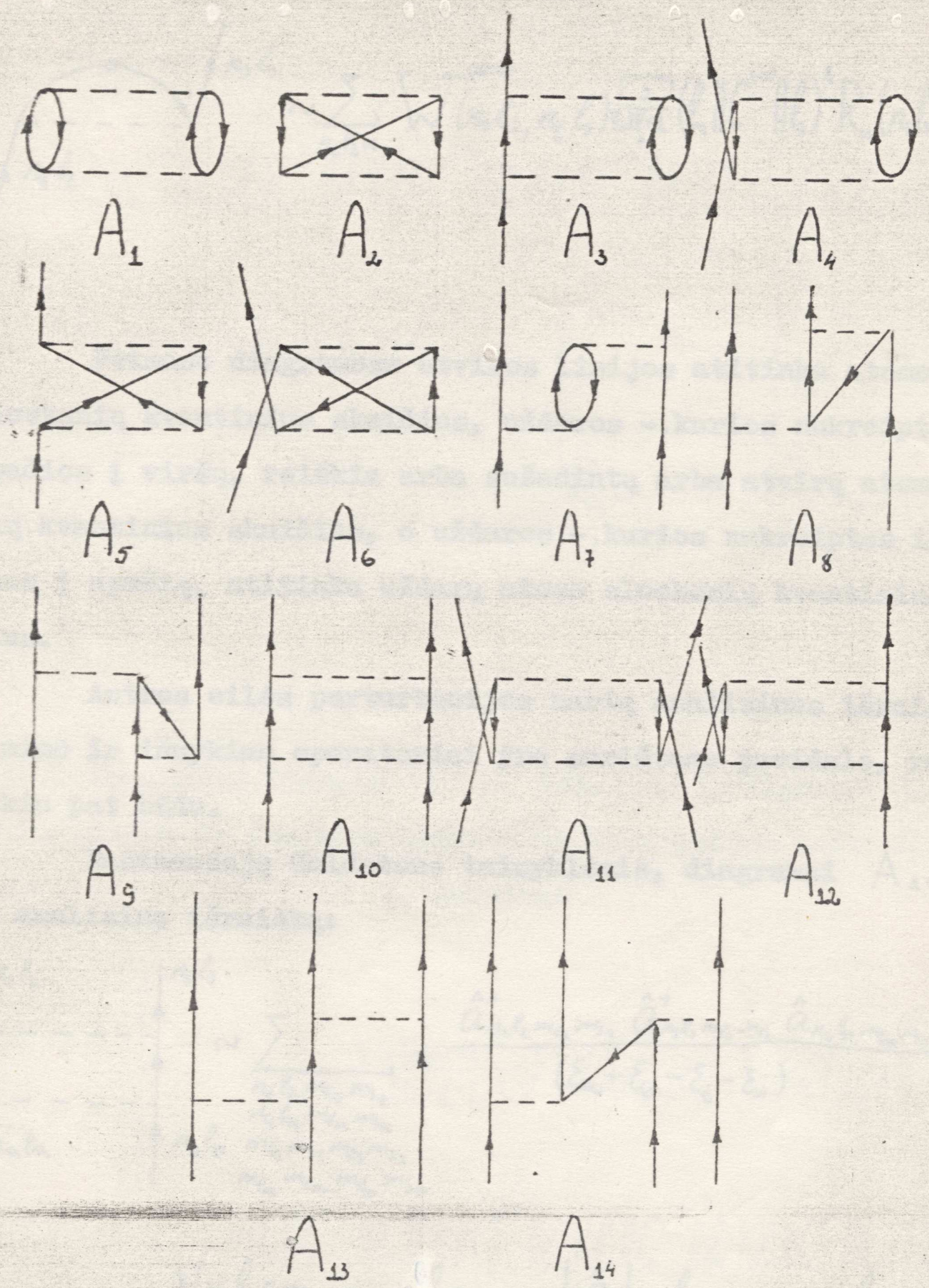


(6.17)

Pasinaudojus formule (5.9) (žt. [10]), Vignerio-Ekarto teorema, Klepšo-Gordano koeficientų savybėmis, remiantis (28.9) (žt. [11]) ir prisiminus (3.4), surišame gimimo ir išnyki-

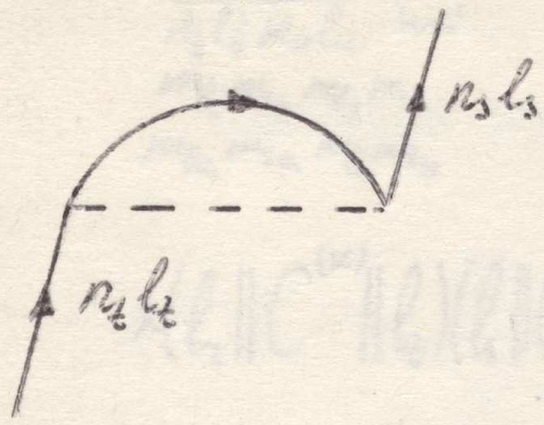


pav. Pirmos eilės diagramos.



2 pav. Antros eilės diagramos.

mo operatorius į tenzorinę sandaugą.

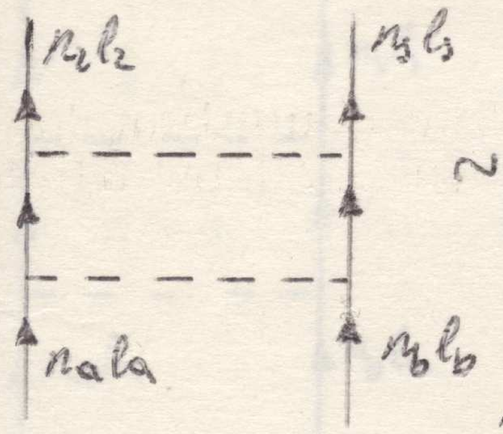


$$\sim \sum_{n_2 l_2 k} W^{(00)}(n_s l_s, n_t l_s) \sqrt{\frac{2}{2l_s+1}} (l_2 \| C^{(k)} \| l_s)^2 R_k(n_s l_s n_t l_s, n_s l_s n_2 l_2) \tag{6.18}$$

Feimano diagramose atviros linijos atitinka atomo atvirų sluoksnių kvantinius skaičius, uždaros -, kurios nukreiptos iš apačios į viršų, reiškia arba sužadintų arba atvirų atomo sluoksnių kvantinius skaičius, o uždaros -, kurios nukreiptos iš viršaus į apačią, atitinka uždarų atomo sluoksnių kvantinius skaičius.

Antros eilės perturbacijos narių analizines išraiškas, kai gimimo ir išnykimo oparatoriai yra surištame pavidale, randame tokiu pat būdu.

Pasinaudoję Goldstono taisyklėmis, diagramai A_{10} turėsime analizinę išraišką:



$$\sim \sum_{\substack{n_t l_t m_{l_t} m_{s_t} \\ n_u l_u m_{l_u} m_{s_u} \\ m_{l_2} m_{s_2} m_{l_3} m_{s_3} \\ m_{l_a} m_{s_a} m_{l_b} m_{s_b}}} \frac{\hat{a}^+_{n_2 l_2 m_{l_2} m_{s_2}} \hat{a}^+_{n_3 l_3 m_{l_3} m_{s_3}} \hat{a}_{n_b l_b m_{l_b} m_{s_b}} \hat{a}_{n_a l_a m_{l_a} m_{s_a}}}{(\varepsilon_a + \varepsilon_b - \varepsilon_t - \varepsilon_u)} \times$$

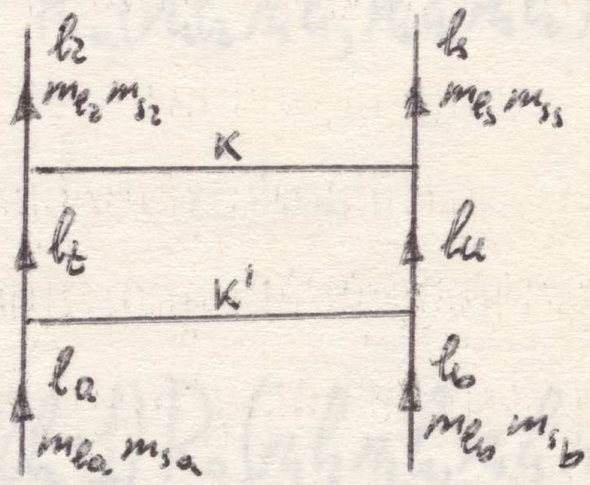
$$\times (n_2 l_2 s m_{l_2} m_{s_2}, n_3 l_3 s m_{l_3} m_{s_3} | \tfrac{1}{r_{12}} | n_t l_t s m_{l_t} m_{s_t}, n_u l_u s m_{l_u} m_{s_u}) \times$$

$$\times (n_t l_t s m_{l_t} m_{s_t}, n_u l_u s m_{l_u} m_{s_u} | \tfrac{1}{r_{12}} | n_a l_a s m_{l_a} m_{s_a}, n_b l_b s m_{l_b} m_{s_b}) =$$

$$= \sum_{\substack{n_2 l_2 m_u l_u \\ m_{l_2} m_{s_2} m_{l_3} m_{s_3} \\ m_{l_a} m_{s_a} m_{l_b} m_{s_b}}} \sum_{\kappa\kappa'} \frac{\hat{a}^{+}_{n_2 l_2 m_{l_2} m_{s_2}} \hat{a}^{+}_{n_3 l_3 m_{l_3} m_{s_3}} \hat{a}_{n_b l_b m_{l_b} m_{s_b}} \hat{a}_{n_a l_a m_{l_a} m_{s_a}}}{(\varepsilon_a + \varepsilon_b - \varepsilon_t - \varepsilon_u)} \times$$

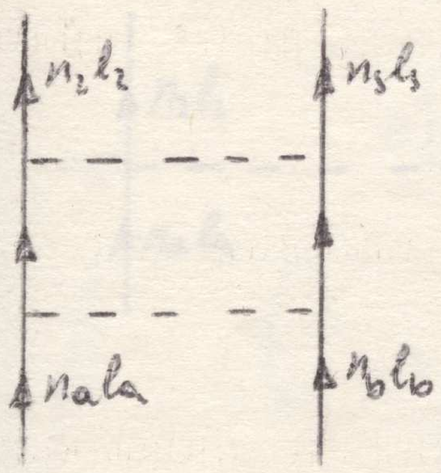
$$\times (l_2 \| C^{(\kappa)} \| l_t)(l_3 \| C^{(\kappa)} \| l_u)(l_t \| C^{(\kappa')} \| l_a)(l_u \| C^{(\kappa')} \| l_b) R_\kappa(n_2 l_2 n_t l_t, n_3 l_3 n_u l_u) \times$$

$$\times R_{\kappa'}(n_t l_t n_a l_a, n_u l_u n_b l_b)$$



(6.19)

Remiantis formule (5.9) (žt. [10]), Vignerio-Ekarto teorema, gimimo ir išnykimo operatorių komutacijos taisyklėmis, formule (28.9) (žt. [11]), gauname:

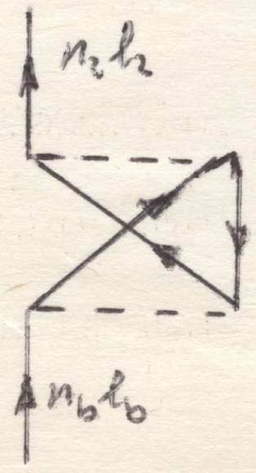


$$\sim \sum_{\substack{n_u l_u \\ n_t l_t}} \sum_{\substack{\kappa\kappa' \\ j_{12}}} \frac{2(2j_{12}+1)^{\frac{1}{2}}}{(\varepsilon_a + \varepsilon_b - \varepsilon_t - \varepsilon_u)} \left[W^{(j_{12} 0)}(n_2 l_2, n_a l_a) \times W^{(j_{12} 0)}(n_3 l_3, n_b l_b) \right]^{(00)} \times$$

$$\times (l_2 \| C^{(\kappa)} \| l_t)(l_3 \| C^{(\kappa)} \| l_u)(l_t \| C^{(\kappa')} \| l_a)(l_u \| C^{(\kappa')} \| l_b) \begin{Bmatrix} \kappa & \kappa' & j_{12} \\ l_a & l_t & l_t \end{Bmatrix} \times$$

$$\times \begin{Bmatrix} \kappa & \kappa' & j_{12} \\ l_b & l_3 & l_u \end{Bmatrix} R_\kappa(n_2 l_2 n_t l_t, n_3 l_3 n_u l_u) R_{\kappa'}(n_t l_t n_a l_a, n_u l_u n_b l_b) -$$

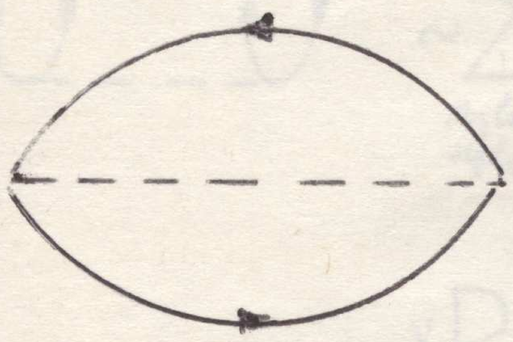
$-$



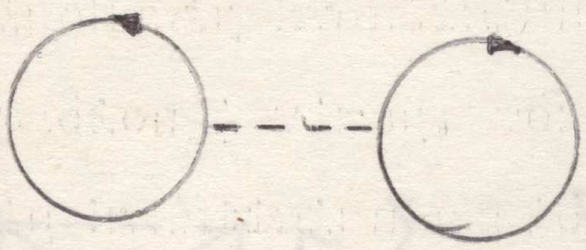
(6.20)

Kitų diagramų analizinės išraiškos surištame pavidale pateiktos be išvedimų.

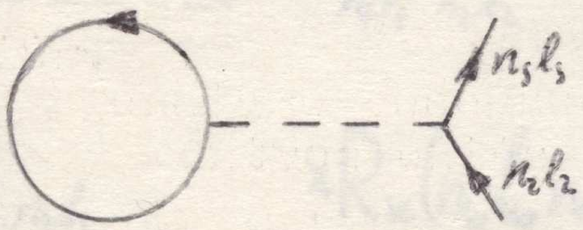
Likusios pirmos eilės diagramos turi išraiškas:



$$\sim \sum_{\substack{n_2 l_2 \\ n_3 l_3 \\ k}} 2 (l_2 \| C^{(k)} \| l_3)^2 R_k(n_2 l_2 n_3 l_3, n_3 l_3 n_2 l_2) \qquad (6.21)$$

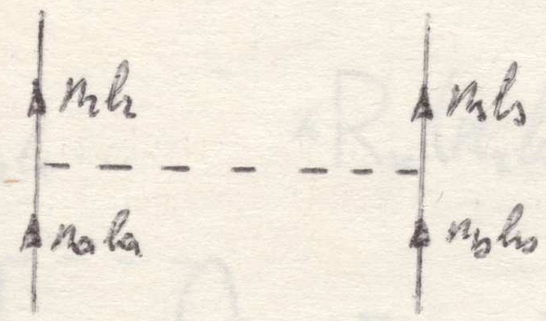


$$\sim \sum_{\substack{n_2 l_2 \\ n_3 l_3}} 4 (2l_3+1)(2l_2+1) R_0(n_2 l_2 n_2 l_2, n_3 l_3 n_3 l_3) \qquad (6.22)$$



$$\sim -\sum_{n_2 l_2} 2\sqrt{2}(2l_2+1)\sqrt{2l_3+1} \times$$

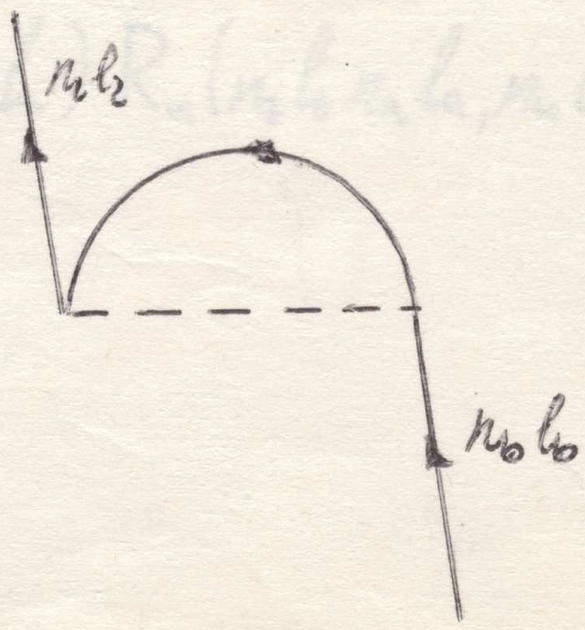
$$\times R_k(n_2 l_2 n_2 l_2, n_3 l_3 n_3 l_3)\, W^{(00)}(n_2 l_3, n_3 l_3) \qquad (6.23)$$



$$\sim \sqrt{2S+1} \sum_{k=0}^{\infty} R_k(n_2 l_2 n_a l_a, n_3 l_3 n_b l_b) \times$$

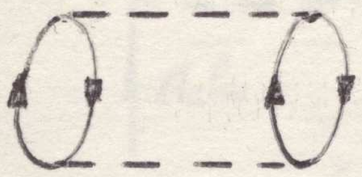
$$\times \frac{(l_2 \| C^{(k)} \| l_a)}{\sqrt{2k+1}} (l_3 \| C^{(k)} \| l_b) \left[W^{(k0)}(n_2 l_2, n_a l_a) \times W^{(k0)}(n_3 l_3, n_b l_b) \right]^{(00)} -$$

$-$



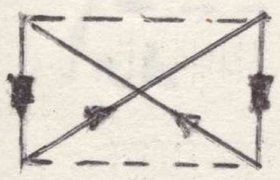
(6.24)

Pateikiamos antros eilės diagramų išraiškos surištame pavidale:



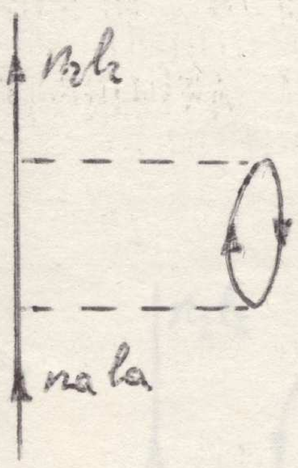
$$\sim \sum_{\substack{n_a l_a n_b l_b \\ n_4 l_4 n_2 l_2}} \sum_{k} \frac{(l_a \| C^{(k)} \| l_b)^2}{(2k+1)} (l_2 \| C^{(k)} \| l_4)^2 R_k(n_a l_a n_b l_b, n_2 l_2 n_4 l_4) \times$$

$$\times R_k(n_b l_b n_a l_a, n_4 l_4 n_2 l_2) \qquad (6.25)$$



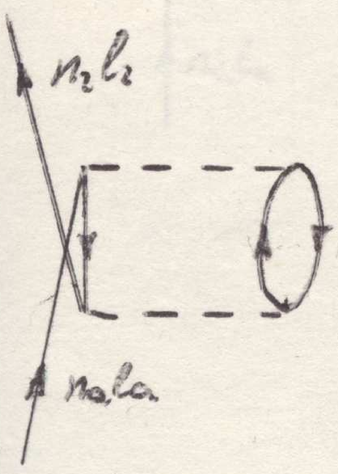
$$\sim \sum_{\substack{n_a l_a n_b l_b \\ n_4 l_4 n_2 l_2}} \sum_{kk'} (l_b \| C^{(k)} \| l_a)(l_2 \| C^{(k)} \| l_4)(l_a \| C^{(k')} \| l_2)(l_4 \| C^{(k')} \| l_b) \times$$

$$\times R_k(n_b l_b n_a l_a, n_2 l_2 n_4 l_4) R_{k'}(n_a l_a n_2 l_2, n_4 l_4 n_b l_b) \begin{Bmatrix} l_4 & k & l_2 \\ l_a & k' & l_b \end{Bmatrix} \qquad (6.26)$$



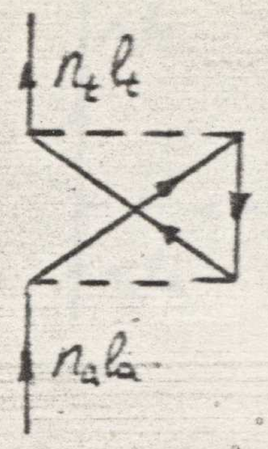
$$\sim \sum_{\substack{n_u l_u n_s l_s \\ n_4 l_4 k}} W^{(00)}(n_2 l_a, n_a l_a) \frac{(2s+1)^{\frac{3}{2}} (l_a \| C^{(k)} \| l_4)^2 (l_s \| C^{(k)} \| l_u)^2}{(2k+1)\sqrt{2l_a+1}\,(\varepsilon_a + \varepsilon_s - \varepsilon_4 - \varepsilon_u)} \times$$

$$\times R_k(n_2 l_a n_4 l_4, n_s l_s n_u l_u) R_k(n_4 l_4 n_a l_a, n_u l_u n_s l_s) \qquad (6.27)$$



$$\sim \sum_{\substack{n_u l_u n_s l_s \\ n_4 l_4 k}} W^{(00)}(n_2 l_a, n_a l_a) \frac{(2s+1)^{\frac{3}{2}} (l_a \| C^{(k)} \| l_4)^2 (l_s \| C^{(k)} \| l_u)^2}{(2k+1)\sqrt{2l_a+1}\,(\varepsilon_4 + \varepsilon_u - \varepsilon_2 - \varepsilon_s)} \times$$

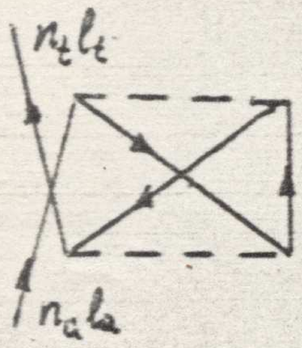
$$\times R_k(n_2 l_a n_4 l_4, n_s l_s n_u l_u) R_k(n_4 l_4 n_a l_a, n_u l_u n_s l_s) \qquad (6.28)$$



$$\sim -\sum_{\substack{n_r l_r n_s l_s \\ n_b l_b}} \sum_{\kappa\kappa'} W^{(00)}(n_t l_t, n_a l_t) \frac{\sqrt{2}\,(l_t \| C^{(\omega)} \| l_s)(l_r \| C^{(\omega)} \| l_b)}{\sqrt{2l_t+1}\,(\varepsilon_a+\varepsilon_r-\varepsilon_b-\varepsilon_s)} \times$$

$$\times (l_b \| C^{(\kappa')} \| l_t)(l_s \| C^{(\kappa')} \| l_r)\, R_\kappa(n_t l_t n_s l_s, n_r l_r n_b l_b) \times$$

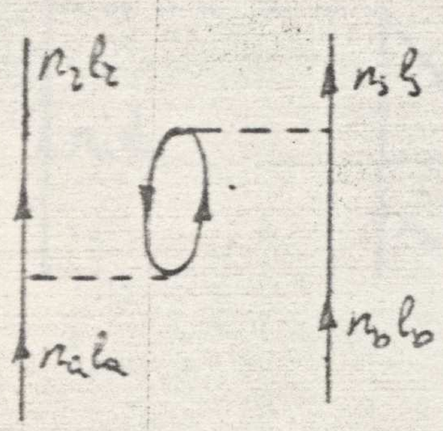
$$\times R_{\kappa'}(n_b l_b n_a l_t, n_s l_s n_r l_r) \begin{Bmatrix} \kappa & l_t & l_s \\ \kappa' & l_r & l_b \end{Bmatrix} \qquad (6.29)$$



$$\sim -\sum_{\substack{n_t l_t n_b l_a \\ n_s l_s}} \sum_{\kappa\kappa'} W^{(00)}(n_t l_t, n_a l_t) \frac{(l_b \| C^{(\omega)} \| l_t)(l_s \| C^{(\omega)} \| l_r)}{\sqrt{2l_t+1}\,(\varepsilon_s+\varepsilon_b-\varepsilon_t-\varepsilon_r)} \times$$

$$\times \sqrt{2}\,(l_t \| C^{(\kappa')} \| l_s)(l_r \| C^{(\kappa')} \| l_b)\, R_\kappa(n_b l_b n_a l_t, n_s l_s n_r l_r) \times$$

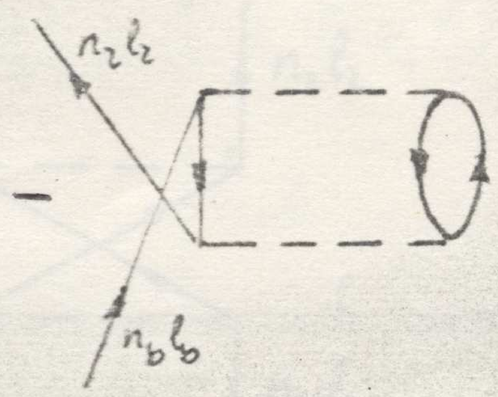
$$\times R_{\kappa'}(n_t l_t n_s l_s, n_r l_r n_b l_b) \times \begin{Bmatrix} \kappa & l_t & l_s \\ \kappa' & l_r & l_b \end{Bmatrix} \qquad (6.30)$$



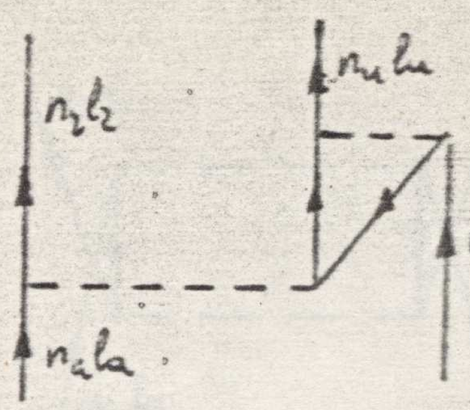
$$\sim +\sum_{n_t l_t n_u l_u} \sum_{\kappa} \frac{(2l_s+1)(l_r \| C^{(\omega)} \| l_a)(l_s \| C^{(\omega)} \| l_s)}{(2l_\kappa+1)\sqrt{2l_\kappa+1}\,(\varepsilon_a+\varepsilon_b-\varepsilon_r-\varepsilon_u)} (l_u \| C^{(\kappa)} \| l_t)^2 \times$$

$$\times R_\kappa(n_r l_r n_a l_a, n_u l_u n_t l_t)\, R_\kappa(n_t l_t n_u l_u, n_s l_s n_b l_b) \times$$

$$\times \left[W^{(\kappa 0)}(n_r l_r, n_a l_a) \times W^{(\kappa 0)}(n_s l_s, n_b l_b) \right]^{(00)} -$$

$-$ 

(6.31)

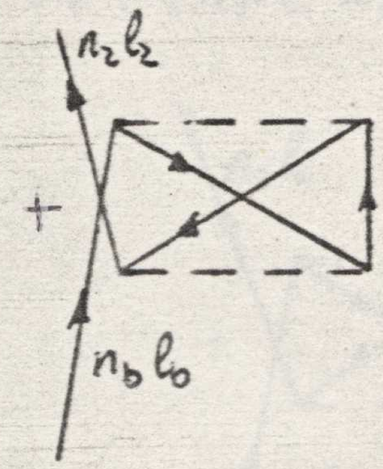


$$\sim + \sum_{n_t l_t n_s l_s} \sum_{\kappa\kappa'} \frac{(2s+1)(l_2 \| C^{(\kappa)} \| l_a)(l_t \| C^{(\kappa)} \| l_s)}{\sqrt{2\kappa+1}\,(\varepsilon_a+\varepsilon_s-\varepsilon_2-\varepsilon_t)} \times$$

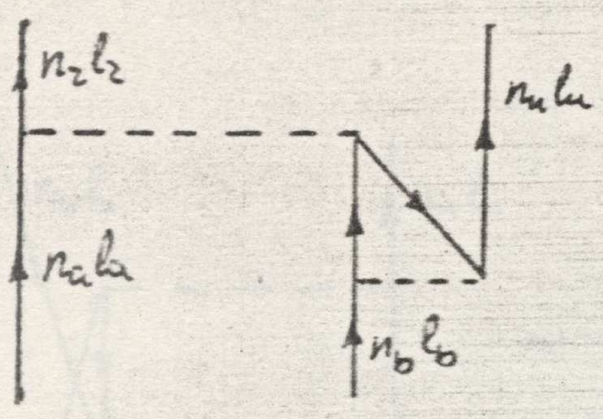
$$\times (l_u \| C^{(\kappa')} \| l_t)(l_s \| C^{(\kappa')} \| l_b) \begin{Bmatrix} l_t & \kappa' & l_u \\ l_b & \kappa & l_s \end{Bmatrix} R_\kappa(n_2 l_2 n_a l_a, n_t l_t n_s l_s) \times$$

$$\times R_{\kappa'}(n_u l_u n_t l_t, n_s l_s n_b l_b) \times$$

$$\times \left[W^{(\kappa 0)}(n_2 l_2, n_a l_a) \times W^{(\kappa 0)}(n_u l_u, n_b l_b) \right]^{(00)} +$$



(6.32)

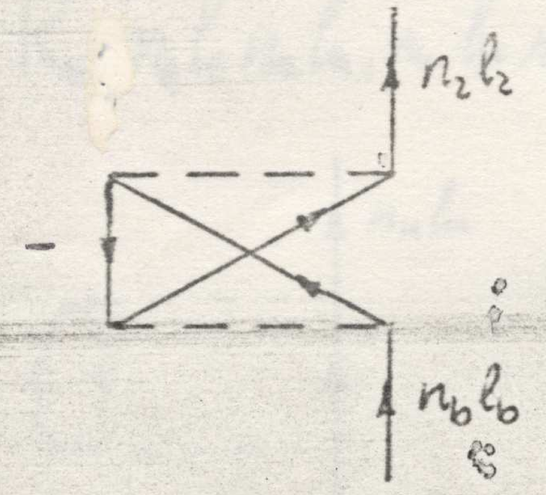


$$\sim + \sum_{n_t l_t n_s l_s} \sum_{\kappa\kappa'} \frac{(2s+1)(l_2 \| C^{(\kappa)} \| l_a)(l_t \| C^{(\kappa)} \| l_s)}{\sqrt{2\kappa+1}\,(\varepsilon_a+\varepsilon_s-\varepsilon_2-\varepsilon_t)} \times$$

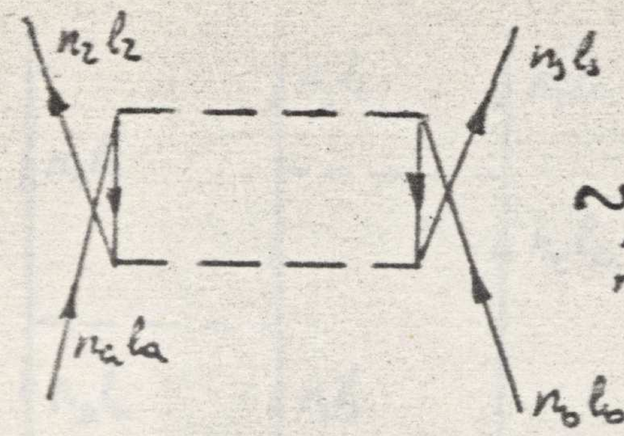
$$\times (l_u \| C^{(\kappa')} \| l_t)(l_s \| C^{(\kappa')} \| l_b) R_\kappa(n_2 l_2 n_a l_a, n_t l_t n_s l_s) \times$$

$$\times R_{\kappa'}(n_u l_u n_t l_t, n_s l_s n_b l_b) \begin{Bmatrix} l_t & \kappa' & l_u \\ l_b & \kappa & l_s \end{Bmatrix} \times$$

$$\times \left[W^{(\kappa 0)}(n_2 l_2, n_a l_a) \times W^{(\kappa 0)}(n_u l_u, n_b l_b) \right]^{(00)} -$$



(6.33)

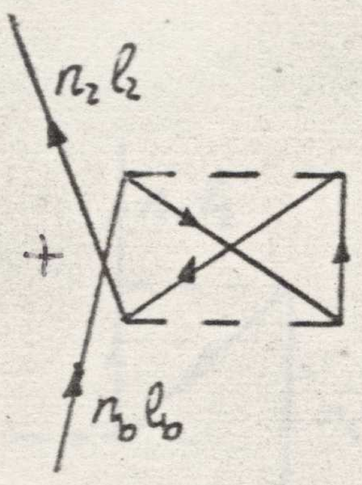


$$\sim \sum_{n_u l_u n_t l_t} \sum_{\substack{\kappa \kappa' \\ j_{12}}} \frac{2(2j_{12}+1)^{\frac{1}{2}} (l_2 \| C^{(\omega)} \| l_t)}{(\varepsilon_t + \varepsilon_u - \varepsilon_2 - \varepsilon_3)} (l_3 \| C^{(\kappa)} \| l_u) \times$$

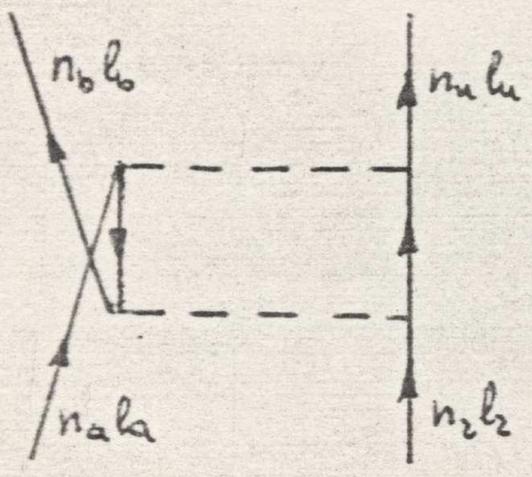
$$\times (l_t \| C^{(\kappa')} \| l_a)(l_u \| C^{(\kappa')} \| l_b) R_\kappa(n_2 l_2 n_t l_t, n_3 l_3 n_u l_u) \times$$

$$\times R_{\kappa'}(n_t l_t n_a l_a, n_u l_u n_b l_b) \begin{Bmatrix} \kappa & \kappa' & j_{12} \\ l_a & l_2 & l_t \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \kappa & \kappa' & j_{12} \\ l_b & l_3 & l_u \end{Bmatrix} \times$$

$$\times \left[W^{(j_{12} 0)}(n_2 l_2, n_a l_a) \times W^{(j_{12} 0)}(n_3 l_3, n_b l_b) \right]^{(00)} +$$



(6.34)

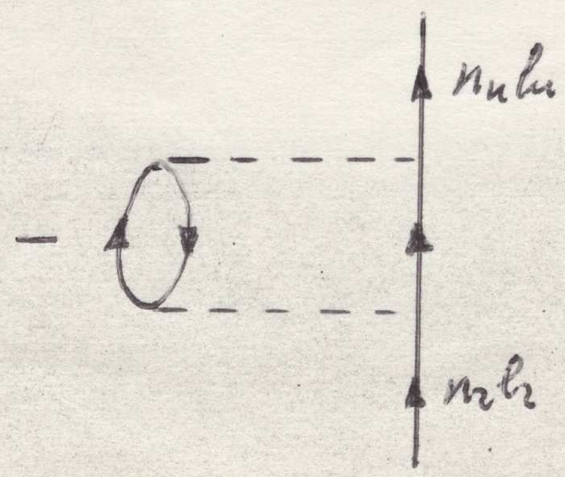


$$\sim - \sum_{n_t l_t n_3 l_3} \sum_{\kappa \kappa'} \sum_{L_{12} S_{12}} \left[W^{(L_{12} S_{12})}(n_u l_u, n_a l_a) \times W^{(L_{12} S_{12})}(n_b l_b, n_2 l_2) \right]^{(00)} \times$$

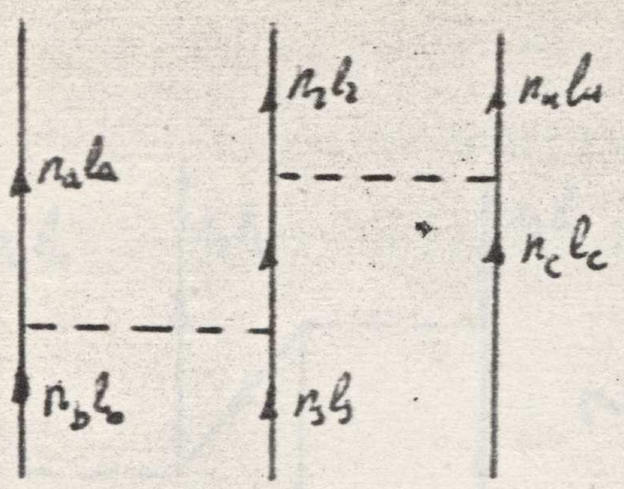
$$\times (-1)^{-l_t - l_3 + L_{12}} \sqrt{2L_{12}+1} \sqrt{2S_{12}+1} (l_b \| C^{(\omega)} \| l_t)(l_3 \| C^{(\omega)} \| l_2) \times$$

$$\times (l_t \| C^{(\kappa')} \| l_a)(l_u \| C^{(\kappa')} \| l_3) R_\kappa(n_b l_b n_t l_t, n_3 l_3 n_2 l_2) \times$$

$$\times R_{\kappa'}(n_t l_t n_a l_a, n_u l_u n_3 l_3) \begin{Bmatrix} l_b & l_2 & L_{12} \\ l_3 & l_t & \kappa \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_u & l_a & L_{12} \\ l_t & l_3 & \kappa' \end{Bmatrix} \frac{1}{(\varepsilon_t + \varepsilon_2 - \varepsilon_b - \varepsilon_3)}$$



(6.35)

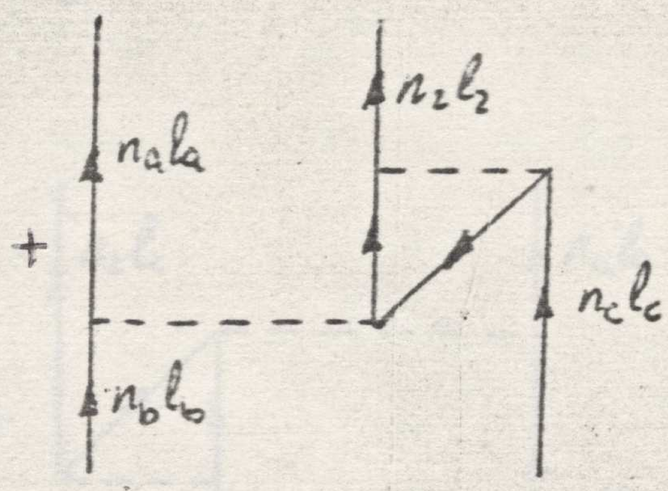


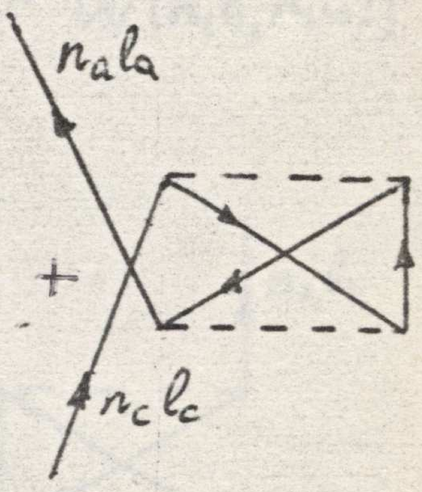
$$\sim \sum_{\substack{n_t l_t \\ j^{12}}} \sum_{\kappa\kappa'} \frac{\sqrt{2j_{12}+1}\,(l_a \| C^{(\kappa)} \| l_b)(l_t \| C^{(\kappa)} \| l_s)}{\sqrt{(2\kappa+1)(2\kappa'+1)}\,(\varepsilon_b+\varepsilon_s-\varepsilon_a-\varepsilon_t)} \times$$

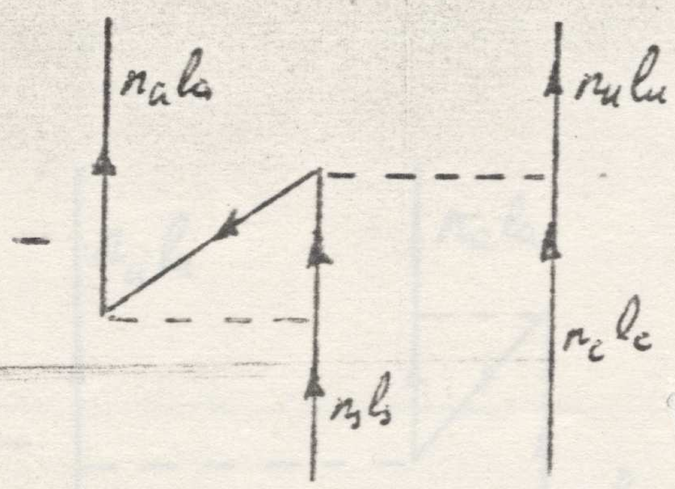
$$\times (l_2 \| C^{(\kappa')} \| l_t)(l_u \| C^{(\kappa')} \| l_c)\, R_\kappa(n_a l_a n_b l_b, n_t l_t n_s l_s) \times$$

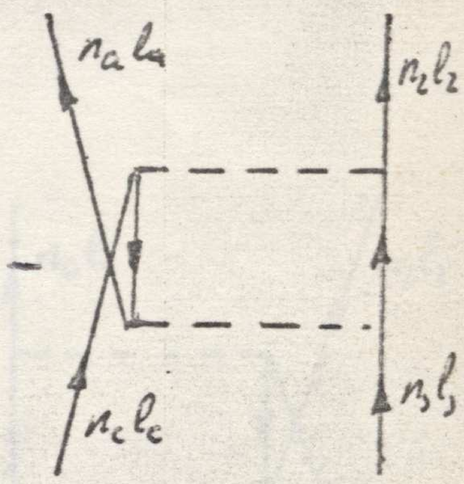
$$\times R_{\kappa'}(n_2 l_2 n_t l_t, n_u l_u n_c l_c) \begin{Bmatrix} \kappa' & \kappa & j_{12} \\ l_b & l_s & l_t \end{Bmatrix} \times$$

$$\times \left[\left[W^{(\kappa 0)}(n_a l_a, n_b l_b) \times W^{(\kappa 0)}(n_u l_u, n_c l_c) \right]^{(j_{12} 0)} \times W^{(j_{12} 0)}(n_2 l_2, n_3 l_3) \right]^{(00)} +$$

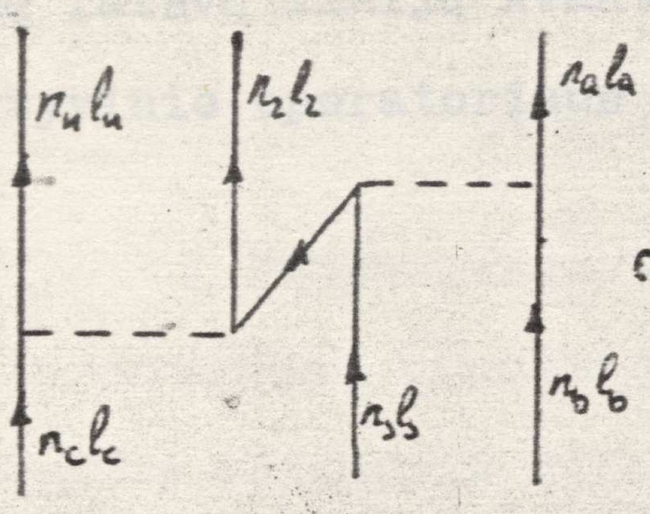








(6.36)

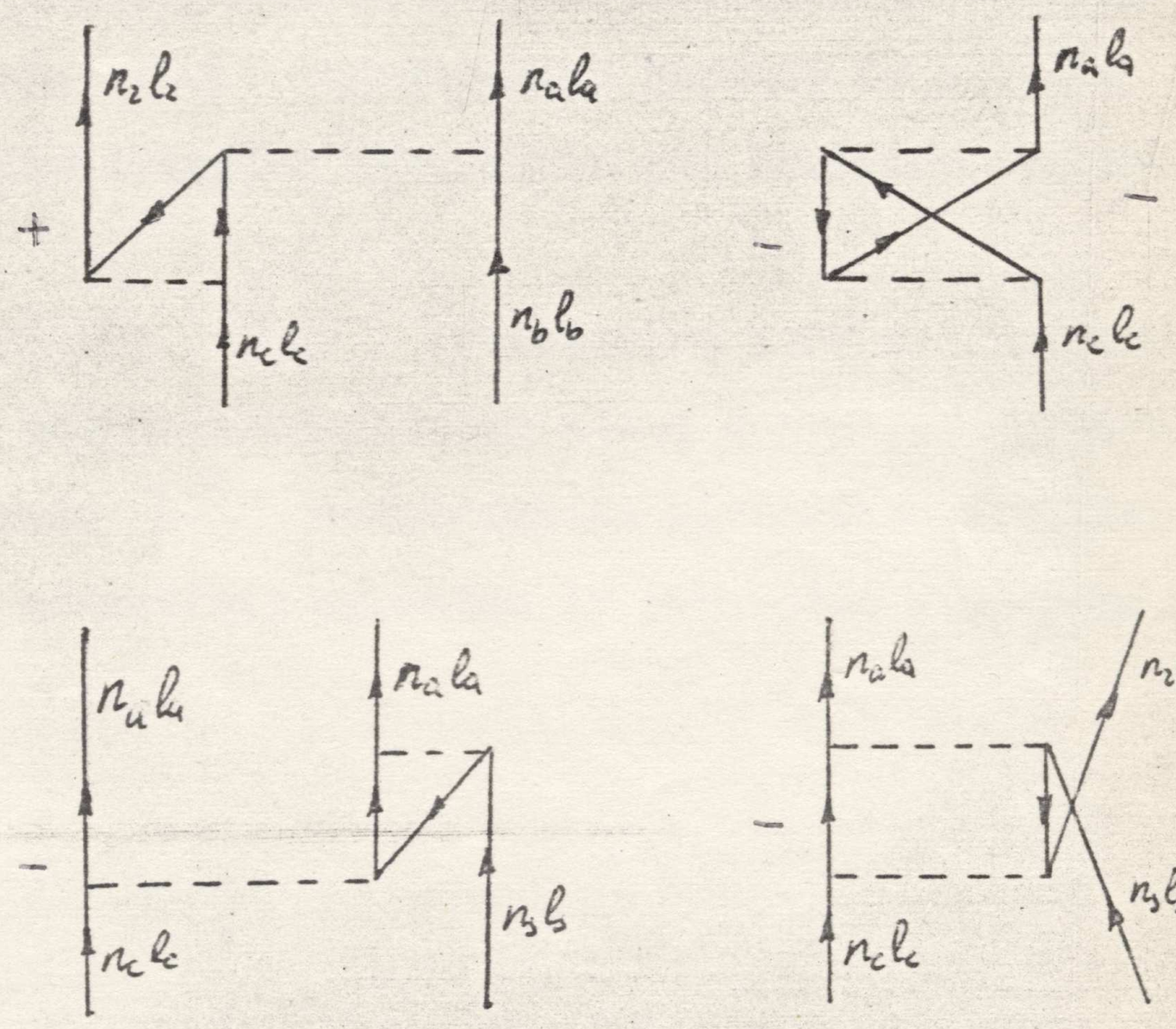


$$\sim -\sum_{\substack{n_t l_t \kappa \kappa' \\ j_{12}}} \frac{\sqrt{2j_{12}+1}\,(l_a \| C^{(\kappa)} \| l_b)(l_t \| C^{(\kappa)} \| l_c)}{\sqrt{(2\kappa+1)(2\kappa'+1)}\,(\varepsilon_c+\varepsilon_t-\varepsilon_a-\varepsilon_b)} \times$$

$$\times (l_2 \| C^{(\kappa')} \| l_t)(l_u \| C^{(\kappa')} \| l_c) R_\kappa(n_a l_a n_b l_b, n_t l_t n_s l_s) \times$$

$$\times R_{\kappa'}(n_2 l_2 n_t l_t, n_u l_u n_c l_c) \begin{Bmatrix} \kappa' & \kappa & j_{12} \\ l_b & l_2 & l_t \end{Bmatrix} \times$$

$$\times \left[\left[W^{(\kappa 0)}(n_a l_a, n_b l_b) \times W^{(\kappa 0)}(n_u l_u, n_c l_c) \right]^{j_{12} 0} \times W^{(j_{12} 0)}(n_2 l_2, n_3 l_3) \right]^{(00)} +$$



(6.37)

Tuo būdu, sudėjus visas diagramas ir susumavus pagal diagramų laisvų linijų kvantinius skaičius n ir ℓ, gausime efektyvinio operatoriaus išraiškas.

I Š V A D O S

1. Pasinaudojant antrinio kvantavimo tenzoriniame pavidale metodika, gaunamas elektrostatinės sąveikos energijos operatorius sluoksnio viduje, o taip pat sudėtingų konfiguracijų atvejui.

2. Iš šių operatorių išskiriami nariai, turintys centrinę simetriją visiems termams ir atskiroms termų grupėms.

3. Pasinaudojus gautomis išraiškomis, galima išskirti elektrostatinės sąveikos energijos operatoriaus dalį, kuri neturi centrinės simetrijos.

4. Taikant judesio kiekio memento teorijos ir antrinio kvantavimo metodikas, $\hat{H}_{eff}$ operatorius pirmame ir antrame perturbacijų teorijos artėjime išreikštas per bazinius operatorius W.

5. Šiame pavidale $\hat{H}_{eff}$ operatorius ypač patogu naudoti, skaičiuojant daugiaelektrininius atomų energijos spektrus, nes bazinių operatorių W matriciniams elementams skaičiuoti yra išvystytas matematinis aparatas ir paruoštos programos ESM.

В ФОРМАЛИЗМЕ ВТОРИЧНОГО КВАНТОВАНИЯ ЭФФЕКТИВНЫЕ ОПЕРАТОРЫ В НЕПРИВОДИМОМ ТЕНЗОРНОМ ВИДЕ

Г. Гайгалас

Р Е З Ю М Е

Применяя методику вторичного квантования, получен эффективный оператор энергии электростатического взаимодействия. Из оператора энергии выделена часть, обладающая центральной симметрией.

Получено в связном виде выражение для эффективного оператора энергии в первом и втором порядках теории возмущений.

THE NON-REDUCED SHAPE OF EFFECTIVE OPERATORS IN THE SECOND QUANTIZATION

G. Gaigalas

S u m m a r y

The effective operator of electrostatic interaction energy recieved aplying the method of the second quantization. The part of the central symmetry was marked out from the separators of energy.

The expression of the energy of effective operator in the first and second orders of the theory of perturbation recieved in the coherent shape.

L I T E R A T Ū R A :

I. БОЛОТИН А.Б., ЛЕВИНСОН И.Б., ТОЛМАЧЕВ В.В. Интегрирование фейнмановских диаграмм по угловым переменным в полевой форме теории возмущений для атомов. - Литовский физический сборник, 1964, т.IУ, № I, с.25-33.

2. Джадд Б. Вторичное квантование и атомная спектроскопия. - М.: Мир, 1970.

3. Джадд Б., Вайборн Б. Теория сложных атомных спектров. - М.: Мир, 1973.

4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. - М.: Наука, 1974.

5. Мессия А. Квантовая механика. - М.: Наука, 1979, т. 2.

6. Реймс С. Теория многоэлектронных систем. - М.: Мир, 1976.

7. Собельман И.И. Введение в теорию атомных спектров. -., 1963.

8. Шпакаускас В.В., Каняускас Ю.М., Рудзикас З.Б. Тензорные свойства операторов в квазиспиновом пространстве применительно к теории многоэлектронных атомов. - Литовский физический сборник., 1977. т.ХУII, № 5, с. 564-574.

9. Шпакаускас В.В., Каняускас Ю.М., Рудзикас З.Б. Приведение в квазиспиновом пространстве генеалогические коефициенты и субматричные элементы тензорных операторов. - Литовский физический сборник., 1978, т.ХУIII, № 3, с. 293-315.

IO. Юцис А.П., Савукинас А.Ю. Математические основы теории атома. - Вильнюс: Минтис, 1973.

II. Юцис А.П., Бандзайтис А.А. Теория момента количества движения в квантовой механике. - Вильнюс: Мокслас, 1977.

12. Lindgrem I., Morrison J. Atomic Many-Body Theory. Springer, Series in Chemical Physics. - Berlin: Springer, 1982,vol. 13.