

# Определение скалярной и тензорной поперечности с помощью программы INE

Поперечность состояние  $J, M$  имеет вид:

$$(1) \alpha_{JM} = \alpha_0 + \alpha_2 \frac{3M^2 - J(J+1)}{J(2J-1)} \quad \left[ \text{Zeit. für Phys D } \underline{18}, 101, (91) \right]$$

и поправка к энергии

$$(2) \Delta E_{JM} = -\alpha_{JM} \frac{\epsilon^2}{2} \quad (\vec{\epsilon} = \epsilon \hat{z})$$

С помощью программы INE мы можем вычислить величины  $\alpha_{JM}$  и  $\alpha_0$ . Тогда  $\alpha_2$  определяется из (1):

$$(3) \alpha_2 = (\alpha_{JM} - \alpha_0) \frac{J(2J-1)}{3M^2 - J(J+1)} \quad (J > 1/2)$$

Возьмем явные формулы для  $\alpha_{JM}$  и  $\alpha_0$ . Общее выражение для  $\Delta E_{JM}$ :

$$(4) \Delta E_{JM} = \sum_n \frac{\langle JM | d_z | J_n M \rangle \langle J_n M | d_z | JM \rangle}{E - E_n} \epsilon^2$$

$$\Rightarrow \langle JM | d_z | J_n M \rangle \langle J_n M | d_z | JM \rangle$$

$$(5) \alpha_{JM} = -2 \sum_n \frac{\langle JM | d_z | J_n M \rangle \langle J_n M | d_z | JM \rangle}{E - E_n}$$

Эта формула может быть использована в INE, т.к. там вычисляется вектора  $X1$  и  $Y2$ :

$$(6a) X1 = \sum_n \frac{|J_n M \rangle \langle J_n M | d_z | JM \rangle}{E - E_n}$$

$$(6b) Y2 = d_z | JM \rangle$$

$$(6c) \Rightarrow \alpha_{JM} = -2 \langle Y2 | X1 \rangle$$

используя как оператор  
значения в INE.



Для того, чтобы найти  $d_0$  заметим, что согласно (1)

$$(7) \sum_M d_{JM} = (2J+1) d_0 \Rightarrow d_0 = \frac{1}{2J+1} \sum_M d_{JM}$$

Возвращаем уравнению часть б (5) и возмем  $\sum_n$ :

$$\begin{aligned} (8) \sum_M d_{JM} &= -2 \sum_n \sum_M (-1)^{J+J_n-2M} \begin{pmatrix} J & 1 & J_n \\ -M & 0 & M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_n & 1 & J \\ -M & 0 & M \end{pmatrix} \frac{\langle J \| d \| J_n \rangle \langle J_n \| d \| J \rangle}{E - E_n} \\ &= -2 \sum_{nM} (-1)^{J+J_n-2M+J-J_n} \begin{pmatrix} J & 1 & J_n \\ -M & 0 & M \end{pmatrix}^2 \frac{|\langle J \| d \| J_n \rangle|^2}{E - E_n} \\ &= -2 \sum_n \sum_M \begin{pmatrix} J & 1 & J_n \\ -M & 0 & M \end{pmatrix}^2 \frac{|\langle J \| d \| J_n \rangle|^2}{E - E_n} \\ &= -2 \sum_n \frac{\delta}{3} \frac{|\langle J \| d \| J_n \rangle|^2}{E - E_n} \quad \text{где } \delta = \begin{cases} 1, & \text{если } |J-J_n| \leq 1 \leq J_n \\ 1, & \text{и } |M| \leq J_n \\ 0, & \text{иначе} \end{cases} \end{aligned}$$

Из (7) и (8) получаем:

$$(9) d_0 = \frac{-2}{3(2J+1)} \sum_n \frac{|\langle J \| d \| J_n \rangle|^2}{E - E_n}$$

Для вычисления этой суммы нельзя использовать вектора  $X_1$  (6a) и  $Y_2$  (6b). Вместо них надо использовать их разложения по моментам:  $X_{1j}$  и  $Y_{2j}$

$$(10) X_{1j} = \sum_{J_n=j} \frac{|J_n M \rangle \langle J_n M | d | J M \rangle}{E - E_n}; \quad Y_{2j} = |j M \rangle \langle j M | d | J M \rangle$$

Запишем  $X_{1j}$  и  $Y_{2j}$  через углы  $M, J$ :

$$\begin{aligned} (11) X_{1j} &= (-1)^{j-M} \begin{pmatrix} j & 1 & J \\ -M & 0 & M \end{pmatrix} \sum_{J_n=j} \frac{|J_n M \rangle \langle J_n M | d | J \rangle}{E - E_n} \\ &= (-1)^{j-M} \begin{pmatrix} j & 1 & J \\ -M & 0 & M \end{pmatrix} \sum_{J_n=j} \frac{|J_n M \rangle \langle J \| d \| J_n \rangle}{E - E_n} \end{aligned}$$



$$\langle Y_{2j} | = \langle JM | d | j M \rangle \langle j M | =$$

$$= (-1)^{J-M} \begin{pmatrix} J & 1 & j \\ -M & 0 & M \end{pmatrix} \langle JM | d | j \rangle \langle j M |$$

Уг (11) и (12) выражаем, что

$$(13) \alpha_0 = \frac{-2}{3(2J+1)} \sum_u \frac{|\langle JM | d | j_u M \rangle|^2}{E - E_u}$$

$$= \frac{-2}{3(2J+1)} \sum_j \sum_{j_u=j} \begin{pmatrix} J & 1 & j \\ -M & 0 & M \end{pmatrix}^{-2} \frac{\langle JM | d | j_u M \rangle \langle j_u M | d | JM \rangle}{E - E_u}$$

$$= \frac{-2}{3(2J+1)} \sum_j \begin{pmatrix} J & 1 & j \\ -M & 0 & M \end{pmatrix}^{-2} \langle Y_{2j} | X_{1j} \rangle$$

Утак:

$$(14a) \alpha_{JM} = -2 \langle Y_2 | X_1 \rangle = -2 \sum_j \langle Y_{2j} | X_{1j} \rangle$$

$$(14b) \alpha_0 = \frac{-2}{3(2J+1)} \sum_j \begin{pmatrix} J & 1 & j \\ -M & 0 & M \end{pmatrix}^{-2} \langle Y_{2j} | X_{1j} \rangle$$

$$(14c) \alpha_2 = (\alpha_{JM} - \alpha_0) \frac{J(2J-1)}{3M^2 - J(J+1)} \quad (*)$$

Comment

Для вычисления  $\alpha_0$  необходимо, чтобы все  $3j$ -символы в (14b) были отличны от нуля. Это так только, если  $0 < |M| \leq J-1$ . Действительно, если  $M=0$  то заменяется  $\begin{pmatrix} J & 1 & j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ ,

если  $|M| > J-1$ , то заменяется  $\begin{pmatrix} J & 1 & J-1 \\ -M & 0 & M \end{pmatrix}$

(\*) Можно также использовать явный вид для  $\alpha_2$ :

$$(15) \alpha_2 = 4 \sqrt{\frac{5J(2J-1)}{6(2J+3)(2J+1)(J+1)}} \sum_j (-1)^{j+J+1} \begin{Bmatrix} J & 1 & j \\ 1 & J & 2 \end{Bmatrix} \frac{|\langle JM | d | j \rangle|^2}{E - E_u}$$

$$= 4 \sqrt{\frac{5J(2J-1)}{6(2J+3)(2J+1)(J+1)}} \sum_j (-1)^{j+J+1} \begin{Bmatrix} J & 1 & j \\ 1 & J & 2 \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} J & 1 & j \\ -M & 0 & M \end{pmatrix}^{-2} \langle Y_{2j} | X_{1j} \rangle$$



Дополнение к 7/03/97

Недостаток формул (14) и (15) в том, что часто входящие в них кривые образуются в нуль. Например на них нельзя вывести  $d_0$  и  $d_2$  для состояния  $|J=1\rangle$ .

Выход: использовать разрыв энергии  $M$  и  $M'$  для начального и промежуточных состояний. Тогда вместо (6a), (6b) и (11), (12)

имеем:

$$(16) |X1\rangle = \sum_n \frac{|J_n M'\rangle \langle J_n M' | d_q | JM\rangle}{E - E_n} = \sum_n (-1)^{J_n - M'} \begin{pmatrix} J_n - M' & J_n + 1 & J \\ -M' & q & M \end{pmatrix} \frac{|J_n M\rangle \langle J_n M | d_q | JM\rangle}{E - E_n}$$

$$(17) \langle Y2 | = \sum_n \langle JM | d_{-q} | J_n M'\rangle \langle J_n M' | = \sum_n (-1)^{J_n - M'} \begin{pmatrix} J_n - M' & J_n + 1 & J \\ -M' & q & M \end{pmatrix} \langle J_n M | d_{-q} | JM\rangle \langle J_n M' |$$

Для  $d_{JM}$ ,  $d_0$  и  $d_2$  справедливы:

$$(18a) d_{JM} = -2(-1)^q \sum_j \begin{pmatrix} j & 1 & J \\ -M & 0 & M \end{pmatrix}^2 \begin{pmatrix} j & 1 & J \\ -M' & q & M \end{pmatrix}^{-2} \langle Y2_j | X1_j \rangle$$

$$(18b) d_0 = \frac{-2(-1)^q}{3(2J+1)} \sum_j \begin{pmatrix} j & 1 & J \\ -M' & q & M \end{pmatrix}^{-2} \langle Y2_j | X1_j \rangle$$

$$(18c) d_2 = -4(-1)^q \sqrt{\frac{5J(2J-1)}{6(2J+3)(2J+1)(J+1)}} \sum_j (-1)^{j+J} \begin{Bmatrix} j+J & 1 & j \\ j & 1 & J \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} j & 1 & J \\ -M' & q & M \end{pmatrix}^{-2} \langle Y2_j | X1_j \rangle$$

Эти формулы более удобные. В частности, для  $J=1$  можно брать  $M=1, M'=0$ .

Коммент В принципе, программу INE можно использовать и для расчета Штарк-индуцированных E1 амплитуд. Формулы (18) могут быть прямо использованы для перехода  $X0 \rightarrow X2$  при условии, что  $J_0 \geq J_2 = J$ . Надо только повторить расчет переставив  $X0$  и  $X2$  и сложить результаты. Однако, кроме  $d_0$  и  $d_2$  теперь может быть и  $d_1$ . Нашими формулами для  $d_1$ .



Штарк индуцированная амплитуда  $d_1$

Согласно работе Де Мила, кубовые векторную амплитуду можно определить так (см (7) и (8) в ДК)

$$(19) \langle X_2 | W | X_0 \rangle = \vec{\beta} \cdot \vec{E} \times \vec{E}, \quad \rho_q = \frac{i}{\sqrt{2}} (-1)^{\frac{J_2 - M_2}{2}} \begin{pmatrix} J_2 - M_2 & J_2 & 1 \\ -M_2 & q & M \end{pmatrix} d_1$$

Для  $d_1$  было получено (10) в ДК:

$$(20) d_1 = \sqrt{3} \sum_n (-1)^{J+J_n} \begin{Bmatrix} J_n & J_2 & 1 \\ 1 & 1 & J \end{Bmatrix} \langle n || d || J_2 \rangle \langle n || d || J \rangle \left( \frac{1}{E - E_n} - \frac{1}{E_2 - E_n} \right)$$

Таким образом, снова надо проделать два расчета A и B.

Во втором начале и конце меняются местами. Для случая

когда  $J_2 = J_0 = J$  имеем:

$$(21a) d_1 = d_1^A - d_1^B$$

$$(21b) d_1^A = (-1)^q \sqrt{3} \sum_j (-1)^{J+j} \begin{Bmatrix} j & J & 1 \\ 1 & 1 & J \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} j & 1 & J \\ -M & q & M \end{pmatrix}^{-2} \langle Y_2^j | X | j \rangle$$

Нерелятивистский предел

Определим зависимость  $d_0, d_1$  и  $d_2$  от кв числа J при  $c \rightarrow \infty$ .

В этом случае приведенные МЗ имеют вид (см (12) в ДК с заменой

$F \rightarrow J, J \rightarrow L, I \rightarrow S$ ):

$$(22) \langle J_n || d || J \rangle = (-1)^{L_n + S + J + 1} \sqrt{(2J_n + 1)(2J + 1)} \begin{Bmatrix} L_n & J_n & S \\ J & L & 1 \end{Bmatrix} \langle L_n || d || L \rangle$$

Подставим (22) в (13):

$$(23) d_0 = \frac{-2}{3(2J+1)} \sum_n (2J_n+1)(2J+1) \begin{Bmatrix} L_n & J_n & S \\ J & L & 1 \end{Bmatrix}^2 \frac{|\langle L_n || d || L \rangle|^2}{E - E_n}$$

$$= (\text{см М II 533}) = \frac{-2}{3(2L+1)} \sum_n \frac{|\langle L_n || d || L \rangle|^2}{E - E_n}$$

Таким образом при  $c \rightarrow \infty$   $d_0(L, J) \rightarrow d_0(L)$  где  $d_0(L)$  соответствует безспиновому атому.



расширим тензор  $d_1$ . Согласно (20) и (22) (случай  $J_2=J$ )

$$(24) \quad d_1 = \sqrt{3} \sum_n (-1)^{J+J_n} \begin{Bmatrix} J_n & J & 1 \\ 1 & 1 & J \end{Bmatrix} (2J_n+1) (2J+1) \begin{Bmatrix} L_n & J_n & S \\ J & L & 1 \end{Bmatrix}^2 X_n,$$

$$(24a) \quad X_n = \langle u || d || f \rangle \langle u || d || i \rangle \left( \frac{1}{E_i - E_n} - \frac{1}{E_f - E_n} \right),$$

где  $X_n$  — не зависит от  $J_n$ . Условие суммирования:

$$(25) \quad \sum_n (-1)^{J+J_n} (2J_n+1) \begin{Bmatrix} J & 1 & J_n \\ 1 & J & 1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} S & L_n & J_n \\ 1 & J & L \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J & 1 & J_n \\ L_n & S & L \end{Bmatrix} = \begin{pmatrix} \text{свойств} \\ M \quad S33 \end{pmatrix}$$

$$= \sum_n (-1)^{J+J_n} (2J_n+1) \begin{Bmatrix} J & 1 & J_n \\ 1 & J & 1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 1 & J & J_n \\ S & L_n & L \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} S & L_n & J_n \\ 1 & J & L \end{Bmatrix}$$

$$= (-1)^{1+1+1+J+S+L_n+L+L} \begin{Bmatrix} 1 & L & L \\ S & J & J \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 1 & L & L \\ L_n & 1 & 1 \end{Bmatrix} = (-1)^{J+S+L_n+1} \begin{Bmatrix} S & J & L \\ 1 & L & J \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L_n & 1 & L \\ 1 & L & 1 \end{Bmatrix}$$

Перепишем (25) в (24):

$$(26) \quad d_1 = \sqrt{3} (2J+1) \begin{Bmatrix} S & J & L \\ 1 & L & J \end{Bmatrix} \sum_n (-1)^{J+S+L_n+1} \begin{Bmatrix} L_n & 1 & L \\ 1 & L & 1 \end{Bmatrix} X_n$$

$$= (2J+1) \begin{Bmatrix} S & J & L \\ 1 & L & J \end{Bmatrix} (-1)^{J+S+L+1} \sum_n \sqrt{3} (-1)^{L+L_n} \begin{Bmatrix} L_n & 1 & L \\ 1 & L & 1 \end{Bmatrix} X_n$$

По условию от нас  $d_1(L)$ . Перепишем  $d_1$ -символ иначе:

$$d_1(J, L) = \frac{2(J(J+1)+L(L+1)-S(S+1))}{\sqrt{2J(2J+1)2(J+1)2L(2L+1)2(L+1)}} (2J+1) d_1(L)$$

$$d_1(J, L) = \frac{1}{2} \frac{J(J+1)+L(L+1)-S(S+1)}{\sqrt{J(J+1)L(L+1)}} \sqrt{\frac{2J+1}{2L+1}} d_1(L)$$

$$(27) \quad = \frac{\langle J \bar{L} \rangle}{\sqrt{J(J+1)L(L+1)}} \sqrt{\frac{2J+1}{2L+1}} d_1(L)$$

Переходим к  $d_2$ . Перепишем (22) в (15).

$$(28) \quad d_2 = -4 \sqrt{\frac{5J(2J-1)}{6(2J+3)(2J+1)(J+1)}} \sum_n (-1)^{J_n+J} \begin{Bmatrix} J & 1 & J_n \\ 1 & J & 2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 1 & J & J_n \\ S & L_n & L \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} S & L_n & J_n \\ 1 & J & L \end{Bmatrix} (2J_n+1) (2J+1) Y_n$$

$$= -4 \sqrt{\frac{5J(2J+1)}{6(2J+3)(J+1)}} (-1)^{1+1+2+J+S+L_n+L+L} \begin{Bmatrix} 2 & L & L \\ S & J & J \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 2 & L & L \\ L_n & 1 & 1 \end{Bmatrix} Y_n$$

Т.о. зависимость  $d_2(J, L)$  от  $J$  определяется множителем:

$$(29) \quad d_2(J, L) = (-1)^{J+S} \sqrt{\frac{J(2J+1)}{(2J+3)(J+1)}} \begin{Bmatrix} S & J & L \\ 2 & L & J \end{Bmatrix} Y(L)$$



Основные неравенства к амплитудам, которые считается

программа INE

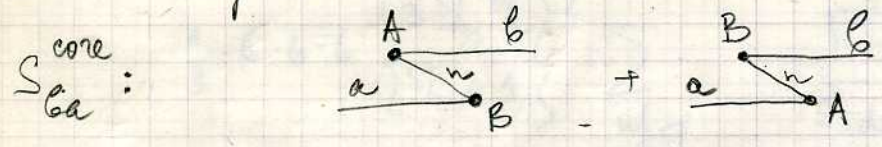
(есть система неравенств для  $T_L$ )

Мы считаем амплитуду:

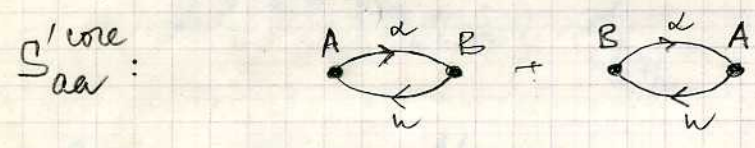
$$S_{ba} = \frac{\langle \beta | A | \alpha \rangle \langle \alpha | B | a \rangle}{E_a - E_n} + \frac{\langle \beta | B | n \rangle \langle \alpha | A | a \rangle}{E_b - E_n}$$

Программа INE суммирует по валентным состояниям  $|n\rangle$

Поэтому к результату INE надо добавить суммирование по возбужденным состояниям. На диаграммном языке неравенства имеют вид:



Для диагональных амплитуд ( $a=b$ )  $\exists$  еще одна неравенства:



Выпишем эти амплитуды:

$$S_{ba}^{core} = - \frac{\langle \beta | A | n \rangle \langle \alpha | B | a \rangle}{E_n - E_a} - \frac{\langle \beta | B | n \rangle \langle \alpha | A | a \rangle}{E_n - E_b}$$

$$S_{aa}^{core} = \sum_{n, \alpha} \left[ \frac{\langle \alpha | A | a \rangle \langle \alpha | B | n \rangle}{E_n - E_a} + \frac{\langle \alpha | B | a \rangle \langle \alpha | A | n \rangle}{E_n - E_a} \right]$$

В частности такие неравенства появляются при непертурбационности. В этом случае  $S_{aa}^{core}$  дает непертурбационность осколка, а  $S_{aa}$  - восстанавливает принцип Паули.

Выпишем явные формулы где  $\alpha_0^{core} =$

$$\alpha_0^{core} = \alpha_{ZZ}^{core} = -2 \sum_{n, \alpha} \frac{|\langle n | dz | \alpha \rangle|^2}{E_n - E_a} = -2 \sum_{n, \alpha} \begin{pmatrix} j_{n1} & j_{n2} \\ -m_{n0} & m_{n\alpha} \end{pmatrix}^2 \frac{\langle n || d || \alpha \rangle^2}{E_n - E_a}$$

$$= -\frac{2}{3} \sum'_{n, \alpha} \frac{\langle n || d || \alpha \rangle^2}{E_n - E_a}, \text{ где } \sum' \text{ не включает суммирование по } m_n \text{ и } m_\alpha$$



исправлен индекс. МЭ у КрТ 57:

$$\alpha_{\text{core}} = -\frac{2}{3} \sum'_{n,d} (2j_{n+1})(2j_d+1) \frac{l_n+l_d+1}{2} \left\{ \begin{matrix} l_n & j_n & 1/2 \\ j_n & l_n & 1 \end{matrix} \right\}^2 \frac{R_{nd}^2}{\epsilon_n - \epsilon_d}$$

$$= -\frac{1}{3} \sum'_{n,d} (2j_{n+1})(2j_d+1)(l_n+l_d+1) \left\{ \begin{matrix} l_n & j_n & 1/2 \\ j_n & l_n & 1 \end{matrix} \right\}^2 \frac{R_{nd}^2}{\epsilon_n - \epsilon_d}$$

Для истрефа берем сумм по конфигурациям оболочки  $d^{10} 6 \text{ Te}$  (при этом, 6s - орбиталь замощенная)

$$\alpha(Sd_{5/2}) = -\frac{1}{3} \cdot 6 \cdot 4 \cdot 4 \left\{ \begin{matrix} 1 & 3/2 & 1/2 \\ 5/2 & 2 & 1 \end{matrix} \right\}^2 \sum_{np_{3/2}} \frac{R_{Sd_{5/2} np_{3/2}}^2}{\epsilon_{Sd_{5/2}} - \epsilon_{np_{3/2}}}$$

$$-\frac{1}{3} \cdot 6 \cdot 6 \cdot 6 \left\{ \begin{matrix} 3 & 5/2 & 1/2 \\ 5/2 & 2 & 1 \end{matrix} \right\}^2 \sum_{nf_{5/2}} \frac{R_{Sd_{5/2} nf_{5/2}}^2}{\epsilon_{Sd_{5/2}} - \epsilon_{nf_{5/2}}}$$

$$-\frac{1}{3} \cdot 6 \cdot 8 \cdot 6 \left\{ \begin{matrix} 3 & 7/2 & 1/2 \\ 5/2 & 2 & 1 \end{matrix} \right\}^2 \sum_{nf_{7/2}} \frac{R_{Sd_{5/2} nf_{7/2}}^2}{\epsilon_{Sd_{5/2}} - \epsilon_{nf_{7/2}}}$$

$$= -\frac{8}{5} \sum_{np_{3/2}} - \frac{4}{35} \sum_{nf_{5/2}} - \frac{16}{7} \sum_{nf_{7/2}}$$

$$\alpha(Sd_{3/2}) = -\frac{1}{3} \cdot 4 \cdot 2 \cdot 4 \left\{ \begin{matrix} 1 & 1/2 & 1/2 \\ 3/2 & 2 & 1 \end{matrix} \right\}^2 \sum_{np_{1/2}} - \frac{1}{3} \cdot 4 \cdot 4 \cdot 2 \left\{ \begin{matrix} 1 & 3/2 & 1/2 \\ 3/2 & 2 & 1 \end{matrix} \right\}^2 \sum_{np_{3/2}} - \frac{1}{3} \cdot 4 \cdot 6 \cdot 6 \left\{ \begin{matrix} 3 & 5/2 & 1/2 \\ 3/2 & 2 & 1 \end{matrix} \right\}^2 \sum_{nf_{3/2}}$$

$$= -\frac{8}{9} \sum_{np_{1/2}} - \frac{4}{45} \sum_{np_{3/2}} - \frac{8}{5} \sum_{nf_{3/2}}$$

Численные значения берем из RPA.RES от 16/04/98:

$$\alpha(Sd_{5/2}) = -\frac{8}{5} \left[ \frac{(0.64)^2}{-1.07+0.17} + \frac{(0.18)^2}{-1.07+0.06} + \frac{(0.16)^2}{-1.07+0.02} + \frac{(0.18)^2}{-1.07-0.05} + \frac{(0.15)^2}{-1.07-0.15} + \frac{(0.12)^2}{-1.07-0.29} \right]$$

$$-\frac{4}{35} \left[ \frac{(0.05)^2}{-1.07-0.01} + \frac{(0.13)^2}{-1.07-0.16} + \frac{(0.22)^2}{-1.07-0.38} + \frac{(0.26)^2}{-1.07-0.56} + \frac{(0.20)^2}{-1.07-0.98} \right]$$

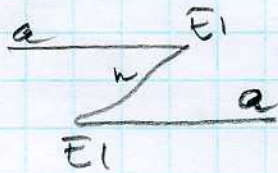
$$-\frac{16}{7} \left[ \frac{(0.05)^2}{-1.07-0.01} + \frac{(0.13)^2}{-1.07-0.14} + \frac{(0.20)^2}{-1.07-0.35} + \frac{(0.24)^2}{-1.07-0.53} + \frac{(0.19)^2}{-1.07-0.92} \right]$$

$$= +\frac{8}{5} \cdot 0.57 + \frac{4}{35} \cdot 1.1 + \frac{16}{7} \cdot 1.0 = 1.15$$



Основной вклад в т. конформность уровня

Диаграмма:



$$\alpha_2(a) = 4 \sqrt{\frac{5j_a(2j_a-1)}{6(2j_a+3)(2j_a+1)(j_a+1)}} \sum_n (-1)^{j_n+j_{n+1}} \left\{ \begin{matrix} j_a+1 & j_n \\ 1 & j_a \end{matrix} \right\} \frac{|\langle j_n || d || j_a \rangle|^2}{\epsilon_n - \epsilon_a} \frac{(-1)^{j_n}}{1}$$

$$\alpha_0(a) = \frac{-2}{3(2j_a+1)} \sum_n (-1)^{j_n} \frac{|\langle j_n || d || j_a \rangle|^2}{\epsilon_n - \epsilon_a}$$

1  
запись  
з/п/ок.



Comment 22/12/98

Коэффициент ~~атом~~ взаимодействия атом-стенка  $C_3$   
согласно PRA 55 2282 (Zeng-Chao, Dolgarno, Babb)

$$C_3 = \frac{1}{12} \langle 0 | \vec{R} \cdot \vec{R} | 0 \rangle$$

Программа INE вычисляет  $Y1 = \vec{R} | 0 \rangle$  и  $Y2 = \vec{R} | 2 \rangle$

Для  $Y2$  имеется разложение  $Y2J = |J\rangle \langle J | Y2\rangle$

Это позволяет вычислить  $C_3(2)$ :

$$\begin{aligned} \langle 2 | \vec{R} \cdot \vec{R} | 2 \rangle &= \sum_{J_n, q, m_n} (-1)^q (-1)^{J_2 - m_2} (-1)^{J_n - m_n} \begin{pmatrix} J_2 & 1 & J_n \\ -m_2 & q & m_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_n & 1 & J_2 \\ -m_n & q & m_2 \end{pmatrix} (-1)^{J_n - J_2} |\langle u | R | 2 \rangle|^2 \\ &= \frac{1}{2J_2 + 1} \sum_{J_n} |\langle u | R | 2 \rangle|^2 \end{aligned}$$

В результате:

$$C_3(2) = \frac{1}{12(2J_2 + 1)} \sum_n \begin{pmatrix} J_n & 1 & J_2 \\ -m_n & q & m_2 \end{pmatrix}^{-2} (Y2J_n)^2$$



# Решение неоднородного ур-ния (Программа INE)

Старые записи о неоднородном ур-нии утеряны (?), поэтому разбираемся заново.

1. Задача найти амплитуду:

$$A = \sum_n \frac{\langle X_2 | T_2 | n \rangle \langle n | T_1 | X_0 \rangle}{E_0 - E_n} \quad (1)$$

где  $|X_0\rangle, |X_2\rangle \in \text{пр. } S_0$  (энергия =  $p$ ,  $M = JM_0$ , файлы CONF.???)

а  $|n\rangle \in S_1$  (энергия =  $-p$ ,  $M = JM$ , файлы CONF.???)

Амплитуду (1) можно записать так:

$$\begin{cases} A = \langle X_2 | T_2 | X_1 \rangle \equiv \langle Y_2 | X_1 \rangle \\ (E_0 - H) | X_1 \rangle = T_1 | X_0 \rangle \equiv | Y_1 \rangle \end{cases} \quad (2)$$

Таким образом задача сводится к решению неоднородного ур-ния

## 2. Структура программы INE

(a) Программа использует файлы \*.INP, \*.DET, \*.XIJ, \*.JJJ, и CONF.XIJ. (\* = CONF, CONF $\emptyset$ ). Различные интерфейсы берутся из файла DTM.INT

(b) Программа Init0 ищет вектора  $X_0$  (init) и  $X_2$  (final)

(c) " " " " вектор вычисляет вектора  $Y_1$  и  $Y_2$ :

$$\begin{cases} |Y_1\rangle = T_1 |X_0\rangle \\ \langle Y_2| = \langle X_2| T_2 \end{cases} \quad \begin{matrix} \text{(b)} Y_2 \text{ определен} \\ \text{как бра вектор!} \end{matrix} \quad (3)$$

(d) Подпрограммы SolEq1 и SolEq4 решают неоднородную задачу:

$$|X_1\rangle = (E_0 - H)^{-1} |Y_1\rangle$$

причем при ключе ke=1 используется решение из INE.XIJ



е) Процедура  $P_{ij}$  раскладывает вектора  $|X1\rangle$  и  $\langle Y2|$  на компоненты с определенным полным моментом:

$$\begin{cases} |X1\rangle = |X1_{J0+1}\rangle + |X1_{J0}\rangle + |X1_{J0-1}\rangle \equiv X1J \\ \langle Y2| = \langle Y2_{J2+1}| + \langle Y2_{J2}| + \langle Y2_{J2-1}| \equiv Y2J \end{cases} \quad (4)$$

причем последние компоненты в правой части (4) заштрихованы для  $J0$  или  $J2 = 0, 1/2$ .

В Однако, заштрихованная нет если  $JM > J0-1$  или  $J2-1$ .

д) Процедура  $R_{dc} X1J$  преобразует массив  $X1J$  к виду, пригодному к использованию в ФТМ в качестве файла CONF1.X1J.

Для этого делается следующее преобразование:

$$X1J \equiv X1(J) \rightarrow \frac{X1(J)}{(-1)^{J-M} \begin{pmatrix} J & K & J0 \\ -M & 0 & M0 \end{pmatrix}} = \sum_{J_n=J} \frac{\langle n, J || d || J0 \rangle}{E_0 - E_n} |n, J\rangle \quad (5)$$

где  $K=1$  - ранг оператора  $T1$ .

В Для случая  $T1 = H_p$ , преобразование (5) не делается.

Три вектора  $X1(J)$  записываются в файл INE-J.X1J

В Этот файл можно использовать в качестве CONF1.X1J для ФТМ.

г) Процедура  $P_{in}$  ищет раскладку по конфигурациям для векторов  $X1, Y1$  и  $Y2$ , вычисляет для них  $\langle J^2 \rangle$  а также вычисляет приведенные МЭ  $\langle X2 || T2 || n \rangle$  и  $\langle n || T1 || X0 \rangle$  для сравнения с ФТМ.

В Вычисление этих МЭ проводится путем вычисления  $\langle Y2 || n \rangle$  и  $\langle n || X1 \rangle$  и перехода к приведенным МЭ.

Поэтому это дает тест правильности решения неоднородного ур-ния.



Разложение вектора на компоненты,  
коммутирующие с  $\hat{J}^2$

17/12/97

Предполагаем, что вектор  $X$  является суммой трех компо-  
нент:

$$|X\rangle = |X_{j-1}\rangle + |X_j\rangle + |X_{j+1}\rangle \quad (1)$$

Как найти вектора  $X_j$  ?

Введем операторы  $T_j$ , такие, что

$$T_{j'} |X\rangle = |X_{j'}\rangle, \quad j' = j-1, j, j+1 \quad (2)$$

Явный вид оператора  $T_{j-1}$ :

$$\begin{aligned} T_{j-1} &= \frac{1}{N_{j-1}} [\hat{J}^2 - j(j+1)] [\hat{J}^2 - (j+1)(j+2)] = \\ &= \frac{1}{N_{j-1}} (\hat{J}^4 - 2j(j+1)\hat{J}^2 + j(j+1)^2(j+2)) \end{aligned} \quad (3)$$

Действуя оператором  $T_{j-1}$  на  $X_{j-1}$  определяем нормировку  $N_{j-1}$ :

$$\begin{aligned} N_{j-1} &= [(j-1)j - j(j+1)] [(j-1)j - (j+1)(j+2)] = [j^2 - j - j^2 - j] [j^2 - j - j^2 - 3j - 2] \\ &= 4j(2j+1) \end{aligned} \quad (4)$$

$$\text{Итак } T_{j-1} = \frac{1}{4j(2j+1)} [\hat{J}^4 - 2j(j+1)\hat{J}^2 + j(j+1)^2(j+2)] \quad (5)$$

Из (3) и (5) видно, что этот оператор определен только  
для  $j > 0$ . Для  $j=0, \frac{1}{2}$  необходимость в этом операторе  
нет т.к. член  $|X_{j-1}\rangle$  записывается автоматически



Найдем оператор  $T_j$ :

$$T_j = \frac{1}{N_j} [\hat{J}^2 - j(j-1)] [\hat{J}^2 - (j+1)(j+2)] = \frac{1}{N_j} [\hat{J}^4 - (j^2 - j + j^2 + 3j + 2) \hat{J}^2 + j(j^2 - 1)(j+2)] \quad (6)$$
$$= \frac{1}{N_j} [\hat{J}^4 - 2(j^2 + j + 1) \hat{J}^2 + j(j^2 - 1)(j+2)],$$

$$N_j = [j(j+1) - j(j-1)] [j(j+1) - (j+1)(j+2)] = 2j(j+1)(j - j - 2) = -4j(j+1) \quad (7)$$

$$\Rightarrow T_j = \frac{-1}{4j(j+1)} [\hat{J}^4 - 2(j^2 + j + 1) \hat{J}^2 + j(j^2 - 1)(j+2)] \quad (8)$$

Снова этот оператор определен только если  $j > 0$

Для случая  $j = 0, \frac{1}{2}$  надо использовать более простой оператор

$$T_{j=0} = \frac{1}{N_{j=0}} [\hat{J}^2 - (j+1)(j+2)] = \frac{-1}{2(j+1)} [\hat{J}^2 - (j+1)(j+2)] \quad (8a)$$

Найдем  $T_{j+1}$ :

$$T_{j+1} = \frac{1}{N_{j+1}} [\hat{J}^2 - j(j-1)] [\hat{J}^2 - j(j+1)] = \frac{1}{N_{j+1}} [\hat{J}^4 - 2j^2 \hat{J}^2 + j^2(j^2 - 1)] \quad (9)$$

$$N_{j+1} = [j+1)(j+2) - j(j-1)] [(j+1)(j+2) - j(j+1)] = [j^2 + 3j + 2 - j^2 + j] 2(j+1) = 4(j+1)(2j+1) \quad (10)$$

$$\Rightarrow T_{j+1} = \frac{1}{4(j+1)(2j+1)} [\hat{J}^4 - 2j^2 \hat{J}^2 + j^2(j^2 - 1)] \quad (11)$$

Формально этот оператор определен для всех  $j$ , но для

$j = 0, \frac{1}{2}$  он не имеет, т.к. включает лишнее умножение.

Поэтому оформим его оператором:

$$T_{j=0+1} = \frac{1}{2(j+1)} [\hat{J}^2 - j(j+1)] \quad (11a)$$



Надо иметь в виду, что в файле CONF.JJJ  
содержится МЭ оператора  $4J^2$ . Поэтому перепишем  
(4a) - (4c) в терминах  $Y_1$  и  $Z_1$ :

$$X_{J+1}^1 = \frac{Z_1 - 2(2J)^2 Y_1 + (2J)^2 ((2J)^2 - 4) X_1}{32(2J+2)(2J+1)}$$

$$X_J^1 = - \frac{Z_1 - 2((2J)^2 + 2(2J+4)) Y_1 + 2J((2J)^2 - 4)(2J+4) X_1}{16(2J)(2J+2)}$$

$$X_{J-1}^1 = \frac{Z_1 - 2(2J+2)^2 Y_1 + (2J)(2J+2)^2 (2J+4) X_1}{32(2J)(2J+1)}$$



Проверим, к чему убивают наименее  
высоких моментов.

$$\square \quad X_1 = X_J + X_{J+2} + X_{J+4} \quad (J = 2j)$$

Тогда

$$Y_1 = 4\hat{J}^2 X_1 = J(J+2)X_J + (J+2)(J+4)X_{J+2} + (J+4)(J+6)X_{J+4}$$

$$Z_1 = J^2(J+2)^2 X_J + (J+2)^2(J+4)^2 X_{J+2} + (J+4)^2(J+6)^2 X_{J+4}$$

$$-16J(J+2)\hat{X}_J^1 = Z_1 - 2(J^2+2J+4)Y_1 + J(J^2-4)(J+4)X_1$$

$$= \left[ J^2(J+2)^2 - 2(J^2+2J+4)J(J+2) + J(J^2-4)(J+4) \right] X_J$$

$$+ \left[ (J+2)^2(J+4)^2 - 2(J^2+2J+4)(J+2)(J+4) + J(J^2-4)(J+4) \right] X_{J+2}$$

$$+ \left[ (J+4)^2(J+6)^2 - 2(J^2+2J+4)(J+4)(J+6) + J(J^2-4)(J+4) \right] X_{J+4}$$

$$= J(J+2) \left[ J^2+2J-2J^2-4J-8 + (J-2)(J+4) \right] X_J$$

$$+ (J+2)(J+4) \left[ (J+2)(J+4) - 2J^2-4J-8 + J^2-2J \right] X_{J+2}$$

$$+ (J+4) \left[ (J+6) \left[ (J+4)(J+6) - 2J^2-4J-8 \right] + J^2-4J \right] X_{J+4}$$

$$= J(J+2) \left[ -J^2-2J-8 + J^2+2J-8 \right] X_J$$

$$+ (J+2)(J+4) \left[ J^2+6J+8 - 2J^2-4J-8 + J^2-2J \right] X_{J+2}$$

$$+ (J+4) \left[ (J+6) \left( J^2+10J+24 - 2J^2-4J-8 \right) + J^2-4J \right] X_{J+4}$$

$$= -16J(J+2)X_J + 0 X_{J+2} + (J+4) \left[ (J+6)(-J^2+6J+16) + J^2-4J \right] X_{J+4}$$

$$= -16J(J+2)X_J + (J+4) \left( -J^3-6J^2+6J^2+36J+16J+96 + J^2-4J \right) X_{J+4}$$

$$= -16J(J+2)X_J + (J+4)(48J+96)X_{J+2} = -16J(J+2)X_J + 48(J+4)(J+2)X_{J+4}$$



Т.о. мы получаем

$$X_j^1 = X_j - 3 \frac{(j+2)(j+4)}{j(j+2)} X_{j+4}$$

$$\text{для } j = \frac{1}{2} \quad j = 1 \quad X_j^1 = X_j - \frac{3 \cdot 15}{3} X_{j+4} = X_1 - 15 X_5$$

Видно, что эта процедура не работает, т.к. она уменьшает вклады высших моментов!

Я бы вам указал на то, что такие моменты существуют в векторе  $X_1$  является нарушением условия

$$\|X_1\| \geq \|X_{j-1}^1\| + \|X_j^1\| + \|X_{j+1}^1\|$$