
ФИЗИЧЕСКИЕ НАУКИ

УДК 539.1

DOI 10.25587/2222-5404-2023-20-3-20-32

Запаздывающие взаимодействия электронов

И. С. Кычкин ✉, *В. И. Сивцев*

СВФУ им. М.К. Аммосова, г. Якутск, Россия

✉ kof_fti@mail.ru

Аннотация. Многоэлектронные атомы и ионы, особенно ионы с высокой степенью ионизации, наблюдаемые в естественных и лабораторных условиях, являются релятивистскими системами, в которых орбитальное квантовое число теряет свой обычный смысл, становится плохим квантовым числом и в этом случае возникает необходимость релятивистского подхода к исследованию этих систем, т. е. работа в естественном для релятивизма j -представлении. Это требует учета не только электрических, магнитных, но и запаздывающих взаимодействий между электронами таких систем за счет конечности скорости света в вакууме. В статье релятивистский оператор энергии запаздывающих взаимодействий между электронами в приближении $\frac{v^2}{c^2}$ (часть оператора Брейта), используя метод неприводимых тензорных операторов Ракаха, приведен к двум разным видам, выраженным через стандартные неприводимые тензорные операторы, используемые в теории атома, ядра, физики твердого тела. Полученные выражения для оператора энергии запаздывающих взаимодействий представлены в виде, естественном для релятивистского подхода, т. е. в j -представлении. То, что оператор энергии запаздывающих взаимодействий представляет двухэлектронное взаимодействие, представляющее собой прямое произведение операторов-матриц в представлении Паули и затрагивающее разные электроны, позволяет представить двухэлектронную волновую функцию как прямое произведение одноэлектронных волновых функций – биспиноров дираковского типа и все это позволяет использовать метод неприводимых тензорных операторов Ракаха в вычислении матричного элемента. Матричные элементы оператора энергии запаздывающих взаимодействий представлены через стандартные величины теории атома и ядра.

Ключевые слова: оператор запаздывающих взаимодействий, j -представление, оператор Брейта, неприводимый тензорный оператор, уравнения Дирака, матрицы Дирака, матрица Паули, символ Вигнера.

Для цитирования: Кычкин И. С., Сивцев В. И. Запаздывающие взаимодействия электронов. Вестник СВФУ. 2023, Т. 20, №3. С. 20–32. DOI: 10.25587/2222-5404-2023-20-3-20-32

Retarded interactions of electrons

I. S. Kychkin ✉, V. I. Sivtsev

M.K. Ammosov North-Eastern Federal University, Yakutsk, Russia

✉ kof_fti@mail.ru

Abstract. Multielectron atoms and ions, especially ions with a high degree of ionization, observed in natural and laboratory conditions, are relativistic systems in which the orbital quantum number loses its ordinary meaning. It becomes a bad quantum number, and in this case, there is a need for a relativistic approach to study these systems, i.e., research in the j -representation natural for relativism. It requires considering not only electrical and magnetic, but also retarded interactions between the electrons of such systems due to the finiteness of the speed of light in a vacuum. In the article, the relativistic energy operator of retarded interactions between electrons in the $\frac{v^2}{2}$ approximation (part of the Breit operator) is reduced to two different forms using the method of Racah irreducible tensor operators. These forms are expressed in terms of standard irreducible tensor operators used in the theory of the atom, nucleus, and solid-state physics. The resulting expressions for the operator of the energy of retarded interactions are presented in a form natural for the relativistic approach, i.e. in j - representation. The energy operator of the retarded interactions is a two-electron interaction that is a direct multiplication of operators (matrices in the Pauli representation) which affects different electrons. Therefore, the two-electron wave function is represented as a direct multiplication of one-electron wave functions, that is Dirac-type bispinors. All this allows using the method of Racah irreducible tensor operators in calculating the matrix element. The matrix elements of the energy operator of the retarded interactions are represented in terms of the standard values of the atom and nucleus theory.

Keywords: retarded interaction operator, j -representation, Breit operator, tensor operator, Dirac equations, Dirac matrices, Pauli matrix, Wigner symbol.

For citation: Prokojev A. R., Neustroev E. P., Loskin N. N., Vinokurov P. V., Evseev Z. I., Popov D. N. Turbostratic graphene from plastic waste. 2023, Vol. 20, No. 3. Pp. 20–32. DOI: 10.25587/2222-5404-2023-20-3-20-32

Введение

В своих работах П. Дирак получил релятивистски инвариантные квантовомеханические уравнения электрона, представляющие собой систему однородных дифференциальных уравнений первого порядка для двух спинорных функций φ и χ [1–3]

$$\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix},$$

которые можно представить в виде одного уравнения – уравнения Дирака. В этих же работах была разработана релятивистская теория одноэлектронного водородоподобного атома. В работах [4–6] Г. Брейт получил формулу для энергии взаимодействия электронов, ответственных не только за электростатические, но и за магнитные и запаздывающие взаимодействия. На основании этих работ начались и продолжаются до сих пор исследования энергетических спектров многоэлектронных атомов. Были созданы разные школы для этих исследований, разные подходы, разные модели. В таких

работах был замечен значительный косвенный релятивистский эффект для внешних (даже нерелятивистских) электронов – ослабление связывания электронов с относительно большими угловыми моментами по сравнению с результатами нерелятивистского подхода из-за более эффективного экранирования заряда ядра электронами с меньшими угловыми моментами. Из последних работ можно отметить работы [7–14]. Во всех этих работах исследования велись в базе детерминантных функций, что приводило к существенному возрастанию количества базисных состояний, число которых чрезвычайно быстро увеличивалось с усложнением электронных конфигураций исследуемых многоэлектронных атомов и ионов.

В данной статье рассматриваются матричные элементы оператора энергии запаздывающих взаимодействий между электронами относительно любых двухэлектронных конфигураций в j -представлении в базе релятивистских волновых функций – биспиноров электронов дираковского типа.

1. Оператор энергии запаздывающих взаимодействий

Используя связь между матрицей рассеяния $S^{(2)}$ второго порядка и матрицей энергии эффективного взаимодействия V_{12} между электронами [3]:

$$\langle f|S^{(2)}|i\rangle = -2\pi i\delta(\omega_A + \omega_B - \omega_C - \omega_D)\langle f|V_{12}|i\rangle, \quad (1.1)$$

где $|i\rangle(\langle f|)$ – кет(бра) – векторы электронных состояний, а A, B (C, D) относятся к начальным (конечным) состояниям взаимодействующих электронов, можно получить

$$\langle f|V_{12}|i\rangle = \alpha \langle \psi_C \psi_D | \left(\frac{1 - \vec{\alpha}_1 \cdot \vec{\alpha}_2}{r_{12}} \right) \exp\left(\frac{i}{c} \omega_{AC} \cdot r_{12}\right) | \psi_A \psi_B \rangle. \quad (1.2)$$

Здесь α – постоянная тонкой структуры, $\vec{\alpha}_1, \vec{\alpha}_2$ – матрицы Дирака ($\vec{\sigma}$ – матрица Паули):

$$\begin{aligned} \vec{\alpha} &= \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{\sigma} = \sigma_1 \vec{i} + \sigma_2 \vec{j} + \sigma_3 \vec{k}, \\ \sigma_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (1.3)$$

$\psi_A, \psi_B (\psi_C, \psi_D)$ – функции состояний электронов в начальном (конечном) состояниях,

$$\omega_{AC} = \omega_{BD} = |\omega_A - \omega_C| = |\omega_D - \omega_B| = \frac{|E_A - E_C|}{\hbar} = \frac{|E_D - E_B|}{\hbar}, \quad (1.4)$$

$$r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|.$$

Правая часть (1.2) зависит от энергий E_A, E_B, E_C, E_D взаимодействующих электронов в начальном и конечном состояниях, т. е. соотношение (1.2) не позволяет получить явную зависимость энергии взаимодействия электронов от расстояния r_{12} между ними. Этому мешает множитель

$$\frac{\exp\left(\frac{i}{c} \omega_{AC} \cdot r_{12}\right)}{r_{12}}, \quad (1.5)$$

возникающий из-за конечности скорости распространения взаимодействия ($c \neq \infty$) и которого нет в нерелятивистской механике:

$$\exp\left(\frac{i}{c}\omega_{AC} \cdot r_{12}\right) \rightarrow 1, \text{ при } c \rightarrow \infty, \quad (1.6)$$

т. е. множитель (1.5) является фактором запаздывания взаимодействия из-за конечности скорости света в вакууме.

Фактор запаздывания (1.5) можно разложить в убывающий ряд по степеням $\frac{\omega \cdot r}{c} \sim \frac{v}{c}$:

$$\frac{\exp\left(\frac{i}{c}\omega_{AC} \cdot r_{12}\right)}{r_{12}} = \frac{1}{r_{12}} + i\left(\frac{\omega_{AC}}{c}\right) - \frac{1}{2}\left(\frac{\omega_{AC}}{c}\right)^2 r_{12} + \dots \quad (1.7)$$

В случае необходимой точности $\frac{v^2}{c^2}$ достаточно оставить три первых члена в (1.7). Тогда с учетом того, что

$$\langle CD | \vec{\alpha}_1 \cdot \vec{\alpha}_2 | AB \rangle \sim \frac{v^2}{c^2},$$

а также принимая во внимание ортонормированность функций $\psi_A, \psi_B, \psi_C, \psi_D$ состояний электронов, можно получить оператор V энергии взаимодействия электронов как функцию от расстояния r_{12} между электронами (в а.е.):

$$V_{12} = \frac{1}{r_{12}} - \frac{(\vec{\alpha}_1 \cdot \vec{\alpha}_2)}{r_{12}} - \frac{(\vec{\alpha}_1 \cdot \vec{\nabla}_1)(\vec{\alpha}_2 \cdot \vec{\nabla}_2)r_{12}}{2}. \quad (1.8)$$

Здесь первый член представляет кулоновское взаимодействие электронов, второй – магнитное, а третий член описывает запаздывающее взаимодействие электронов (в а. е.):

$$\begin{aligned} H_{12}^e &= \frac{1}{r_{12}}, \\ H_{12}^m &= -\frac{(\vec{\alpha}_1 \cdot \vec{\alpha}_2)}{r_{12}}, \\ H_{12}^r &= -\frac{(\vec{\alpha}_1 \cdot \vec{\nabla}_1)(\vec{\alpha}_2 \cdot \vec{\nabla}_2)r_{12}}{2}. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Здесь и далее оператор V_{12} энергии взаимодействия обозначен как часть гамильтониана H_{12} .

Надо заметить, что операторы градиента $\vec{\nabla}_1$ и $\vec{\nabla}_2$ действуют только на меж-электронное расстояние r_{12} , а на функцию состояния электронов не действуют при вычислении матричных элементов. С учетом этого оператор энергии H_{12}^r (1.9) запаздывающих взаимодействий может быть приведен к другому виду

$$H_{12}^r = \frac{(\vec{\alpha}_1 \cdot \vec{\alpha}_2)}{2r_{12}} - \frac{(\vec{\alpha}_1 \cdot \vec{r}_{12})(\vec{\alpha}_2 \cdot \vec{r}_{12})}{2r_{12}^3}. \quad (1.10)$$

Кулоновское и магнитное взаимодействия электронов в атомах были рассмотрены в работах [15, 16].

2. Оператор энергии запаздывающих взаимодействий в неприводимой форме

В соответствии с двумя разными видами (1.9) и (1.10) оператора энергии запаздывающих взаимодействий приведем два разных определения этого оператора через неприводимые тензорные операторы.

2.1 Преобразуем оператор H_{12}^r (1.9) запаздывающих взаимодействий к виду через неприводимые тензорные операторы, связанные в удобном для релятивистского рассмотрения способом, чтобы можно было использовать квантовомеханический аппарат углового момента [17].

Индексы 1 и 2 заменим на i и j , удобные при переходе к рассмотрению многоэлектронных атомов, т. е. оператор H_{ij}^r запаздывающих взаимодействий между электронами i и j имеет вид:

$$H_{ij}^r = - \frac{(\vec{\alpha}_i \cdot \vec{\nabla}_i)(\vec{\alpha}_j \cdot \vec{\nabla}_j) r_{ij}}{2} \quad (2.1)$$

или

$$H_{ij}^r = - \frac{(\alpha_i^{(1)} \cdot \nabla_i^{(1)})(\alpha_j^{(1)} \cdot \nabla_j^{(1)}) r_{ij}}{2} \quad (2.2)$$

через скалярное произведение неприводимых тензорных операторов $\alpha^{(1)}$ и $\nabla^{(1)}$ первого ранга.

Известно, что $(2k+1)$ величин $C_q^{(k)} Y_q^{(k)}$ принимает $(2k+1)$ значений $-k, -k+1, \dots, +k$, связанные со сферической функцией $Y_q^{(k)}$ соотношением

$$C_q^{(k)} = \sqrt{\frac{4\pi}{2k+1}} Y_q^{(k)}, \quad (2.3)$$

образуют неприводимый тензорный оператор k -го ранга. Межэлектронное расстояние r_{ij} можно разложить по скалярным произведениям этих операторов [18]:

$$r_{ij} = \sum_k \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} \left(\frac{r_{<}^2}{2k+3} - \frac{r_{>}^2}{2k-1} \right) (C_i^{(k)} \cdot C_j^{(k)}), \quad (2.4)$$

где $r_{<} (r_{>})$ – меньший (бóльший) из r_i или r_j (r_i – расстояние от ядра до i -го электрона).

Подставив разложение (2.4) межэлектронного расстояния r_{ij} в (2.2), подействовав операторами градиентов $\nabla_i^{(1)}$ и $\nabla_j^{(1)}$ на правую часть, переходя к естественному для релятивистского подхода связыванию рангов, еще раз подействовав появляющимися по ходу дифференцированиями по r_i, r_j , явно просуммировав по двум из трех изменяющихся рангов k, k', K , получим:

$$H_{ij}^r = \frac{1}{2} \sum_k \left\{ \frac{[k]^2}{[k-1]} (1, k, k-1)^2 f_{1i}(k-1) f_{1j}(k-1) \varphi(k-1) (\alpha C, k, k, k-1) - \right. \\ \left. - \frac{[k, k-2]}{[k-1]} (1, k, k-1) (1, k-2, k-1) \cdot f_{1i}(k-1) f_{2j}(k) \varphi(k-1) \cdot (\alpha C, k, k-2, k-1) - \right.$$

$$-\frac{[k, k+2]}{[k+1]}(1, k, k+1)(1, k+2, k+1) \cdot f_{2i}(k+2) f_{1j}(k+1) \varphi(k+1) \cdot (\alpha C, k, k+2, k+1) + \\ + \frac{[k]^2}{[k+1]}(1, k, k+1)^2 f_{2i}(k+2) f_{2j}(k+1) \varphi(k+1) \cdot (\alpha C, k, k, k+1) \Big\}. \quad (2.5)$$

Здесь

$$f_{1i}(k) = \left(\frac{\partial}{\partial r_i} - \frac{k}{r_i} \right),$$

$$f_{2i}(k) = \left(\frac{\partial}{\partial r_i} + \frac{k}{r_i} \right),$$

$$(\alpha C, k_1, k_2, k_3) = \left(\left[\alpha_i^{(1)} \times C_i^{(k_1)} \right]^{(k_3)} \cdot \left[\alpha_j^{(1)} \times C_j^{(k_2)} \right]^{(k_3)} \right),$$

$$(1, k_1, k_2) = \begin{pmatrix} 1 & k_1 & k_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\varphi(k) = \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} \left(\frac{r_{<}^2}{2k+3} - \frac{r_{>}^2}{2k-1} \right), \quad (2.6)$$

где $\begin{pmatrix} 1 & k_1 & k_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ – символ (коэффициент) Вигнера [17].

2.2. Рассмотрим оператор H_{12}^r (1.10)

$$H_{ij}^r = \frac{(\alpha_i^{(1)} \cdot \alpha_j^{(1)})}{2r_{ij}} - \frac{(\alpha_i^{(1)} \cdot r_{ij}^{(1)}) (\alpha_i^{(1)} \cdot r_{ij}^{(1)})}{2r_{ij}^3}. \quad (2.7)$$

Операторы $\alpha^{(1)}$ и $r^{(1)}$ коммутативны, поэтому второе операторное выражение в (2.7) можно привести с помощью матриц преобразования к виду, естественному для релятивистского подхода и в результате получим:

$$H_{ij}^r = \frac{(\alpha_i^{(1)} \cdot \alpha_j^{(1)})}{3r_{ij}} - \frac{1}{2r_{ij}^3} \left(\left[\alpha_i^{(1)} \times \alpha_j^{(1)} \right]^{(2)} \cdot \left[r_{ij}^{(1)} \times r_{ij}^{(1)} \right]^{(2)} \right). \quad (2.8)$$

Воспользуемся разложением [18]

$$\frac{[r_{ij}^{(1)} \times r_{ij}^{(1)}]^{(2)}}{r_{ij}^3} = - \sum_k \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} \left\{ \left(\frac{8k(k+1)(2k+1)}{15(2k-1)(2k+3)} \right)^{1/2} \cdot [C_i^{(k)} \times C_j^{(k)}]^{(2)} + \right. \\ \left. + \left(\frac{k(k-1)(2k-3)(2k+1)}{5(2k-1)} \right)^{1/2} \cdot [C_{<}^{(k-2)} \times C_{>}^{(k)}]^{(2)} - \right.$$

$$-\left(\frac{(k+1)(k+2)(2k+1)(2k+5)}{2(2k+3)}\right)^{1/2} \cdot \left[C_{<}^{(k)} \times C_{>}^{(k+2)} \right]^{(2)} \Bigg\}. \quad (2.9)$$

Подставив (2.9) в (2.8) и,

- 1) пользуясь матрицами преобразования порядка связывания операторов;
- 2) пользуясь правилами отбора для bj -коэффициентов;
- 3) подставив алгебраические выражения для bj -коэффициентов,

окончательно получим другой вид оператора энергии запаздывающих взаимодействий:

$$\begin{aligned} H_{ij}^r = \sum_k \Bigg\{ & \left[\frac{k}{2k-1} (\alpha C, k, k, k-1) + \frac{k+1}{2k+3} (\alpha C, k, k, k+1) \right] \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} + \\ & + \frac{((k+2)(k+1)(2k+1)(2k+5))^{1/2}}{2(2k+3)} \cdot \left[(\alpha C, k, k+2, k+1) \frac{r_i^k}{r_j^{k+1}} \left(\frac{r_i^2}{r_j^2} - 1 \right) + \right. \\ & \left. + (\alpha C, k+2, k, k+1) \frac{r_j^k}{r_i^{k+1}} \left(\frac{r_j^2}{r_i^2} - 1 \right) \right] \Bigg\}. \quad (2.10) \end{aligned}$$

Два разных вида (2.5) и (2.10) оператора H^r запаздывающих взаимодействий могут привести к разным результатам из-за совершенно разных зависимостей от угловых и радиальных переменных, на что сильно влияет распределение электронных плотностей вне ядра атома.

3. Двухэлектронные матричные элементы оператора энергии запаздывающих взаимодействий

Двухэлектронный оператор $L_1 \cdot L_2$, действующий на разные электроны 1 и 2 и равный любому произведению операторов (скалярное, векторное, тензорное)

$$L_1 = \begin{pmatrix} A_1 & B_1 \\ C_1 & D_1 \end{pmatrix}, L_2 = \begin{pmatrix} A_2 & B_2 \\ C_2 & D_2 \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

определяется как прямое произведение этих операторов – матриц [15]:

$$L_1 \cdot L_2 = \begin{pmatrix} A_1 & B_1 \\ C_1 & D_1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_2 & B_2 \\ C_2 & D_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1 A_2 & A_1 B_2 & B_1 A_2 & B_1 B_2 \\ A_1 C_2 & A_1 D_2 & B_1 C_2 & B_1 D_2 \\ C_1 A_2 & C_1 B_2 & D_1 A_2 & D_1 B_2 \\ C_1 C_2 & C_1 D_2 & D_1 C_2 & D_1 D_2 \end{pmatrix}, \quad (3.2)$$

т. е. представляет собой оператор-матрицу порядка $4 = 2^2$ в представлении матриц Паули или порядка $16 = 4^2$ в представлении матриц Дирака.

Оператор (2.5) запаздывающих взаимодействий после подстановки алгебраических выражений коэффициентов Вигнера может быть представлен в виде оператора-матрицы (3.2), в которой элементы только второстепенной диагонали отличны от нуля:

$$B_1 B_2 = B_1 C_2 = C_1 B_2 = C_1 C_2 = {}_{\sigma} H_{ij}^r =$$

$$= -\frac{1}{2} \sum_{m,n=1}^2 \sum_k \frac{1}{[k]^2} \left(O_{mi}^{(k)} \cdot O_{nj}^{(k)} \right) \phi_{mi} \cdot \phi_{nj} \cdot \varphi(k). \quad (3.3)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \phi_{1i} &= \frac{\partial}{\partial r_i}, & \phi_{1j} &= \frac{\partial}{\partial r_j}, \\ \phi_{2i} &= \frac{1}{r_i}, & \phi_{2j} &= \frac{1}{r_j}, \end{aligned} \quad (3.4)$$

а операторы $O_m^{(k)}$ ($m=1,2$) равны

$$\begin{aligned} O_{1i}^{(k)} &= \sqrt{(k+1)(2k+3)} \cdot (C\sigma, k+1, k) + \sqrt{k(2k-1)} \cdot (C\sigma, k-1, k), \\ O_{2i}^{(k)} &= (k+1) \sqrt{k(2k-1)} \cdot (C\sigma, k-1, k) - k \sqrt{(k+1)(2k+1)} \cdot (C\sigma, k+1, k), \end{aligned} \quad (3.5)$$

где

$$(C\sigma, k_1, k_2) = \left[C^{(k_1)} \times \sigma^{(1)} \right]^{(k_2)}. \quad (3.6)$$

Рассмотрим двухэлектронный релятивистский матричный элемент оператора энергии запаздывающих взаимодействий относительно двухэлектронных состояний

$$\begin{aligned} |12\rangle &= |n_1 l_1 j_1 n_2 l_2 j_2 J\rangle, \\ |34\rangle &= |n_3 l_3 j_3 n_4 l_4 j_4 J\rangle, \end{aligned} \quad (3.7)$$

волновые функции которых являются неантисимметризованными биспинорами [15]. Получаем

$$\begin{aligned} \langle 12 | H^r | 34 \rangle &= \frac{1}{2} (-1)^{j_3+j_4+J+1} \sum_k \frac{1}{[k]^2} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J \\ j_4 & j_3 & k \end{Bmatrix} \cdot \sum_{m,n=1}^2 \left\{ (-1)^{\beta_3+\beta_4} \cdot \right. \\ &\cdot \langle 1 \| O_m^{(k)} \| 3' \rangle \langle 4' \| O_n^{(k)} \| 2 \rangle^* \cdot R_k(mn; 12, 3'4') + \\ &+ (-1)^{\beta_2+\beta_3} \langle 1 \| O_m^{(k)} \| 3' \rangle \langle 4' \| O_n^{(k)} \| 2' \rangle^* \cdot R_k(mn; 12', 3'4) + \\ &+ (-1)^{\beta_1+\beta_4} \langle 1' \| O_m^{(k)} \| 3 \rangle \langle 4' \| O_n^{(k)} \| 2 \rangle^* \cdot R_k(mn; 1'2, 34') + \\ &\left. + (-1)^{\beta_1+\beta_2} \langle 1' \| O_m^{(k)} \| 3 \rangle \langle 4' \| O_n^{(k)} \| 2' \rangle^* \cdot R_k(mn; 1'2', 34) \right\}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Введенные здесь радиальные интегралы одного типа:

$$R_k(mn; 12, 34) = \int_0^\infty \int_0^\infty f(\lambda_1 | r_1) f(\lambda_2 | r_2) \phi_m \phi_n \varphi(k) f(\lambda_3 | r_1) f(\lambda_4 | r_2) r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2, \quad (3.9)$$

где

$$\lambda = nlj, \lambda' = nl'j, l' = 2j - l,$$

$$\beta = \frac{1}{2}(1 + l - l') \quad (3.10)$$

и $\lambda(\lambda')$ относится к большей (меньшей) компоненте $f(\lambda)(g(\lambda'))$ релятивистской одноэлектронной функции – биспинора. Здесь и дальше, где не указано специально, используются обозначения, введенные в [16].

Четыре вида радиального интеграла $R_k(mn; 12, 34)$ для определенных значений m и n после подстановки выражений $\phi_m, \phi_n, \varphi(k)$ и выполнения явно заданных операций дифференцирования, могут быть выражены через более простые радиальные интегралы:

$$\begin{aligned} R_k(11; 12, 34) &= \frac{k(k-1)}{[k-1]} R_{k-1}(12, 34) - \frac{(k+1)(k+2)}{[k+1]} R_{k+1}(12, 34), \\ R_k(12; 12, 34) &= \frac{(k+2)}{[k+1]} R_{k+1}^1(12, 34) - \frac{k}{[k-1]} R_{k-1}^1(12, 34) + \\ &+ \frac{(k-1)}{[k-1]} R_{k-1}^2(12, 34) - \frac{(k+1)}{[k+1]} R_{k+1}^2(12, 34), \\ R_k(21; 12, 34) &= -\frac{(k+1)}{[k+1]} R_{k+1}^1(12, 34) + \frac{(k-1)}{[k-1]} R_{k-1}^1(12, 34) + \\ &+ \frac{(k+2)}{[k+1]} R_{k+1}^2(12, 34) - \frac{k}{[k-1]} R_{k-1}^2(12, 34), \\ R_k(22; 12, 34) &= \frac{1}{[k+1]} R_{k+1}(12, 34) - \frac{1}{[k-1]} R_{k-1}(12, 34). \end{aligned} \quad (3.11)$$

Здесь

$$R_k(12, 34) = R_k^1(12, 34) + R_k^2(12, 34),$$

$$R_k(12, 34) = \left\langle 12 \left| \frac{r_{<}^k}{r_{<+1}^k} \right| 34 \right\rangle (l_1 l_3 k) (l_2 l_4 k), \quad (3.12)$$

$$R_k^1(12, 34) = (l_1 l_3 k) (l_2 l_4 k) \int_0^\infty r_2^2 dr_2 \int_0^{r_2} r_1^2 dr_1 f(\lambda_1 | r_1) f(\lambda_2 | r_2) \frac{r_1^k}{r_2^{k+1}} f(\lambda_3 | r_1) f(\lambda_4 | r_2),$$

$$R_k^2(12, 34) = (l_1 l_3 k) (l_2 l_4 k) \int_0^\infty r_2^2 dr_2 \int_{r_2}^\infty r_1^2 dr_1 f(\lambda_1 | r_1) f(\lambda_2 | r_2) \frac{r_2^k}{r_1^{k+1}} f(\lambda_3 | r_1) f(\lambda_4 | r_2), \quad (3.13)$$

где

$$(l_i l_j k) = \begin{cases} 1, & \text{если } l_i + l_j + k - \text{четно} \\ 0, & \text{если } l_i + l_j + k - \text{нечетно}, \end{cases}$$

а в подынтегральных выражениях вместо $f(\lambda|r)$ ставится бóльшая (меньшая) компонента $f(g)$, если λ без штриха (со штрихом).

Рассмотрим субматричные элементы $\langle O^{(k)} \rangle$ операторов $O^{(k)}$, фигурирующих в (3.8). Стандартный метод неприводимых тензорных операторов позволяет получить формулы этих субматричных элементов:

$$\begin{aligned} \langle 1 \| O_1^{(k)} \| 2 \rangle &= (l_1 l_2 k) (-1)^{\frac{l_2 - k - l_1 + 1}{2} - j_1} \sqrt{[j_1, j_2, k]} \cdot \left\langle j_1 \frac{1}{2}, j_2 - \frac{1}{2} | k 0 \right\rangle, \\ \langle 1 \| O_1^{(k)} \| 2 \rangle &= (l_1 l_2 k - 1) (-1)^{\frac{l_1 + l_2 + k}{2} + j_1 + j_2 + 1} \sqrt{k(k+1)[j_1, j_2, k]} \cdot \left\langle j_1 \frac{1}{2}, j_2 \frac{1}{2} | k 1 \right\rangle = \\ &= (l_1 l_2 k - 1) (-1)^{\frac{l_1 + l_2 + k}{2} + j_1 + j_2 + 1} \sqrt{k(k+1)[j_1, j_2, k]} \cdot \phi_3(j_1, j_2, k) \cdot \left\langle j_1 \frac{1}{2}, j_2 - \frac{1}{2} | k 0 \right\rangle. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Здесь $\langle j_1 m_1, j_2 m_2 | k q \rangle$ – коэффициенты Клебша–Гордана, а также было учтено, что

$$s \| \sigma^{(1)} \| s = i\sqrt{6},$$

$$\begin{aligned} \langle 1 \| C^{(k)} \| 2 \rangle &= (l_1 l_2 k) (-1)^{\frac{l_2 - k - l_1 + 1}{2} - j_1} \sqrt{\frac{[j_1, j_2]}{[k]}} \cdot \left\langle j_1 \frac{1}{2}, j_2 - \frac{1}{2} | k 0 \right\rangle, \\ \left\langle j_1 \frac{1}{2}, j_2 \frac{1}{2} | k 1 \right\rangle &= \phi_3(j_1, j_2, k) \cdot \left\langle j_1 \frac{1}{2}, j_2 - \frac{1}{2} | k 0 \right\rangle, \\ \phi_3(j_1, j_2, k) &= \frac{1}{2\sqrt{k(k+1)}} \left((-1)^{j_1 + j_2 - k} [j_1] + [j_2] \right). \end{aligned} \quad (3.15)$$

Подставив выражения (3.14) для субматричных элементов операторов в (3.8), получим формулу для матричного элемента оператора H^r энергии запаздывающих взаимодействий относительно любых двухэлектронных состояний в окончательном виде:

$$\begin{aligned} \langle 12J | H^r | 34J \rangle &= \frac{1}{2} \sum_k (-1)^{j_1 + j_3 + J + \frac{l_1 + l_2 - l_3 - l_4}{2}} \frac{\sqrt{[j_1, j_2, j_3, j_4]}}{[k]} \cdot \\ &\cdot \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J \\ j_4 & j_3 & k \end{Bmatrix} \left(1 + P(\lambda_i, \lambda'_i) \right) \left\langle j_3 \frac{1}{2}, j_1 - \frac{1}{2} | k 0 \right\rangle \cdot \\ &\cdot \left\langle j_4 \frac{1}{2}, j_2 - \frac{1}{2} | k 0 \right\rangle R_k (\text{полн}; 1234). \end{aligned} \quad (3.16)$$

Здесь радиальный интеграл

$$R_k(\text{полн}; 1234) = \sum_{n=1}^4 R_k(n; 1234), \quad (3.17)$$

где четыре новых радиальных интеграла таковы:

$$\begin{aligned} R_k(1; 1234) &= \frac{k(k-1)}{[k-1]} (R_{k-1}(12, 3'4') - R_{k-1}(1'2, 34')) - \\ &\quad - \frac{(k+1)(k+2)}{[k+1]} (R_{k+1}(12, 3'4') - R_{k+1}(1'2, 34')), \\ R_k(2; 1234) &= (-1)^{l_2+j_2-\frac{1}{2}} \sqrt{k(k+1)} \cdot \phi_3(j_4 j_2 k) \times \\ &\quad \times \left[\frac{k+2}{[k+1]} (R_{k+1}^1(12, 3'4') - R_{k+1}^1(1'2, 34')) - \right. \\ &\quad - \frac{k+1}{[k+1]} (R_{k+1}^2(12, 3'4') - R_{k+1}^2(1'2, 34')) - \\ &\quad - \frac{k}{[k-1]} (R_{k-1}^1(12, 3'4') - R_{k-1}^1(1'2, 34')) + \\ &\quad \left. + \frac{k-1}{[k-1]} (R_{k-1}^2(12, 3'4') - R_{k-1}^2(1'2, 34')) \right], \\ R_k(3; 1234) &= (-1)^{l_1+j_1-\frac{1}{2}} \sqrt{k(k+1)} \cdot \phi_3(j_3 j_1 k) \times \\ &\quad \times \left[-\frac{k+1}{[k+1]} (R_{k+1}^1(12, 3'4') + R_{k+1}^1(1'2, 34')) + \right. \\ &\quad + \frac{k+2}{[k+1]} (R_{k+1}^2(12, 3'4') + R_{k+1}^2(1'2, 34')) + \\ &\quad + \frac{k-1}{[k-1]} (R_{k-1}^1(12, 3'4') + R_{k-1}^1(1'2, 34')) - \\ &\quad \left. - \frac{k}{[k-1]} (R_{k-1}^2(12, 3'4') + R_{k-1}^2(1'2, 34')) \right], \\ R_k(4; 1234) &= (-1)^{l_1+l_2+j_1+j_2+1} k(k+1) \cdot \phi_3(j_3 j_1 k) \phi_3(j_4 j_2 k) \times \\ &\quad \times \left[\frac{1}{[k+1]} (R_{k+1}(12, 3'4') + R_{k+1}(1'2, 34')) - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{[k-1]} (R_{k-1}(12, 3'4') + R_{k-1}(1'2, 34')) \right]. \end{aligned} \quad (3.18)$$

По формуле (3.16) можно вычислить двухэлектронные матричные элементы оператора H^r запаздывающих взаимодействий для любых двухэлектронных конфигураций относительно неантисимметризованных функций.

Матричный элемент между антисимметризованными функциями вычисляется по формуле

$$\langle 12|H^r|34 \rangle_{\text{ант}} = 2T_{12}T_{34} \left\{ \langle 12|H^r|34 \rangle - (-1)^{j_3+j_4-J} \langle 12J|H^r|43J \rangle \right\}, \quad (3.19)$$

т. е. прямой член вычисляется непосредственно по формуле (3.16), а обменный – по той же формуле с перестановкой индексов 3 и 4, а T_{12}, T_{34} – нормировочные множители.

Заключение

Полученные формулы позволят в дальнейшем проводить аналогичные работы в случаях диагональных и недиагональных по электронным конфигурациям состояний, а также в случаях одно-, двух- и более подоболочек эквивалентных электронов.

Литература

1. Дирак, П. А. М. Собрание научных трудов. Т. 2. Квантовая теория (научные статьи 1924–1947) / П. А. М. Дирак. – Москва : ФИЗМАТЛИТ, 2003. – 848 с. – (Классики науки). – ISBN 5-9221-0381-4 (Т. II).
2. Берестецкий, В. Б. Релятивистская квантовая теория : ч. 1 / В. Б. Берестецкий, Б. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский. – Москва : Наука, 1968. – 480 с.
3. Ахиезер А. И. Квантовая электродинамика / А. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий. – Москва : Наука, 1981. – 428 с.
4. Breit, G. (1929). The Effect of Retardations on the Interactions of Two Electrons. *Phys. Rev.* V. 34, p. 553.
5. Breit, G. (1930). The Fine Structure of HE as a Test of the Spin Interactions Two Electrons. *Phys. Rev.* V. 36, p. 383.
6. Breit, G. (1932). Dirac's Equation and the Spin-Spin Interactions of Two Electrons. *Phys. Rev.* V. 39, p. 616.
7. Ralchenko Yu., Draganić I. N., D. Osin D. [et. al.]. (2011). Spectroscopy of diagnostically important magnetic-dipole lines in highly charged $3d^n$ ions of tungsten. *Phys. Rev.* V. 83. No. 032517.
8. Osin D., Gillaspay J. D., Reader J., Ralchenko Yu. (2012). EUV magnetic-dipole lines from highly-charged high-Z ions with an open 3d shell. *Eur. Phys. J. D.* V. 66. No. 286, pp. 1–10.
9. Zhao Z., Wang L. K., Li S. [et. al.]. (2018). Multi-configuration Dirac–Hartree–Fock calculations of forbidden transitions within the $3d^k$ ground configurations of highly charged ions ($Z=72-83$). *At. Data Nucl. Data Tables.* V. 119, p. 314.
10. Froese F., Gaigalas G., Jönsson P. C. (2017). Core Effects on Transition Energies for $3d^k$ Configurations in Tungsten Ions. *Atoms.* V. 5. No 7, pp. 1–34.
11. Hawryluk, R., Campbell D. [et. al.]. (2009). Principal physics developments evaluated in the ITER design review. *Nucl. Fusion.* V. 49. No 0650129, pp. 1–15.
12. Arvanitaki, A., Huang J., Van Tilburg K. (2015). Searching for dilaton dark matter with atomic clocks. *Phys. Rev. D.* V. 91. No 015015, pp. 1–17.
13. Roberts B. M., Blewitt G., Dailey C. [et. al.]. (2017). Search for domain wall dark matter with atomic clocks on board global positioning system satellites. *Nat. Commun.* V. 8. No 1195, pp. 1–9.
14. Safronova, M. S., Safronova U. I., Kozlov M. G. (2018). Atomic properties of actinide ions with particle-hole. *Phys. Rev. A.* V. 97. No. 012511, pp. 1–5.
15. Кычкин, И. С. Основы релятивистской теории много электронных атомов и ионов / И. С. Кычкин. – Москва : Физматлит, 1994. – 273 с.
16. Кычкин, И. С. Релятивистский оператор энергии магнитных взаимодействий электронов / И. С. Кычкин, В. И. Сивцев // Вестник СВФУ. – 2022. – № 2. – С. 31–40.
17. Собельман, И. И. Введение в теорию атомных спектров / И. И. Собельман. – Москва : Наука, 1977. – 320 с.

18. Варшалович, Д. А. Квантовая теория углового момента / Д. А. Варшалович, А. Н. Москалев, В. К. Херсонский. – Ленинград : Наука, 1975. – 441 с.

References

1. Dirak, P.A.M. (2003). Collection of scientific papers. Vol. 2. Quantum theory (scientific articles 1924-1947). Moscow: FIZMATLIT. (in Russian)
2. Berestetsky, V. B. (1968). Relativistic quantum theory: Part 1. Moscow: Nauka. (in Russian)
3. Akhiezer, A.I. (1981). Quantum electrodynamics. Moscow: Nauka. (in Russian)
4. Breit, G. (1929). The Effect of Retardations on the Interactions of Two Electrons. *Phys. Rev.* V. 34, p. 553.
5. Breit, G. (1930). The Fine Structure of HE as a Test of the Spin Interactions Two Electrons. *Phys. Rev.* V. 36, p. 383.
6. Breit, G. (1932). Dirac's Equation and the Spin-Spin Interactions of Two Electrons. *Phys. Rev.* V. 39, p. 616.
7. Ralchenko Yu., Draganić I. N., D. Osin D. [et. al.]. (2011). Spectroscopy of diagnostically important magnetic-dipole lines in highly charged $3d^n$ ions of tungsten. *Phys. Rev.* V. 83. No. 032517.
8. Osin D., Gillaspay J. D., Reader J., Ralchenko Yu. (2012). EUV magnetic-dipole lines from highly-charged high-Z ions with an open 3d shell. *Eur. Phys. J. D.* V. 66. No. 286, pp. 1–10.
9. Zhao Z., Wang L. K., Li S. [et. al.]. (2018). Multi-configuration Dirac–Hartree–Fock calculations of forbidden transitions within the $3d^k$ ground configurations of highly charged ions ($Z=72-83$). *At. Data Nucl. Data Tables.* V. 119, p. 314.
10. Froese F., Gaigalas G., Jönsson P. C. (2017). Core Effects on Transition Energies for $3d^k$ Configurations in Tungsten Ions. *Atoms.* V. 5. No 7, pp. 1–34.
11. Hawryluk, R., Campbell D. [et. al.]. (2009). Principal physics developments evaluated in the ITER design review. *Nucl. Fusion.* V. 49. No 0650129, pp. 1–15.
12. Arvanitaki. A., Huang J., Van Tilburg K. (2015). Searching for dilaton dark matter with atomic clocks. *Phys. Rev. D.* V. 91. No 015015, pp. 1–17.
13. Roberts B. M., Blewitt G., Dailey C. [et. al.]. (2017). Search for domain wall dark matter with atomic clocks on board global positioning system satellites. *Nat. Commun.* V. 8. No 1195, pp. 1–9.
14. Safronova, M. S., Safronova U. I., Kozlov M. G. (2018). Atomic properties of actinide ions with particle-hole. *Phys. Rev. A.* V. 97. No. 012511, pp. 1–5.
15. Kychkin, I. S. (1994). Fundamentals of the relativistic theory of many electronic atoms and ions. Moscow : Fizmatlit. (in Russian)
16. Kychkin, I. S. (2002). Relativistic operator of the energy of magnetic interactions of electrons. *Bulletin of NEFU*, No. 2, pp. 31-40. (in Russian)
17. Sobelman, I. I. (1977). Introduction to the theory of atomic spectra. Moscow: Nauka. (in Russian)
18. Varshalovich, D.A. (1975). Quantum theory of angular momentum. Leningrad : Nauka. (in Russian)

КЫЧКИН Иннокентий Саввич – д. ф.-м. н., проф. каф. общей и экспериментальной физики ФТИ, СВФУ им. М.К. Аммосова.

E-mail: kof_fti@mail.ru

KYCHKIN Innokentij Savvich – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Department of General and Experimental Physics, Institute of Physics and Technology, M.K. Ammosov North-Eastern Federal University.

СИВЦЕВ Василий Иванович – к. ф.-м. н., доц. каф. общей и экспериментальной физики ФТИ, СВФУ им. М.К. Аммосова.

E-mail: vi.sivtcev@s-vfu.ru

SIVTSEV Vasilij Ivanovich – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Department of General and Experimental Physics, Institute of Physics and Technology, M. K. Ammosov North-Eastern Federal University.