

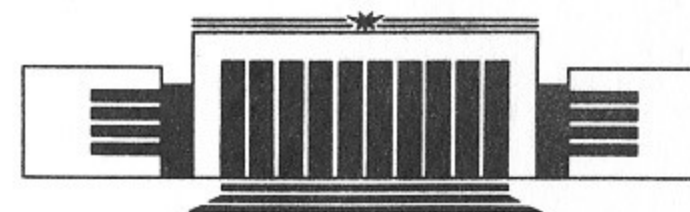
ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ СО АН СССР



**В.А. Дзюба**

**КОМПЛЕКС ПРОГРАММ  
ДЛЯ ЗАДАЧ АТОМНОЙ ФИЗИКИ.  
III. РАСЧЕТ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ПОПРАВК**

**ПРЕПРИНТ 90-9**



**НОВОСИБИРСК**

Комплекс программ  
для задач атомной физики.  
III. Расчет корреляционных поправок

В.А. Дзюба

Институт ядерной физики  
630090, Новосибирск 90, СССР

АННОТАЦИЯ

Описана реализация двух способов расчета корреляционных поправок в атомах: прямым суммированием по многочастичной теории возмущений и с помощью фейнмановской диаграммной техники. Расчет в фейнмановской диаграммной технике более громоздок, но обладает лучшей численной точностью и позволяет точно просуммировать доминирующие классы диаграмм высших порядков. Применение методики иллюстрируется на атомах цезия и таллия.

1. ВВЕДЕНИЕ

Данная работа является продолжением работ [1, 2] и посвящена описанию способов расчета корреляционных поправок к уровням энергии, константам сверхтонкой структуры и т. п. в тяжелых атомах. В соответствии с принятой в работе терминологией, корреляционными поправками называются не любые поправки, связанные с остаточным кулоновским взаимодействием, а лишь те, которые не учитываются в методе зависящих от времени уравнений Хартри—Фока<sup>\*)</sup> (ЗВХФ) (см., например, [2]). Для последних, на наш взгляд, более удобным является термин поляризационные поправки. В работе описано два способа расчета корреляционных поправок: прямое суммирование по многочастичной теории возмущений и использование фейнмановской диаграммной техники и функций Грина. Каждый из этих способов обладает своими достоинствами. Основное преимущество первого способа состоит в его простоте, а следовательно, сравнительно небольшом времени счета на ЭВМ. Получаемая при этом точность совпадения расчетных и экспериментальных данных в большинстве случаев является вполне удовлетворительной. Преимущества использования фейнмановской диаграммной техники можно перечислить в порядке убывания важности следующим образом.

1. Появляется возможность точно просуммировать доминирующие классы диаграмм высших порядков, такие как [4]

<sup>\*)</sup> Или в эквивалентном ему приближении случайных фаз (см., например [3]).

- а) экранировка кулоновского взаимодействия,
- б) взаимодействие частица—дырка в поляризационном операторе,
- в) итерации массового оператора.

Эти эффекты высших порядков не малы и для получения высокой точности расчетов их необходимо учитывать [4—7].

2. Корреляционная поправка в фейнмановской диаграммной технике вычисляется с лучшей численной точностью.

3. Отпадает необходимость вычислять возбужденные состояния дискретного и непрерывного спектра (кроме тех, для которых ищется поправка).

Недостатком фейнмановской диаграммной техники является то, что для ее реализации требуется достаточно мощный компьютер (не менее мощный, чем ЕС-1061).

Отметим, что экранировка кулоновского взаимодействия и взаимодействие частица—дырка в поляризационном операторе могут быть учтены приближенно, с помощью экранировочных факторов [8], а учет итераций массового оператора проводится методом корреляционного потенциала [9] и не зависит от того, вычислялся ли массовый оператор в фейнмановской диаграммной технике или по многочастичной теории возмущений.

## 2. КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ПОПРАВКИ ВТОРОГО ПОРЯДКА. РАСЧЕТ ПРЯМЫМ СУММИРОВАНИЕМ

Для вычисления корреляционных поправок разделим точный гамильтониан атома на две части: сумму одночастичных хартри—фоковских гамильтонианов и остаточное взаимодействие:

$$H = \sum_{i=1}^N H_0(r_i) + U, \quad (1)$$

$$H_0(r_i) = c\bar{\alpha}\vec{p} + (\beta - 1)mc^2 - \frac{Ze^2}{r_i} + V(r_i), \quad (2)$$

$$U = \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \sum_{i=1}^N V(r_i). \quad (3)$$

Корреляционная поправка к энергии ионизации внешнего

электрона вычисляется с помощью теории возмущений по остаточному взаимодействию  $U$ . Поправки первого порядка равны нулю из-за точного сокращения между матричными элементами от первого и второго слагаемых в (3) (см. детали в [10]). Поправки второго порядка даются в  $V^{N-1}$ -приближении [1, 10] четырьмя диаграммами рис. 1. В  $V^N$ -приближении [1, 5] появляются также вычитательные диаграммы рис. 2, в которых  $V_0$  означает центрально-симметричную часть прямого потенциала внешнего электрона.

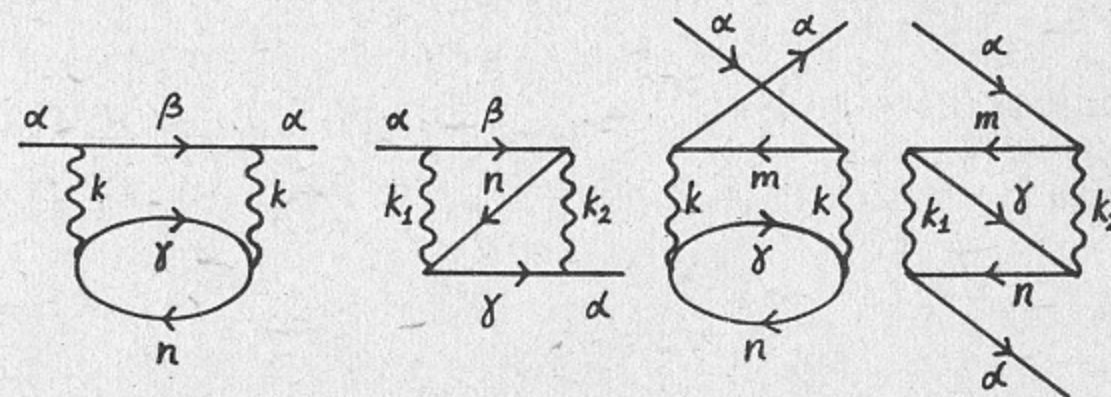


Рис. 1. Корреляционные диаграммы второго порядка:

$\alpha, \beta, \gamma$ —возбужденные состояния;  $n, m$ —состояния из заполненного остова;  $k, k_1, k_2$ —мультипльности кулоновского кванта.

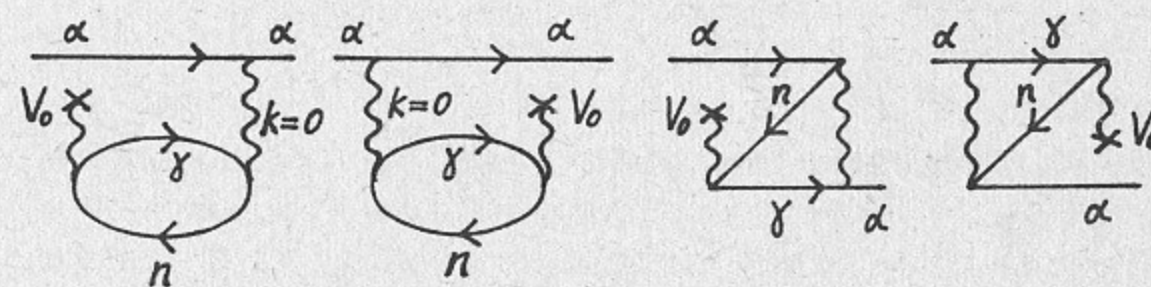


Рис. 2. Вычитательные диаграммы в  $V^N$ -приближении.

Расчетные формулы для корреляционных поправок второго порядка имеют следующий вид:

$$\delta\epsilon_\alpha = \sum_{\beta\gamma nk} \frac{1}{(2j_\alpha + 1)(2k + 1)} \frac{Q_k^2(\alpha\beta\gamma)}{\epsilon_\alpha + \epsilon_n - \epsilon_\beta - \epsilon_\gamma}, \quad (4)$$

$$\delta\epsilon_\sigma = \sum_{\beta\gamma nk_1 k_2} \frac{(-1)^{k_1 + k_2 + 1}}{(2j_\alpha + 1)} \left\{ \begin{matrix} j_\beta & k_1 & j_\alpha \\ j_\gamma & k_2 & j_n \end{matrix} \right\} \frac{Q_{k_1}(\alpha\beta\gamma) Q_{k_2}(\beta\gamma\alpha)}{\epsilon_\alpha + \epsilon_n - \epsilon_\beta - \epsilon_\gamma}, \quad (5)$$

$$\delta \varepsilon_\sigma = \sum_{\gamma n m k} \frac{1}{(2j_\alpha + 1)(2k + 1)} \frac{Q_k^2(n m \alpha \gamma)}{\varepsilon_n + \varepsilon_m - \varepsilon_\alpha - \varepsilon_\gamma}, \quad (6)$$

$$\delta \varepsilon_\sigma = \sum_{\gamma n m k_1 k_2} \frac{(-1)^{k_1 + k_2 + 1}}{(2j_\alpha + 1)} \begin{Bmatrix} j_\alpha & k_1 & j_m \\ j_\gamma & k_2 & j_n \end{Bmatrix} \frac{Q_{k_1}(n m \alpha \gamma) Q_{k_2}(\alpha \gamma m n)}{\varepsilon_n + \varepsilon_m - \varepsilon_\alpha - \varepsilon_\gamma}. \quad (7)$$

Здесь  $\alpha$  — состояние внешнего электрона, для которого вычисляется корреляционная поправка;  $\beta, \gamma$  — виртуальные возбужденные состояния дискретного и непрерывного спектра;  $n, m$  — состояния из остова атома;  $k, k_1, k_2$  — мультипольности кулоновского кванта;  $Q_k$  — кулоновский интеграл:

$$Q_k(\alpha \beta n \gamma) = \sqrt{(2j_\alpha + 1)(2j_\beta + 1)(2j_n + 1)(2j_\gamma + 1)} \begin{pmatrix} k & j_\alpha & j_n \\ 0 & 1/2 & -1/2 \end{pmatrix} \times \\ \times \begin{pmatrix} k & j_\beta & j_\gamma \\ 0 & 1/2 & -1/2 \end{pmatrix} F_k(\alpha \beta n \gamma), \quad (8)$$

$F_k(\alpha \beta n \gamma)$  — радиальный кулоновский интеграл:

$$F_k(\alpha \beta n \gamma) = \int_0^\infty f_\alpha(r') f_n(r') dr' \int_0^\infty \frac{f_\beta(r) f_\gamma(r) r^k}{r^{k+1}} dr, \quad (9)$$

$$r_{<} = \min(r, r'), \quad r_{>} = \max(r, r')$$

В  $V^N$ -приближении, для учета диаграмм рис. 2, надо в выражениях (4) — (5) вычесть из диагональных кулоновских интегралов  $Q_0(\alpha n \alpha \gamma)$  и  $Q_0(\beta \alpha n \alpha)$  среднее от потенциала внешнего электрона  $\langle \alpha | V_0 | \alpha \rangle$ . При этом, для правильного определения границы непрерывного спектра, надо опустить те слагаемые, где вычитание проводится два раза.

При суммировании по  $n$  и  $m$  в (4) — (7) достаточно учесть лишь верхние подболочки остова (как правило 8 — 10 верхних подболочек; напомним, что для Cs полное количество заполненных подболочек равно 17, а для Tl — 22). В суммах по  $\beta$  и  $\gamma$  содержатся суммы по моментам и энергиям возбужденных состояний дискретного и непрерывного спектров. В сумме по моментам мы учитываем 11 слагаемых:  $s_{1/2}, p_{1/2}, p_{3/2}, \dots, h_{9/2}, h_{11/2}$ . Вклад более высоких моментов пренебрежимо мал. В сумме по дискретному спектру мы учитываем по три нижних состояния каждого момента, а вклад более высоких возбуждений оцениваем по

асимптотической формуле

$$\delta I = \frac{1}{2} \frac{f(v_{\max}) v_{\max}^3}{(v_{\max} + 1)^2}, \quad (10)$$

где  $v_{\max}$  — эффективное главное квантовое число ( $\varepsilon = -Ry/v^2$ ) самого верхнего из учитываемых уровней,  $f$  — суммируемая функция. Эта формула появляется из-за того, что вклад в корреляционную поправку дает область внутри остова, где волновая функция внешнего электрона пропорциональна  $1/v^{3/2}$  [11]. Волновые функции непрерывного спектра мы нормируем на  $\delta(v - v')$  (см. [1]) и для интегрирования по энергиям непрерывного спектра используем следующий массив значений  $v$ : 0,2; 0,4; 0,6; 0,8; 1; 1,2; 1,4; 1,8; 2,2; 2,7; 3,2; 3,7; 4,2 (рис. 3).

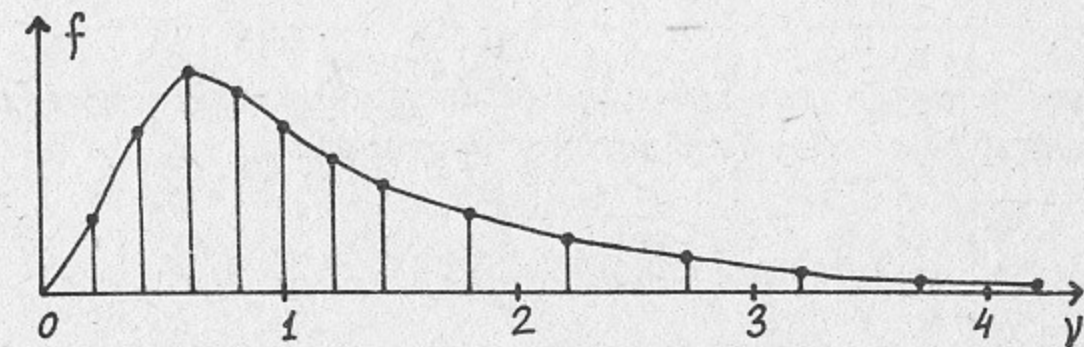


Рис. 3. Аппроксимация подынтегральной функции при интегрировании по энергиям непрерывного спектра (в формулах (4) — (7)).

Интегрирование в интервале 0,2 — 4,2 ведется по формуле Симпсона, вклад высоких энергий ( $v < 0,2$ ) учитывается по формуле треугольника

$$\delta I = \frac{1}{2} f(v_1) v_1, \quad (11)$$

$f$  — подынтегральная функция;  $v_1 = 0,2$ . Вклад состояний с  $v > 4,2$  учитывается по асимптотической формуле

$$\delta I = \frac{1}{2} f(v_{\max}) v_{\max}. \quad (12)$$

Происхождение этой формулы аналогично (10).

Отметим, что в формулах (4) — (5)  $\beta = \alpha$  соответствует учету перестройки остова под действием среднего поля внешнего электрона. Таким образом, перестройка остова учитывается и в  $V^{N-1}$ -приближении.

Вычисления в  $V^{N-1}$ -приближении производятся программой TEN11, в  $V^N$ -приближении программами TENVN либо EN1234.

### 3. ВЫЧИСЛЕНИЕ КУЛОНОВСКОГО ИНТЕГРАЛА

Радиальный кулоновский интеграл  $F_k$  (9):

$$F_k(1234) = \int_0^\infty f_1(r') f_3(r') \times \\ \times \left[ \frac{1}{r'^{k+1}} \int_0^{r'} r^k f_2(r) f_4(r) dr + r'^k \int_{r'}^\infty \frac{f_2(r) f_4(r)}{r^{k+1}} dr \right] dr' \quad (13)$$

изменением порядка интегрирования во втором слагаемом и переобозначением  $r \rightarrow r'$ ,  $r' \rightarrow r$  сводится к повторному:

$$F_k(1234) = \int_0^\infty \frac{f_1(r) f_3(r) u(r) + f_2(r) f_4(r) v(r)}{r^{k+1}} dr, \quad (14)$$

где

$$u(r) = \int_0^r r'^k f_2(r') f_4(r') dr', \quad (15)$$

$$v(r) = \int_0^r r'^k f_1(r') f_3(r') dr'. \quad (16)$$

Интегралы (15) — (16), а затем (14) вычисляются по формуле Симпсона. Полная корреляционная поправка оказывается слабо чувствительной к точности вычисления кулоновского интеграла, поэтому в (14) — (16) можно использовать не все точки координатного массива, а лишь каждую вторую, либо каждую четвертую.

Вычисление кулоновского интеграла производится подпрограммой QUL.

### 4. УРОВНИ ЭНЕРГИИ ЦЕЗИЯ. ТОЧНОСТЬ РАСЧЕТА КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ПОПРАВКИ

В табл. 1 приведены результаты расчета уровней энергии Cs ( $\text{см}^{-1}$ ).  $E^{(0)}$  означает энергию в приближении релятивистского метода Хартри—Фока (РХФ) [1],  $E^{(2)}$  — корреляционная поправка второго порядка. Для сравнения приведены полученные недавно результаты расчета  $E^{(2)}$  Джонсоном и др. [12], а также экспериментальные уровни энергии Cs [13].

Таблица 1  
Уровни энергии Cs ( $\text{см}^{-1}$ )

	$E^{(0)}$	$E^{(2)}$	$E^{(2)}$ [12]	$E^{(0)} + E^{(2)}$	Эксперимент [13]
6s	-27949	-3749	-3893	-31698	-31407
7s	-12110	-930	-922	-13040	-12872
6p <sub>1/2</sub>	-18800	-1486	-1516	-20251	-20229
7p <sub>1/2</sub>	-9225	-469		-9694	-9641
6p <sub>3/2</sub>	-18395	-1327	-1356	-19690	-19675

Как видно из таблицы, расхождение между различными расчетами  $E^{(2)}$  не превышает 0,5% от экспериментального значения, окончательный же результат ( $E^{(0)} + E^{(2)}$ ) отличается от эксперимента примерно на 1%. Причем, если в приближении РХФ энергия по модулю меньше экспериментальной, то с учетом корреляционной поправки она становится по модулю больше последней. Хотя точность 1% в расчете уровней энергии многоэлектронных атомов является довольно высокой, в данной работе будет рассмотрен способ увеличения ее еще на порядок. Поэтому полезно здесь обсудить источники имеющихся погрешностей.

Доминирующий вклад в корреляционную поправку к энергии дает диаграмма на рис. 1,а (4). Соответствующее выражение для  $\delta\varepsilon$  имеет вид

$$\delta\varepsilon = \sum c \frac{Q^2}{\Delta E}.$$

Поэтому, подавляющее большинство членов этой суммы (а для корреляционной поправки к энергии основного состояния все члены суммы) имеют одинаковый знак. Ограничивая сумму по моментам, по занятым состояниям остова, по энергиям дискретного и

непрерывного спектров, мы каждый раз вносим погрешность в сторону занижения корреляционной поправки, которая в итоге может оказаться заметной. Отброшенные слагаемые могут быть учтены с помощью асимптотических формул, однако сравнение с экспериментом не может служить здесь критерием для выбора этих формул, так как учет отброшенных слагаемых лишь ухудшает согласие с экспериментальными данными. Таким критерием может служить сравнение с более точным расчетом с помощью функции Грина и фейнмановской диаграммной техники (см. §6), который опирается на решение уравнений, а не на прямое суммирование. Как оказалось, расчет корреляционной поправки описанным выше способом наиболее чувствителен к способу учета состояний непрерывного спектра высоких энергий. В работе [10] состояния непрерывного спектра с  $E > 25 \text{ Ry}$  не учитывались. Соответствующее значение  $E^{(2)}$  ( $-3515 \text{ см}^{-1}$  для  $6s$ ;  $-820 \text{ см}^{-1}$  для  $7s$ ;  $-1432 \text{ см}^{-1}$  для  $6p_{1/2}$  и т. д.) на несколько процентов меньше тех, что приведены в табл. 1.  $E^{(2)}$  в табл. 1 получены с учетом состояний непрерывного спектра с  $E > 25 \text{ Ry}$  по формуле треугольника (11), что хотя, на первый взгляд, и является довольно грубым способом учета этих состояний, тем не менее довольно неплохо воспроизводит как результаты Джонсона и др. [12], так и точный расчет в фейнмановской диаграммной технике [4].

В работе [10] рассматривался также способ расчета корреляционной поправки, основанный на замене одного из суммирований по возбужденным состояниям в формулах (4), (5) решением неоднородного интегро-дифференциального уравнения. Ясно, что это не решает проблему полностью, так как остается еще одно суммирование по возбужденным состояниям. Все вышесказанное не умаляет значения работы [10], как и вообще расчетов корреляционных поправок прямым суммированием по многочастичной теории возмущений. Дело в том, что, во-первых, незачем иметь численную погрешность меньше, чем вклад неучтенных корреляций высших порядков, во-вторых, расчет может быть скорректирован по имеющимся экспериментальным данным.

Как мы установили, численная погрешность занижает величину корреляционной поправки. Поэтому, оставшееся после учета корреляционной поправки второго порядка расхождение расчетных и экспериментальных данных (см. табл. 1) обусловлено, в основном, вкладом корреляций высших порядков, которые в совокупности уменьшают корреляционную поправку примерно на 10% ( $\sim 1\%$  от экспериментальной энергии).

## 5. РАСЧЕТ ПРЯМЫМ СУММИРОВАНИЕМ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ПОПРАВОК К СВЕРХТОНКОЙ СТРУКТУРЕ, СЛАБОМУ ВЗАИМОДЕЙСТВИЮ И Т. П.

Если в задаче присутствует взаимодействие с внешним (по отношению к электронным оболочкам) полем и в качестве базиса одноэлектронных состояний взяты волновые функции метода зависящих от времени уравнений Хартри—Фока или уравнений Хартри—Фока во внешнем поле [2], то расчет соответствующих корреляционных поправок совершенно аналогичен расчету корреляционных поправок к энергии. Оператором возмущения здесь также является разность между точным гамильтонианом атома и суммой одночастичных гамильтонианов метода самосогласованного поля:

$$U = \hat{H}_a - \sum_{i=1}^N H_1(r_i) = \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \sum_{i=1}^N V(r_i) \quad (17)$$

(ср. с. (3)). Оператор внешнего поля включен в  $H_a$  и  $H_1$ . Корреляционные поправки изображаются диаграммами рис. 1, где вместо хартри—фоковских функций  $\psi_0$  и энергий  $\epsilon_0$  должны фигурировать функции  $\tilde{\psi} = \psi_0 + \delta\psi$  и энергии  $\tilde{\epsilon} = \epsilon_0 + \delta\epsilon$  методов ЗВХФ или ХФВП. Рассмотрим в качестве примера график на рис. 1,а. Соответствующая поправка к энергии дается выражением

$$\delta\epsilon_\alpha = \sum_{n\beta\gamma} \frac{Q_{\alpha\beta n\gamma}^2}{\epsilon_\alpha + \epsilon_n - \epsilon_\beta - \epsilon_\gamma}, \quad (18)$$

где

$$Q_{\alpha\beta n\gamma} = \iint \psi_\alpha^+(\vec{r}_1) \psi_n^+(\vec{r}_2) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \psi_\beta(\vec{r}_1) \psi_\gamma(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2.$$

Подставив в (18)  $\psi_0 + \delta\psi$  вместо  $\psi$  и  $\epsilon_0 + \delta\epsilon$  вместо  $\epsilon$ , разложив до первого порядка по внешнему полю и опустив независимый от внешнего поля член, получим

$$\delta\epsilon_\alpha \rightarrow 2 \sum_{n\beta\gamma} \frac{Q_{\alpha\beta n\gamma}}{\Delta E_{\alpha\beta n\gamma}} (Q_{\bar{\alpha}\beta n\gamma} + Q_{\alpha\bar{\beta}n\gamma} + Q_{\alpha\beta\bar{n}\gamma} + Q_{\alpha\beta n\bar{\gamma}}) - \sum_{n\beta\gamma} \frac{Q_{\alpha\beta n\gamma}^2}{\Delta E_{\alpha\beta n\gamma}^2} (\delta\epsilon_\alpha + \delta\epsilon_n - \delta\epsilon_\beta - \delta\epsilon_\gamma). \quad (19)$$

Здесь  $\Delta E_{\alpha\beta\gamma} = \varepsilon_{0\alpha} + \varepsilon_{0\beta} - \varepsilon_{0\gamma} - \varepsilon_{0\gamma}$ . Знак тильда в кулоновском интеграле обозначает, что вместо соответствующей функции  $\psi_0$  подставлена поправка  $\delta\psi$ . Аналогично раскладываются корреляционные поправки, соответствующие графикам 1,б, 1,в, 1,г. Интегрирование по углам и суммирование по проекциям выполняются аналитически. Соответствующие формулы для сверхтонкой структуры приведены в [14]. Алгоритм суммирования по состояниям дискретного и непрерывного спектров в точности тот же, что для энергии (см. §2). Опыт расчета описанным способом констант сверхтонкой структуры Cs [14], Fr [14], Ra<sup>+</sup> [15] и некоторых других атомов показывает, что здесь достигается точность совпадения расчетных и экспериментальных данных на уровне 1—3% для *s*- и *p*-уровней.

Расчет корреляционных поправок к сверхтонкой структуре осуществляется в программе CORS. В программе WEACOR вычисляется поправка к корреляционному потенциалу и E1-амплитуде, обусловленная слабым взаимодействием электронов атома с ядром (см. рис. 4).

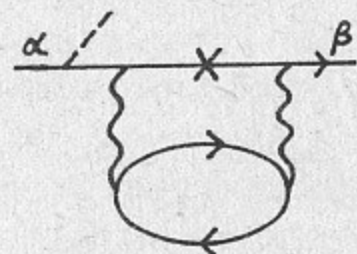


Рис. 4. Пример диаграммы, вычисляемой в программе WEACOR.

Штриховая линия означает взаимодействие с полем фотона, крестик — слабое взаимодействие с ядром.

## 6. ФЕЙНМАНОВСКАЯ ДИАГРАММНАЯ ТЕХНИКА

Как отмечалось выше, основным аргументом в пользу фейнмановской диаграммной техники является возможность точного суммирования доминирующих классов диаграмм высших порядков. Корреляционные эффекты высших порядков обсуждается подробно в работах [4—7, 16]. Остановимся здесь лишь на вычислительных аспектах фейнмановской диаграммной техники.

В фейнмановской диаграммной технике четыре корреляционные диаграммы рис. 1 переходят в две диаграммы рис. 5, причем диаграмма 5,а соответствует сумме диаграмм 1,а и 1,в, а диаграмма 5,б — сумме диаграмм 1,б и 1,г.

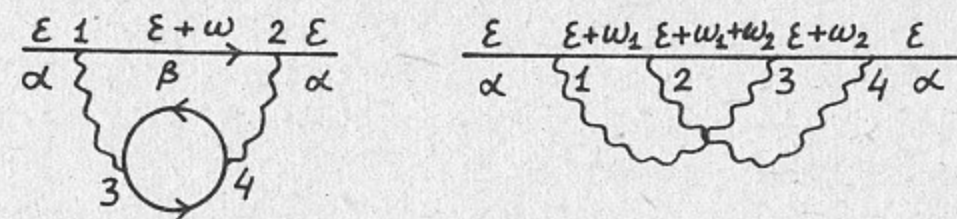


Рис. 5. Корреляционная поправка к энергии в фейнмановской диаграммной технике.

Соответствующие расчетные формулы имеют вид:

$$\delta\varepsilon_a = - \int \frac{d\omega}{2\pi} \iiint \psi^+(\vec{r}_1) G(\varepsilon + \omega, \vec{r}_1, \vec{r}_2) Q(\vec{r}_1, \vec{r}_3) i\Pi(\omega, \vec{r}_3, \vec{r}_4) \times \\ \times Q(\vec{r}_2, \vec{r}_4) \psi(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 d\vec{r}_3 d\vec{r}_4, \quad (20)$$

$$\delta\varepsilon_b = \iint \frac{d\omega_1 d\omega_2}{4\pi^2} \iiint \psi^+(\vec{r}_1) G(\varepsilon + \omega_1, \vec{r}_1, \vec{r}_2) Q(\vec{r}_1, \vec{r}_3) \times \\ \times G(\varepsilon + \omega_1 + \omega_2, \vec{r}_2, \vec{r}_3) Q(\vec{r}_2, \vec{r}_4) G(\varepsilon + \omega_2, \vec{r}_3, \vec{r}_4) \psi(\vec{r}_4) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 d\vec{r}_3 d\vec{r}_4, \quad (21)$$

где  $Q$  — оператор кулоновского взаимодействия:

$$Q(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}; \quad (22)$$

$G$  — функция Грина:

$$G(\varepsilon, \vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{\gamma} \frac{|\gamma\rangle\langle\gamma|}{\varepsilon - \varepsilon_{\gamma} + i\delta} + \sum_n \frac{|n\rangle\langle n|}{\varepsilon - \varepsilon_n - i\delta}, \quad \delta \rightarrow 0, \quad (23)$$

$|n\rangle$  — заполненные состояния остова,  $|\gamma\rangle$  — возбужденные состояния;  $\Pi$  — поляризационный оператор:

$$\Pi(\omega, \vec{r}_1, \vec{r}_2) = \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} G(\omega + \varepsilon, \vec{r}_1, \vec{r}_2) G(\varepsilon, \vec{r}_1, \vec{r}_2). \quad (24)$$

После отделения угловых переменных и интегрирования по ним, выражения (20) — (21) принимают вид:

$$\delta\varepsilon_a = - \sum_{\kappa\beta k} c(k, \kappa_{\alpha}, \kappa_{\beta}) \int \frac{d\omega}{2\pi} \iiint f_{\alpha}(r_1) G_{\kappa\beta}(\varepsilon + \omega, r_1, r_2) \times \\ \times Q_k(r_1, r_3) i\Pi_k(\omega, r_3, r_4) Q_k(r_2, r_4) f_{\alpha}(r_2) dr_1 dr_2 dr_3 dr_4, \quad (25)$$

$$\delta \varepsilon_{\sigma} = \sum_{k_1 k_2 \kappa_1 \kappa_2 \kappa_3} c(k_1, k_2, \kappa_1, \kappa_2, \kappa_3) \iint \frac{d\omega_1 d\omega_2}{4\pi^2} \times \\ \times \iiint f_{\alpha}(r_1) G_{\kappa_1}(\varepsilon + \omega, r_1, r_2) Q_{k_1}(r_1, r_3) G_{\kappa_2}(\varepsilon + \omega_1 + \omega_2, r_2, r_3) \times \\ \times Q_{k_2}(r_2, r_4) G_{\kappa_3}(\varepsilon + \omega_2, r_3, r_4) f_{\alpha}(r_4) dr_1 dr_2 dr_3 dr_4, \quad (26)$$

где

$$c(k, \kappa_{\alpha}, \kappa_{\beta}) = (2j_{\beta} + 1) \begin{pmatrix} k & j_{\beta} & j_{\alpha} \\ 0 & 1/2 & -1/2 \end{pmatrix}^2 \xi(k + l_{\alpha} + l_{\beta}), \\ c(k_1, k_2, \kappa_1, \kappa_2, \kappa_3) = (-1)^{k_1 + k_2 + 1} (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)(2j_3 + 1) \times \\ \times \begin{Bmatrix} j_1 & k_1 & j_{\alpha} \\ j_3 & k_2 & j_2 \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} k_1 - j_{\alpha} & j_1 \\ 0 & 1/2 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_1 & j_2 & j_3 \\ 0 & 1/2 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_2 & j_1 & j_2 \\ 0 & 1/2 & -1/2 \end{pmatrix} \times \\ \times \begin{pmatrix} k_2 & j_3 & j_{\alpha} \\ 0 & 1/2 & -1/2 \end{pmatrix} \xi(k_1 + l_{\alpha} + l_1) \xi(k_1 + l_2 + l_3) \times \\ \times \xi(k_2 + l_1 + l_2) \xi(k_2 + l_3 + l_{\alpha}); \\ \kappa = (-1)^{l + j + 1/2} \left( j + \frac{1}{2} \right); \\ \xi(x) = \begin{cases} 1, & \text{если } x \text{ четно,} \\ 0, & \text{если } x \text{ нечетно;} \end{cases} \\ Q_k(r_1, r_2) = r_{<}^k / r_{>}^{k+1}, \quad r_{<} = \min(r_1, r_2), \quad r_{>} = \max(r_1, r_2);$$

$\kappa_{\alpha}$  соответствует той волновой функции, для которой вычисляется поправка.

В реальных вычислениях операторы  $\Pi_k$ ,  $G_{\kappa}$ ,  $Q_k$  являются матрицами в координатном пространстве. Меры интегрирования  $dr_1 dr_3$  и  $dr_2 dr_4$  удобно внести в матрицы кулоновского взаимодействия  $Q_k(r_1, r_3)$  и  $Q_k(r_2, r_4)$ , соответственно. Это делается аналогично правилу (23) из [1] для матриц обменного взаимодействия. А именно, все элементы матрицы  $Q_k(i, j)$  умножаются на коэффициенты

$$\frac{2}{3}(4h^2), \quad \text{если } i \text{ и } j \text{ имеют одинаковую четность;} \\ \frac{4}{3}(4h^2), \quad \text{если } i \text{ и } j \text{ имеют разную четность;} \quad (27)$$

кроме того, элементы матрицы  $Q_k(i, j)$  домножаются на якобианы преобразования от  $r$  к  $x$  и от  $r'$  к  $x'$ , где  $x$  — новая независимая

переменная, шаг по которой постоянен (например,  $x = r + \beta \ln r$  [1]).  $h$  в (27) — шаг по переменной  $x$ . После этого первое умножение матрицы  $Q_k(i, j)$  на матрицу или вектор соответствует интегрированию по радиусу по формуле Симпсона, второе умножение — интегрированию по радиусу по формуле прямоугольников. Так как интегрирование по радиусу сведено к перемножению матриц, выражения (25), (26) принимают вид:

$$\delta \varepsilon_{\alpha} = - \sum_{\kappa_{\beta}, k} c(k, \kappa_{\alpha}, \kappa_{\beta}) \int \frac{d\omega}{2\pi} f_{\alpha}(1) G_{\kappa_{\beta}}(\varepsilon + \omega, 1, 2) Q_k(1, 3) \times \\ \times i \Pi_k(\omega, 3, 4) Q_k(2, 4) f_{\alpha}(2), \quad (28)$$

$$\delta \varepsilon_{\sigma} = \sum_{k_1 k_2 \kappa_1 \kappa_2 \kappa_3} c(k_1, k_2, \kappa_1, \kappa_2, \kappa_3) \iint \frac{d\omega_1 d\omega_2}{4\pi^2} f_{\alpha}(1) G_{\kappa_1}(\varepsilon + \omega, 1, 2) \times \\ \times Q_{k_1}(1, 3) G_{\kappa_2}(\varepsilon + \omega_1 + \omega_2, 2, 3) Q_{k_2}(2, 4) G_{\kappa_3}(\varepsilon + \omega_2, 3, 4) f_{\alpha}(4). \quad (29)$$

Отметим, что радиальная функция Грина  $G_{\kappa}$  зависит от  $\kappa$  как от параметра. Всего мы учитываем 11 различных значений  $\kappa$ :  $-1, 1, -2, 2, -3, 3, -4, 4, -5, 5, -6$ , что соответствует учету волн  $s_{1/2}, p_{1/2}, \dots, h_{9/2}, h_{11/2}$ . В свою очередь, радиальный поляризационный оператор зависит от мультипольности кулоновского кванта  $k$  как от параметра. Мы учитываем шесть различных значений  $k$ :  $0, 1, \dots, 5$ . Вклад более высоких волн и мультиполей пренебрежимо мал.

## 7. ИНТЕГРИРОВАНИЕ ПО ЧАСТОТАМ

Полюсы функции Грина и поляризационного оператора расположены вдоль действительной оси. Полюсы функции Грина:  $\omega = \varepsilon_n + i\delta$ ,  $\omega = \varepsilon_{\gamma} - i\delta$ . Полюсы поляризационного оператора:  $\omega = -|\varepsilon_n - \varepsilon_{\gamma}| + i\delta$ ,  $\omega = |\varepsilon_n - \varepsilon_{\gamma}| - i\delta$ ,  $\delta \rightarrow 0$ ,  $n$  нумерует состояния внутри остова,  $\gamma$  — возбужденные состояния.

Поэтому численное интегрирование по  $\omega$  в формулах (28), (29) удобно проводить, развернув контур интегрирования с действительной оси в комплексную плоскость вдоль мнимой оси (рис. 6).

Реальная часть  $\omega$  выбирается так, чтобы контур интегрирования не подходил близко к полюсам. При интегрировании используется симметрия подынтегральной функции, так что проинтегриро-



вать достаточно в верхней полуплоскости и умножить результат на два. Для численного интегрирования в верхней полуплоскости представляются десять точек по правилу:

$$\operatorname{Im}(\omega_1) = 0, \quad \operatorname{Im}(\omega_n) = \operatorname{Im}(\omega_2) \cdot 2^{n-2}, \quad (30)$$

$$n = 3, \dots, 10.$$

$\operatorname{Im}(\omega_2)$  — внешний параметр программ. В вычислениях для T1 [5] мы полагали  $\operatorname{Im}(\omega_2) = 0,05$ ,  $\operatorname{Re}(\omega) = -0,1$  а.е.; для Cs [4]:  $\operatorname{Im}(\omega_2) = 0,1$ ;  $\operatorname{Re}(\omega) = -0,15$  а.е. Правило (30) обеспечивает сгущение точек по мере приближения к полюсам. Интегрирование от  $\omega_1$  до  $\omega_2$  проводится по формуле Симпсона по переменной  $\omega$ , от  $\omega_2$  до  $\omega_{10}$  — по формуле Симпсона по переменной  $n$  (см. (30)), от  $\omega_{10}$  до  $\infty$  — по асимптотической формуле, учитывающей, что подынтегральная функция при больших  $\omega$  ведет себя как  $1/\omega^3$ , что видно из выражений (20) — (24).

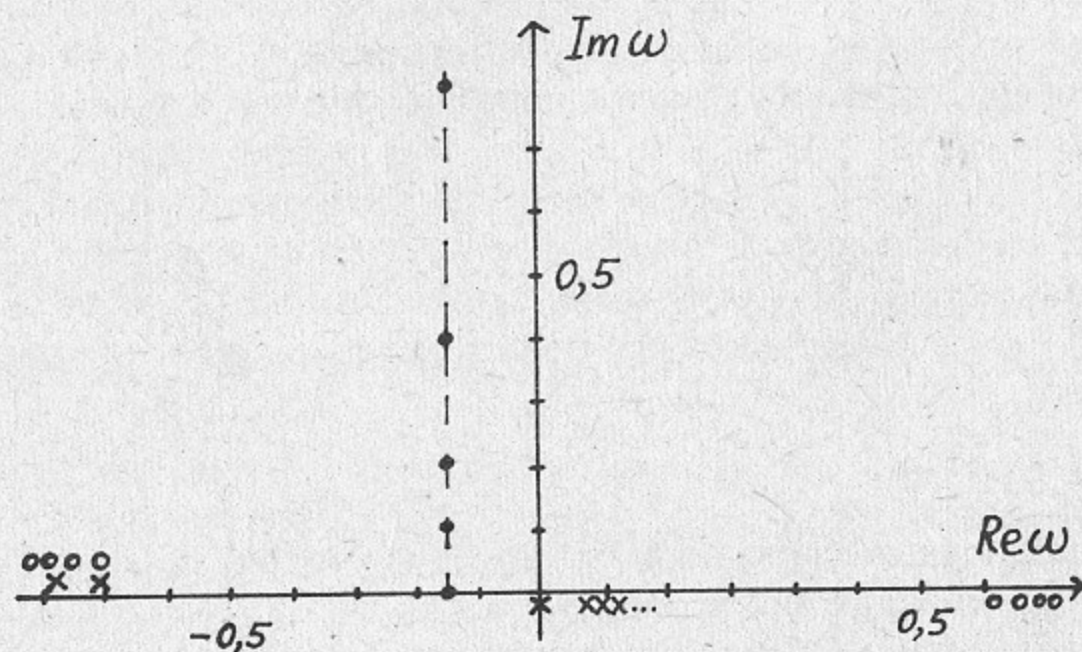


Рис. 6. Разворот контура интегрирования вдоль мнимой оси. Изображены пять первых точек контура.

× — Полюсы функции Грина  $G(\varepsilon + \omega)$ ; ○ — полюсы поляризационного оператора  $\Pi(\omega)$ .

Интеграл по частотам для прямого графика вычисляется подпрограммой INTW. Двойной интеграл по частотам для обменного графика вычисляется подпрограммой INTW2.

## 8. ВЫЧИСЛЕНИЕ ФУНКЦИИ ГРИНА

Прямое суммирование по формуле (23) является наиболее простым способом определения функции Грина. Однако, лучшую численную точность можно получить, определяя функцию Грина из решения соответствующих уравнений. Радиальная функция Грина  $G_x(\varepsilon, r, r')$  удовлетворяет уравнению

$$(H_{0x} - \varepsilon) G_x(\varepsilon, r, r') = -\delta(r - r'), \quad (31)$$

где  $H_{0x}$  — релятивистский хартри — фоковский гамильтониан (2), спроектированный на угловой спинор  $\Omega_{jlm}$ ,  $\delta(r - r')$  — дельта-функция.

В отсутствие нелокального обменного взаимодействия решение уравнения (31) имеет вид

$$G_{0x}(\varepsilon, r, r') = \frac{1}{W} f_0(r_<) f_\infty(r_>), \quad (32)$$

$$r_< = \min(r, r'), \quad r_> = \max(r, r');$$

$W = f_0(r)g_\infty(r) - f_\infty(r)g_0(r)$  — вронскиан уравнения Дирака;  $f_0, g_0$  — верхняя и нижняя компоненты решения уравнения Дирака, регулярного в нуле;  $f_\infty, g_\infty$  — верхняя и нижняя компоненты решения уравнения Дирака, регулярного на бесконечности. Отметим, что из-за разворота контура интегрирования по  $\omega$  вдоль мнимой оси (см. предыдущий параграф) параметр  $\varepsilon$  в уравнении (31) комплексный.

Вычисление  $f_0, g_0, f_\infty, g_\infty$  производится в подпрограмме DLOS. Граничные условия в нуле и на бесконечности задаются по формулам §7 из [1] так же, как для действительной энергии. Интегрирование осуществляется методом Адамса (см. [1]). Построенное таким образом аналитическое продолжение решения уравнения Дирака в комплексную плоскость приводит к фейнмановской функции Грина.

На выходе из подпрограммы DLOS функции  $f_0, f_\infty$  нормируются на вронскиан:

$$f_0^{(H)} = f_0 / \sqrt{W}, \quad (33)$$

$$f_\infty^{(H)} = f_\infty / \sqrt{W},$$

так что

$$G_{0x}(\varepsilon, r, r') = f_0^{(H)}(r_<) f_\infty^{(H)}(r_>). \quad (34)$$

Из уравнения (31) следует, что функция Грина  $G_x$ , учитывающая обменное взаимодействие, удовлетворяет уравнению Дайсона:

$$G_x(r_1, r_2) = G_{0x}(r_1, r_2) + \iint G_{0x}(r_1, r') V_{ex}(r', r'') G_x(r', r_2) dr' dr'', \quad (35)$$

где  $V_{ex}$  — оператор обменного взаимодействия. Здесь, аналогично (28), (29), внесением меры интегрирования  $dr' dr''$  в матрицу обменного взаимодействия  $V_{ex}$ , интегрирование по радиусу сводится к перемножению матриц, и уравнение (35) принимает вид

$$G_x = G_{0x} + G_{0x} V_{ex} G_x, \quad (36)$$

где  $G_x, G_{0x}, V_{ex}$  — матрицы в координатном пространстве. Решение уравнения (36) сводится к обращению матрицы

$$G_x = (1 - G_{0x} V_{ex})^{-1} G_{0x}. \quad (37)$$

Построение функции Грина  $G_{0x}$  по  $f_0^{(n)}$  и  $f_\infty^{(n)}$  (34) производится в подпрограмме GREENO, вычисление матрицы обменного взаимодействия  $V_{ex}$  — в подпрограмме YADROV, обращение матрицы методом Гаусса (см. (37)) — в подпрограмме SMATI, вычисление функции Грина  $G_x$  по формуле (37) — в подпрограмме GREEN.

### 9. ВЫЧИСЛЕНИЕ ПОЛЯРИЗАЦИОННОГО ОПЕРАТОРА. УЧЕТ ЭКРАНИРОВКИ КУЛОНОВСКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЧАСТИЦА — ДЫРКА

В формуле для поляризационного оператора (24) интегрирование по  $\varepsilon$  удобно выполнить аналитически, замкнув контур интегрирования, например, в верхней полуплоскости. После интегрирования

$$\begin{aligned} \Pi(\omega, \vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \sum_{n, \gamma} \frac{2i(\varepsilon_n - \varepsilon_\gamma)}{(\varepsilon_n - \varepsilon_\gamma)^2 - \omega^2} \psi_n^+(\vec{r}_1) \psi_\gamma(\vec{r}_1) \psi_\gamma^+(\vec{r}_2) \psi_n(\vec{r}_2) = \\ &= i \sum_n \psi_n(\vec{r}_1) [G(\varepsilon_n + \omega, \vec{r}_1, \vec{r}_2) + G(\varepsilon_n - \omega, \vec{r}_1, \vec{r}_2)] \psi_n(\vec{r}_2). \end{aligned} \quad (38)$$

Здесь суммирование проводится по заполненным состояниям остова. После отделения угловых переменных получаем для радиального поляризационного оператора

$$\begin{aligned} \Pi_k(\omega, r_1, r_2) &= i \sum_{n, \gamma} c(k, \kappa_\gamma, \kappa_n) f_n(r_1) [G_{\kappa_\gamma}(\varepsilon_n + \omega, r_1, r_2) + \\ &+ G_{\kappa_\gamma}(\varepsilon_n - \omega, r_1, r_2)] f_n(r_2), \end{aligned} \quad (39)$$

где

$$c(k, \kappa_\gamma, \kappa_n) = \frac{(2j_\gamma + 1)(2j_n + 1)}{2k + 1} \begin{pmatrix} k & j_n & j_\gamma \\ 0 & -1/2 & -1/2 \end{pmatrix}^2 \xi(k + l_n + l_\gamma).$$

Эта последняя формула и используется для вычисления поляризационного оператора. Входящие в (39) функции Грина вычисляются по схеме, изложенной в предыдущем параграфе. В сумме по заполненным состояниям достаточно учесть верхние 8—10 оболочек.

Подставив найденный поляризационный оператор (39) и функцию Грина (37) в выражения (28), (29), получим корреляционную поправку второго порядка. В смысле физического приближения она в точности эквивалентна поправке второго порядка, вычисляемой прямым суммированием по многочастичной теории возмущений (§ 2). Но способ вычисления поправки, основанной на фейнмановской диаграммной технике имеет лучшую численную точность, так как опирается на решение уравнений, а не на прямое суммирование. Однако основным достоинством фейнмановской диаграммной техники является не лучшая численная точность, а возможность точного суммирования доминирующих классов диаграмм высших порядков. Рассмотрим учет корреляций высших порядков в той очередности, в которой это происходит в реальных вычислениях.

Диаграммы, описывающие взаимодействие частица — дырка в поляризационном операторе, изображены на рис. 7. Как отмечалось в [4], эти диаграммы описывают отличие прямого потенциа-

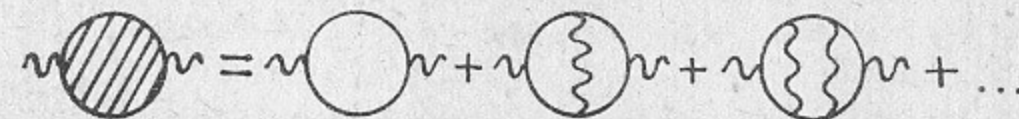


Рис. 7. Взаимодействие частица — дырка в поляризационном операторе.

ла, действующего на электроны остова, от потенциала, в котором движутся возбужденные из остова электроны. Действительно, в хартри — фоковских вычислениях для электронов остова учитывается прямое самодействие, потому что оно точно сокращается

обменным. Такого сокращения нет для электронов, возбужденных из остова, поэтому необходимо вычитать из потенциала часть, соответствующую самодействию. Диаграммы рис. 7 как раз соответствует этой процедуре. Пусть  $V_0$  — потенциал нулевой мультипольности электрона из внешней оболочки остова (например, 5р-электрон атома цезия). Тогда потенциал, который одновременно описывает состояния остова и возбужденные состояния, дается выражением

$$V_p = V - (1 - \hat{P}) V_0 (1 - \hat{P}), \quad (40)$$

где  $\hat{P}$  — проекционный оператор на орбитали остова:

$$\hat{P} = \sum_{n=1}^{N-1} |n\rangle \langle n|. \quad (41)$$

Проекционный оператор вводится для того, чтобы обеспечить ортогональность возбужденных состояний к состояниям из остова. Для заполненных состояний  $\langle V_p \rangle = \langle V \rangle$ , для возбужденных состояний  $\langle V_p \rangle = \langle V \rangle - \langle V_0 \rangle$ . Строго говоря, такое же вычитание необходимо делать для высоких мультиполей и для обменного взаимодействия. Однако, все эти вклады относительно малы.

Таким образом, мы не вычисляем прямо диаграммы на рис. 7. Вместо этого мы вычисляем функцию Грина в потенциале (40) и затем используем ее в выражении (39) для поляризационного оператора. Эта процедура эквивалентна суммированию всей цепочки диаграммы на рис. 7.

Диаграммы рис. 8 описывает экранировку кулоновского взаимодействия. Бесконечные цепочки этих диаграмм образуют мат-



Рис. 8. Экранированное кулоновское взаимодействие.

ричные геометрические прогрессии, которые суммируются точно и приводят к перенормированному поляризационному оператору в прямом графике:

$$\pi_k(\omega) = \Pi_k(\omega) [1 + iQ_k \Pi_k(\omega)]^{-1} \quad (42)$$

и к экранированному кулоновскому взаимодействию в обменном

графике:

$$\tilde{Q}_k = Q_k - iQ_k \pi_k Q_k; \quad (43)$$

$\pi_k$  подставляется вместо  $\Pi_k$  в (28), а  $\tilde{Q}_k$  вместо  $Q_k$  в (29). Все операторы в (42) и (43) являются матрицами в координатном пространстве, поэтому вычисление  $\pi$  и  $\tilde{Q}$  сводится к перемножению и обращению матриц.

## 10. ПОСТРОЕНИЕ МАССОВОГО ОПЕРАТОРА И ЕГО ИТЕРАЦИИ

Массовый оператор  $\hat{\Sigma}$  определяется так, что в первом порядке по  $\hat{\Sigma}$  среднее значение массового оператора совпадает с корреляционной поправкой к энергии. Массовый оператор с учетом взаимодействия частица—дырка и экранировки кулоновского взаимодействия изображен на рис. 9. Выражение для  $\hat{\Sigma}$  легко получается из (28), (29) с учетом (42) и (43):

$$\Sigma_a(\varepsilon, r_1, r_2) = - \sum_{\kappa\beta k} c(k, \kappa_\alpha, \kappa_\beta) \int \frac{d\omega}{2\pi} G_{\kappa\beta}(\varepsilon + \omega, 1, 2) Q_k(1, 3) \times \\ \times i \pi_k(\omega, 3, 4) Q_k(2, 4), \quad (44)$$

$$\Sigma_b(\varepsilon, r_1, r_2) = \sum_{k_1 k_2 \kappa_1 \kappa_2 \kappa_3} c(k_1, k_2, \kappa_\alpha, \kappa_1, \kappa_2, \kappa_3) \times$$

$$\times \int \frac{d\omega_1 d\omega_2}{4\pi^2} G_{\kappa_1}(\varepsilon + \omega_1, 1, 2) \times$$

$$\times \tilde{Q}_{k_1}(1, 3) G_{\kappa_2}(\varepsilon + \omega_1 + \omega_2, 2, 3) \tilde{Q}_{\kappa_2}(2, 4) G_{\kappa_3}(\varepsilon + \omega_2, 3, 4). \quad (45)$$

Вычисленный по формулам (44), (45) массовый оператор  $\hat{\Sigma} = \Sigma_a + \Sigma_b$  является матрицей в координатном пространстве. После того, как мы внесем в  $\hat{\Sigma}$  меру интегрирования  $dr$  по правилу (23) из [1], устройство матриц  $\Sigma$  и  $V_{ex}$  ( $V_{ex}$  — оператор обменного взаимодействия) становится совершенно одинаковым и их можно просто суммировать. Таким образом, учет корреляций сводится к переопределению нелокального взаимодействия, что никоим образом не сказывается на процедуре решения соответствующих уравнений. Орбитали, найденные в потенциале

$$V = V_d - V_{ex} - \hat{\Sigma}, \quad (46)$$

мы называем бракнеровскими орбиталями. Итерирование уравнений с потенциалом (46) соответствует суммированию всей цепочки диаграмм рис. 10. Как показывает опыт расчетов, достаточно учесть  $\hat{\Sigma}$  в возбужденных состояниях, оставив орбитали остова



Рис. 9. Массовый оператор.

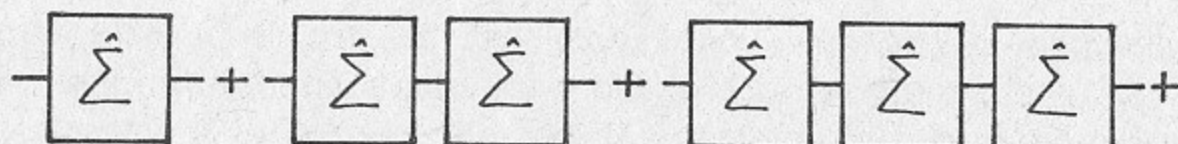


Рис. 10. Итерации массового оператора.

хартри—фоковскими. Отметим, что итерации массового оператора не зависят от способа вычисления  $\hat{\Sigma}$ , например, не зависят от того, были ли учтены в  $\hat{\Sigma}$  экранировка кулоновского взаимодействия и взаимодействие частица—дырка, а также от того, вычислялся  $\hat{\Sigma}$  в фейнмановской диаграммной технике или по многочастичной теории возмущений [9].

### 11. ПРИБЛИЖЕННЫЙ РАСЧЕТ ОБМЕННОГО ГРАФИКА

Двойной интеграл по частотам в выражениях (29), (45) делает расчет обменного графика в фейнмановской диаграммной технике (рис. 5,б) чрезвычайно громоздким. Но в щелочных атомах вклад обменного графика в корреляционную поправку к энергии составляет лишь около 10% от прямого. Это делает возможным учесть его более грубым способом, который состоит в том, что  $\Sigma_0$  (см. (45)) вычисляется по многочастичной теории возмущений [8, 9], а экранировка кулоновского взаимодействия учитывается с помощью средних экранировочных факторов  $\varphi_k$ . В грубом приближении можно считать, что экранировочные факторы зависят только от мультипольности кулоновского кванта  $k$ , а их величину определять из расчета прямого графика. Например, для Cs  $\varphi_0=0,8$ ;  $\varphi_1=0,7$ ;  $\varphi_2=0,9$ ;  $\varphi_3=0,9$ ;  $\varphi_4=1$ , ... Соответствующие расчетные

формулы принимают вид: для диаграммы на рис. 1,б:

$$\Sigma_0(\varepsilon, r_1, r_2) = \sum_{n\beta\gamma} \sum_{k_1 k_2} c(k_1, k_2, \kappa_\alpha, \kappa_\beta, \kappa_n, \kappa_\gamma) \varphi_{k_1} \varphi_{k_2} \times \\ \times \iint \frac{f_\beta(r_1) Q_{k_1}(r_1, r_4) f_n(r_4) f_\gamma(r_4) f_\beta(r_3) f_n(r_3) Q_{k_2}(r_2, r_4) f_\gamma(r_2)}{\varepsilon + \varepsilon_n - \varepsilon_\beta - \varepsilon_\gamma} dr_3 dr_4; \quad (47)$$

для диаграммы на рис. 1,г:

$$\Sigma_d(\varepsilon, r_1, r_2) = \sum_{m\gamma} \sum_{k_1 k_2} c(k_1, k_2, \kappa_\alpha, \kappa_\beta, \kappa_n, \kappa_\gamma) \varphi_{k_1} \varphi_{k_2} \times \\ \times \iint \frac{f_n(r_1) Q_{k_1}(r_1, r_3) f_m(r_3) f_\gamma(r_3) f_\gamma(r_4) f_n(r_4) Q_{k_2}(r_2, r_4) f_m(r_2)}{\varepsilon_n + \varepsilon_m - \varepsilon_\gamma - \varepsilon} dr_3 dr_4. \quad (48)$$

Алгоритм суммирования по моментам и энергиям возбужденных состояний совершенно аналогичен описанному в §2. Вычисления по формулам (47) и (48) производятся в программах VCOR2 и VCOR4, соответственно.

### 12. АТОМЫ ЦЕЗИЯ И ТАЛЛИЯ—ПРИМЕР РАСЧЕТА ВЫСШИХ ПОРЯДКОВ

В работах [4] и [5] были вычислены уровни энергии Cs и Tl с учетом высших порядков теории возмущений по остаточному кулоновскому взаимодействию. Приведем здесь результат этих работ в качестве иллюстрации использования описанной выше методики. Оба расчета проводились в фейнмановской диаграммной технике, но при этом каждый из них имел свои особенности.

Tl:

1. Расчет проводился в  $V^N$ -приближении.
2. Из корреляций высших порядков учитывалась лишь экранировка кулоновского взаимодействия.
3. Обменный график вычислялся точно.

Cs:

1. Расчет проводился в  $V^{N-1}$ -приближении.
2. Учитывались все доминирующие классы диаграмм высших порядков.
3. Обменный график вычислялся приближенно.

Так как точный расчет обменного графика чрезвычайно громоздок, для Tl была вычислена лишь энергия основного состояния.

Результат расчетов представлен в табл. 2. Из таблицы видно, что учет высших порядков значительно улучшает согласие расчетных и экспериментальных данных.

Уровни энергии Tl и Cs ( $\text{см}^{-1}$ )

Таблица 2

		<i>a</i>	<i>b</i>	<i>в</i>	<i>г</i>
Tl	$6p_{1/2}$	46296	51030	50041	49264
Cs	$6s$	27949	31835	31374	31407
	$7s$	12110	13051	12871	12872
	$6p_{1/2}$	18800	20333	20261	20229
	$6p_{3/2}$	18395	19769	19705	19675
	$7p_{1/2}$	9225	9702	9640	9641

*a* — энергия в релятивистском методе Хартри — Фока (РХФ);  
*b* — РХФ + корреляции второго порядка;  
*в* — РХФ + корреляции второго и высших порядков;  
*г* — эксперимент [13].

### 13. СПИСОК ОСНОВНЫХ ПРОГРАММ И ИХ ХАРАКТЕРИСТИКИ

а). Расчет корреляционных поправок прямым суммированием по многочастичной теории возмущений.

TENII — корреляционная поправка второго порядка по остаточному кулоновскому взаимодействию к уровням энергии атома, расчет в  $V^{N-1}$ -приближении.

TENVN, EN1234 — то же в  $V^N$ -приближении.

CORS — корреляционная поправка второго порядка к константам сверхтонкой структуры.

WEACOR — поправка к корреляционному потенциалу и E1-амплитуде, обусловленная слабым взаимодействием электронов атома с ядром.

VCOR2 — приближенный расчет массового оператора по многочастичной теории возмущений с использованием экранировочных факторов, расчет для диаграммы на рис. 1,б.

VCOR4 — то же для диаграммы на рис. 1,г

б). Расчет корреляционных поправок в фейнмановской диаграммной технике.

FGREEN — вычисление радиальных функций Грина  $G_*(37)$ .

POLGR — вычисление радиальных поляризационных операторов  $P_k$  (39).

POLU — «одевание» поляризационного оператора в кулоновское взаимодействие:  $P_k \rightarrow Q_k P_k Q_k$ .

POLOB — вычисление перенормированного поляризационного оператора  $\pi_k$  (42) и «одевание» его в кулоновское взаимодействие.

EQT13 — корреляционная поправка к энергии (28), прямой график (рис. 5,а).

EQT24 — корреляционная поправка к энергии (29), обменный график (рис. 5,б).

EQT13V — массовый оператор (44), вклад прямого графика.

В табл. 3 приведены память и характерные процессорные времена счета перечисленных выше программ. Имеется в виду время, необходимое для полного вычисления корреляционной поправки к энергии одного уровня атома на ЭВМ ЕС-1061. Следует отметить, что время счета зависит от различных расчетных параметров, поэтому все величины в табл. 3 приблизительны. Тем не менее, они позволяют сравнивать программы по потребляемым ресурсам ЭВМ и судить о требованиях, предъявляемых к ЭВМ. Так, из таблицы видно, что для реализации атомных расчетов в фейнмановской диаграммной технике необходима ЭВМ не менее мощная, чем ЕС-1061.

Таблица 3

Программа	Память (К) (1К=1024 байта)	Характерное время счета
TENII	800	20 мин
CORS	1000	1,5 час
WEACOR	1000	1,5 час
VCOR2	800	1 час
VCOR4	800	10 мин
FGREEN	700	30 мин
POLGR	1100	6—10 час
POLU	1400	20 мин
POLOB	1400	20 мин
EQT13	1000	1 мин
EQT13V	1300	3 мин
EQT24	1600	20 час

#### 14. ЧИСЛОВЫЕ ФАЙЛЫ, ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ПРОГРАММАМИ

Каждая из программ, перечисленных в предыдущем параграфе, использует один или несколько числовых файлов из тех, что приведены в табл. 4. Эти файлы формируются программами, реализующими метод самосогласованного поля для атомов [1, 2]. Для удобства дальнейших ссылок (см. § 15) для этих файлов введены обозначения F1 — F8.

Таблица 4

Числовые дисковые файлы

Обозначение	Длина (реальных чисел)	Характеристика содержащейся в файле информации
F1	1982	Координатный массив, потенциал и другая служебная информация.
F2	$902 \cdot n_D^*)$	Функции дискретного спектра.
F3	42900	Функции непрерывного спектра.
F4	$902 \cdot n_D^*)$	Диагональные поправки (см. [2]), обусловленные сверхтонким взаимодействием (СТВ) к ВФ дискретного спектра.
F5	—    —	Недиагональные СТВ поправки в ВФ дискретного спектра.
F6	19500	Диагональные СТВ поправки к ВФ непрерывного спектра.
F7	19500	Недиагональные СТВ поправки к ВФ непрерывного спектра.
F8	$59 \times 59 \times k_m$	Массовый оператор.

<sup>\*)</sup>  $n_D$  — количество ВФ дискретного спектра (занятых и возбужденных состояний). Обычно  $n_D = n_C + 20$ , где  $n_C$  — количество ВФ остова (для Cs  $n_C = 17$ ; для Tl, Pb, Bi  $n_C = 22$  и т. д.).

Кроме того, многие из этих программ сами формируют файлы на диске или магнитной ленте.

Программы VCOR2, VCOR4, EQT13V формируют дисковый файл с корреляционным потенциалом (массовым оператором). Массовый оператор свой для каждой волны ( $s_{1/2}$ ,  $p_{1/2}$ ,  $p_{3/2}$ ,  $d_{3/2}$  и т. д.) поэтому размер этого файла  $n \times n \times k_m$  реальных чисел, где

$n \times n$  — размер матрицы  $\Sigma_x(r_1, r_2)$ ,  $k_m$  — количество этих матриц. Обычно  $n = 59$ ,  $k_m = 3$ .

Программа FGREEN записывает на магнитную ленту файл с радиальными функциями Грина. Размер этого файла  $N = \frac{1}{2} n \times (n+1) n_w n_x$  комплексных чисел или  $8N$  байтов. Здесь  $n \times n$  — размер одной матрицы  $G_x(\omega, r_1, r_2)$  при фиксированных  $x$  и  $\omega$ ,  $n_w$  — количество точек по частоте,  $n_x$  — количество учтенных волн. Обычно  $n = 59$ ,  $n_w = 10$ ,  $n_x = 11$  (от  $s_{1/2}$  до  $h_{11/2}$ ). Таким образом  $N = 194700$ ,  $8N \approx 1522K$ .

Программа POLGR записывает на магнитную ленту файл с радиальными поляризационными операторами. Размер этого файла  $N = \frac{1}{2} n \times (n+1) n_w n_k$  комплексных чисел или  $8N$  байтов. Здесь  $n$  и  $n_w$  имеют прежний смысл,  $n_k$  — количество учтенных мультиполей. Обычно  $n_k = 6$ , поэтому  $N = 106200$ ,  $8N \approx 830K$ .

#### 15. ВХОДНЫЕ ДАННЫЕ ПРОГРАММЫ

Входные данные программы перечислены в табл. 5. Параметры каждой программы описаны оператором NAMELIST с названием PARAM. Одинаково поименованные параметры, как правило, имеют одинаковый смысл для разных программ. Указанием на использование дискового файла (F1, F2 и т. д.) является его название, содержащее не более чем 8 символов.

KMAX — количество учитываемых волн (обычно KMAX = 11, т. е. от  $s_{1/2}$  до  $h_{11/2}$ ).

N01, N02, N03 — параметры цикла по ВФ остова. По одной линии цикл от N01 до N02, по другой — от N01 до N03. Здесь ВФ остова нумеруется сверху.

IN — шаг по координатному массиву при вычислении кулоновских интегралов. Стандарт IN = 4, что означает, что используется лишь каждая четвертая точка.

N2 — количество ВФ остова.

ND — полное количество ВФ дискретного спектра.

INU = 0 — в интеграле по энергиям непрерывного спектра не учитывать интервал от  $v = 0$  до  $v = 0,2$  ( $\epsilon = Ry/v^2$ ).

INU = 1 — учитывать

IK — количество точек по энергиям непрерывного спектра (стандарт IK = 13).

Таблица 5

Программа	Параметры
TEN11	KMAX, N01, N02, N03, IH, N2, ND, INU, IK, KFF, KFE Файлы F1, F2, F3
VCOR2	KMAX, N01, N02, N2, ND, IK, IRE, KFF, KFE, VSC Файлы F1, F2, F3, F8
VCOR4	KMAX, N01, N02, N03, N2, ND, IK, IRE, KFF, KFE, VSC Файлы F1, F2, F3, F8
CORS	MT, GI, KMAX, N01, N02, N03, NW, IH, INU, IK, KF1, KF6, IGR, N2, ND Файлы F1—F7
FGREEN	ZZ, II, IH, N2, ND, IVN, ENRE, KMIN, KMAX, W1, NEMIN, NEMAX Файлы F1, F2
POLGR	ZZ, II, IH, N2, ND, IVN, OMRE, KKMAX, IDIS, NPOW, N01, N02, W1 Файлы F1, F2
POLU POLOB	II, KKMAX, файл F1 То же
EQT13	KMAX, NFF, KKMIN, KKMAX, II, IVN, N2, HW Файлы F1, F2
EQT13V	То же + файл F8 для чтения и F8 для записи

KFF — массив номеров функций, для которых вычисляются корреляционные поправки.

KFE — массив номеров состояний: корреляционные поправки к состояниям с номерами KFF вычисляются при энергии состояний с номерами KFE.

VSC — общий коэффициент при массовом операторе (например, для подгонки энергии). Обычно  $VSC=1$ .

MT=0 — СТВ-поправки записаны на диске.

MT=1 — СТВ-поправки записаны на магнитной ленте.

GI =  $g_I = \mu/I$  — гиромангнитный фактор ядра.

NW=1 — учитывать только диагональные СТВ-поправки.

NW=2 — учитывать диагональные и недиагональные СТВ-поправки.

KF1, KF6 — номера функций в обкладках матричного элемента СТВ:  $\langle \psi_{KF1} | H_{СТВ} | \psi_{KF6} \rangle$ .

(Необходимость вычислять недиагональные матричные элементы возникает лишь для атомов, содержащих более одного электрона поверх заполненных оболочек: Pb, Bi и т. п.)

IGR=1 — учитывать все графики рис. 1.

IGR=0 — учитывать только графики рис. 1,в и 1,г.

ZZ — Z (заряд ядра).

II — номер точки в координатном массиве, с которой начинается учет корреляционного взаимодействия.

IVN — вклад одного электрона из оболочки с номером IVN вычитается из прямого потенциала. В программе FGREEN если расчет идет в  $V^N$ -приближении, IVN должно быть равно номеру ВФ внешнего электрона. В  $V^{N-1}$ -приближении надо полагать  $IVN=0$ . В программе POLGR  $IVN=N2$  означает, что учитывается взаимодействие частица — дырка в поляризационном операторе путем вычитания из прямого потенциала вклада в него одного электрона из самой верхней оболочки остова. При  $IVN=0$  взаимодействие частица — дырка не учитывается.

ENRE — реальная часть энергии ( $\varepsilon + \omega$ ) в аргументе функции Грина.

KMIN, KMAX — параметры цикла по  $\kappa$  ( $\kappa = (-1)^{j+1+1/2} \times (j+1/2)$ ), обычно  $KMIN=1$ ,  $KMAX=11$ .

W1, HW — размер первого шага по частоте ( $\text{Im}(\omega_2)$ , см. (30)).

NEMIN, NEMAX — параметры цикла по частотам, обычно  $NEMIN=1$ ,  $NEMAX=10$ .

OMRE — реальная часть частоты в аргументе поляризационного оператора.

KKMIN, KKMAX — параметры цикла по мультипольности кулоновского кванта. Обычно  $KKMIN=1$ ,  $KKMAX=6$ , что означает, что учитываются  $K=0, 1, \dots, 5$ .

IDIS = -1 — первый запуск программы.

IDIS = 1 — последующие запуски программы при вычислении того же набора поляризационных операторов. При этом уже сосчитанные поляризационные операторы сначала читаются с ленты.

NPOW — количество радиальных поляризационных операторов, которые вычисляются за один запуск программы.

NFF — номер ВФ внешнего электрона, для которого вычисляется корреляционная поправка.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Дзюба В.А. Комплекс программ для задач атомной физики. I. Метод самосогласованного поля. — Препринт ИЯФ СО АН СССР 89-92. Новосибирск, 1989.
2. Дзюба В.А. Комплекс программ для задач атомной физики. II. Атом во внешнем поле. — Препринт ИЯФ СО АН СССР 89-142, Новосибирск, 1989.
3. *Amusia M. Ya. and Cherepkov N.A.* Case Studies in Atomic Physics, 1975, v.5, p.47.
4. *Dzuba V.A., Flambaum V.V. and Sushkov O.P.* Phys. Lett., 1989, v.A140, p.493—497.
5. *Dzuba V.A., Flambaum V.V., Silvestrov P.G. and Sushkov O.P.* Phys. Lett., 1988, v.A131, p.461.
6. *Dzuba V.A., Flambaum V.V., Kraftmakher A.Ya. and Sushkov O.P.* Preprint INP 89-110. Novosibirsk, 1989.
7. *Dzuba V.A., Flambaum V.V., Sushkov O.P.* Preprint INP 89-111. Novosibirsk, 1989.
8. Дзюба В.А., Сушков О.П., Фламбаум В.В. Известия вузов, сер. Физика, 1990, вып. 9.
9. *Dzuba V.A., Flambaum V.V., Silvestrov P.G. and Sushkov O.P.* J. Phys. B: At. Mol. Phys., 1987, v.20, p.1399.
10. *Dzuba V.A., Flambaum V.V. and Sushkov O.P.* J. Phys. B: At. Mol. Phys., 1983, v.16, p.715.
11. Гольдман И.И., Кривченков В.Д. Сборник задач по квантовой механике/Под ред. Пейликмана. — Гос. изд. техн. теор. лит., 1957.
12. *Johnson W.R., Indrees M. and Sapirstein J.* Phys. Rev., 1987, v.A35, p.3218.
13. *Moore C.E.* Atomic Energy Levels. v.3 (US Government Printing Office, Washington, DC, 1958).
14. *Dzuba V.A., Flambaum V.V. and Sushkov O.P.* J. Phys. B: At. Mol. Phys., 1984, v.17, p.1953.
15. *Dzuba V.A., Flambaum V.V. and Sushkov O.P.* Phys Scr., 1985, v.32, p.507.
16. *Blundell S.A., Johnson W.R. and Sapirstein J.* Phys. Rev., 1988, v.A38, p.4961.

В.А. Дзюба

Комплекс программ  
для задач атомной физики.  
III. Расчет корреляционных поправок

Ответственный за выпуск С.Г.Попов

Работа поступила 21 декабря 1989 г.  
Подписано в печать 15.01. 1990 г. МН 08048.  
Формат бумаги 60×90 1/16 Объем 2,5 печ.л., 2,0 уч.-изд.л.  
Тираж 230 экз. Бесплатно. Заказ № 9

Набрано в автоматизированной системе на базе фото-  
наборного автомата ФА1000 и ЭВМ «Электроника» и  
отпечатано на ротапинтере Института ядерной физики  
СО АН СССР,  
Новосибирск, 630090, пр. академика Лаврентьева, 11.