

О ВЫЧИСЛЕНИИ МАТРИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ОПЕРАТОРА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЛЯ ТРЕХКВАЗИЧАСТИЧНЫХ АТОМНЫХ СОСТОЯНИЙ В РАМКАХ РЕЛЯТИВИСТСКОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

Ю.Г. Чернякова, к.ф.-м.н., доц.,

Л.А. Витавецкая, к.ф.-м.н., доц.

П.Г. Башкарев к.ф.-м.н., доц.

Ю.В. Дубровская, к.ф.-м.н., доц.

*Одесский государственный экологический университет,
ул. Львовская, 15, 65016, Одесса, Украина, quantche@mail.ru*

Излагаются элементы калибровочно-инвариантного метода релятивистского расчета в рамках релятивистской теории возмущений (ТВ) характеристик трехквaziчастичных атомных состояний, в частности, состояний, которые соответствуют так называемым диэлектронным сателлитам спектральных линий сложных многозарядных ионов. Предлагается решение задачи разработки эффективной вычислительной схемы расчета матричных элементов соответствующего оператора возмущения для N -квaziчастичных состояний на релятивистских орбиталях калибровочно-инвариантного одноквaziчастичного приближения КЭД ТВ и ее дальнейшего использования в расчетах спектров диэлектронных сателлитов сложных атомных систем и многозарядных ионов. Для построения неэмпирического оптимизированного одноквaziчастичного приближения КЭД ТВ для многоэлектронных трехквaziчастичных систем используется релятивистский энергетический подход. Задача сводится к формулировке калибровочно-инвариантного принципа определения электронной плотности остова в атомной системе (соответственно гамильтониана нулевого приближения или, в частном случае, конкретнее параметра модельного потенциала с несколькими частицами над остовом без использования эмпирической информации. Искомый принцип оптимизации сводится к минимизации энергетического функционала, представляющего собой вклад поляризационных диаграмм четвертого порядка КЭД ТВ (второй порядок атомной ТВ).

Ключевые слова: релятивистская теория возмущений, атомные спектры, трехквaziчастичные состояния, диэлектронные сателлиты спектральных линий

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы интенсивно развивается спектроскопия многозарядных ионов, охватывающая ультрафиолетовый и рентгеновский диапазоны спектра. Повышенный интерес к развитию этой области оптики и спектроскопии атомов и многозарядных ионов традиционно стимулируется потребностями астрофизики, физики плазмы, лазерной, атомной физики, квантовой электроники, исследований по управляемому термоядерному синтезу, созданием новых схем лазеров в ВУФ и рентгеновской областях спектра, астрофизическими исследованиями и т.д. При этом возникает острая необходимость решения задач спектроскопии атомов и многозарядных ионов на принципиально новом уровне теоретической последовательности и точности. В последние годы наблюдается значительный прогресс в развитии экспериментальных методов исследования, в частности, существенное увеличение интенсивности и качества лазерного излучения, использование токамаков, источников синхротронного излучения и т.д., что дает возможность изучения все более энергетических процессов и стимулирует развитие новых, высокоточных методов расчета характеристик спектров сложных атомных систем, включая трехквaziчастичные. Между тем, несмотря на достаточно большое количество

различных теоретических методов расчета в современной атомной спектроскопии, большинство из них не способны адекватно, со спектроскопической точностью описать характеристики ДС спектральных линий сложных многозарядных ионов (напр., трехквazi-частичных, т.е. атомов, ионов с остовом заполненных электронных оболочек и 3 квaziчастичами: электронами или вакансиями над искомым остовом), в частности, Na-подобных ДС в спектрах Ne-подобных ионов. Важное значение имеет одновременный корректный учет релятивистских и сложных корреляционных эффектов, качество базиса релятивистских орбиталей, выполнение принципа калибровочной инвариантности при их построении [1-20]. Последовательный метод расчета спектров сложных, трехквaziчастичных многозарядных ионов, характеристик диэлектронных сателлитов (ДС) спектральных линий должен обязательно базироваться на методах квантовой электродинамики (КЭД).

Целью работы является разработка математических основ калибровочно-инвариантного метода релятивистского расчета в рамках КЭД теории возмущений (ТВ) характеристик трехквaziчастичных атомных состояний, в частности, которые соответствуют так называемым диэлектронным сателлитам спектральных линий сложных многозарядных ионов. Это предполагает решение задачи разработки эффектив-

ной вычислительной схемы расчета матричных элементов соответствующего оператора возмущения для N -квартичных состояний на релятивистских орбиталях калибровочно-инвариантного одноквартичного приближения КЭД ТВ и ее дальнейшего использования в расчетах спектров ДС сложных атомных систем и многозарядных ионов.

2. ТЕОРИЯ

Поскольку основные задачи работы включают развитие основ метода КЭД ТВ в расчетах характеристик трехквартичных состояний (или фактически характеристик ДС сателлитов спектральных линий) многозарядных ионов, удобно для определенности выбрать какой-либо конкретный тип систем. В частности, применительно к дальнейшему рассмотрению речь пойдет о крайне важном с точки зрения различных приложений классе Na-подобных сателлитных линий в спектрах Ne-подобных ионов. Соответственно, излагаемый аппарат ТВ далее развивается применительно к расчету уровней конфигурации типа $1s^2 2s^2 2p^5 3l_1 3l_2$, ответственных за возникновение искомого ДС. Как обычно, указанную конфигурацию можно считать трехквартичной (вакансия $2p^{-1}$, электрон $3l_1$, электрон $3l_2$ над остовом замкнутых электронных оболочек $1s^2 2s^2 2p^6$).

Полный гамильтониан уравнения Дирака для N -квартичной системы может быть записан как

$$H = \sum_i^N h(r_i) + \sum_{i>j}^N V(r_i r_j), \quad (1)$$

где $h(r)$ – одноэлектронный гамильтониан Дирака для электрона, движущегося в кулоновом поле ядра – Z/r , $V(r_i r_j)$ – оператор, описывающий межэлектронное взаимодействие. В качестве гамильтониана нулевого приближения берется

$$H_0 = \sum_i^N h(r_i) + \sum_i^N V_c(r_i | b(z)), \quad (2)$$

где $V_c(r_i | b(z))$ – некоторый центральный потенциал, имитирующий эффективный модельный потенциал (МП) остовных электронов. В качестве затравочного МП в конкретных расчетах может быть выбран любой, удовлетворяющий правильным асимптотическим условиям потенциал (см. напр., [3]), содержащий подгоночный параметр, скажем b , который с использованием идей работы [3] в дальнейшем может быть определен в рамках *ab initio* процедуры релятивистского энергетического подхода. Заметим здесь же, что в работах по использованию в расчетах аппарата ТВ с эмпирическим МП нулевого приближения (см., напр., [1-5]) искомый параметр выбирается из условия лучшего совпадения с экспериментальными значениями одноквартичных уровней энергий (энергии одного электрона над остовом десяти электронов или одной вакансии этом же остове). Для ряда атомов и ионов имеются достаточно точно опреде-

ленные экспериментальные и теоретические данные (см., напр., [6-8]). Однако, нередко для сложных ионов такие данные отсутствуют вообще. В развиваемом нами варианте КЭД ТВ нулевое приближение, как уже подчеркивалось выше, генерируется *ab initio* эффективным гамильтонианом, в отличие от работ [2-5].

Оператор возмущения содержит компенсирующий член $-(-V_C)$

$$V_{\text{int}} = - \sum_i^{N_{\text{tot}}} V_C(r_i) + \sum_{i>j}^{N_{\text{tot}}} V(r_i r_j). \quad (3)$$

Далее все состояния с двумя и тремя квартичными над остовом рассматриваются как группа вырожденных состояний, и секулярная матрица M рассчитывается между всеми этими состояниями. Например, для случая системы с тремя квартичными (электрон- электрон- вакансия) над остовом имеем

$$M^{(1)} = -E(n_1 l_1 j_1) - E(n_2 l_2 j_2) + E(n_3 l_3 j_3), \quad (4)$$

где $E(nlj)$ – одноквартичная энергия, отсчитанная от остова. Следует подчеркнуть, что в таком варианте одноквартичные релятивистские, радиационные эффекты релятивистской ТВ могут быть учтены автоматически благодаря использованию адекватного нулевого *ab initio* приближения. В первом порядке ТВ нет диаграмм, содержащих компенсационный член $-V_C(r)$ полного возмущения V_{int} и нужно рассчитать только матричные элементы оператора (3). Эти матричные элементы дают стандартный вклад первого порядка в $M^{(2)}$ (для случая двух электронных состояний), который можно записать в известном виде

$$M_1^{(2)} = \langle n_1 l_1 j_1 \ n_2 l_2 j_2 [J] | V_{\text{int}} | n_4 l_4 j_4 \ n_3 l_3 j_3 [J] \rangle = \\ = P_1 P_2 (-1)^{1+j_2+j_4+J} [(2j_1+1)(2j_2+1)(2j_3+1)(2j_4+1)]^{1/2} \times \\ \times \sum_{i,k} \sum_a \left\{ \begin{matrix} j_i j_k J \\ j_2 j_1 a \end{matrix} \right\} (\delta_{i,3} \delta_{k,4} + (-1)^J \delta_{i,4} \delta_{k,3}) \cdot Q_a, \quad (5)$$

где

$$P_1 = \begin{cases} 1 & \text{при } n_1 l_1 j_1 \neq n_2 l_2 j_2 \\ 1/2 & \text{при } n_1 l_1 j_1 = n_2 l_2 j_2 \end{cases}, \\ P_2 = \begin{cases} 1 & \text{при } n_3 l_3 j_3 \neq n_4 l_4 j_4 \\ 1/2 & \text{при } n_3 l_3 j_3 = n_4 l_4 j_4 \end{cases}.$$

Здесь величина Q_a выражаются через радиальные интегралы типа Слэтера. Энергия состояния представляется в виде ряда ТВ:

$$E(n_1 l_1 j_1 n_2 l_2 j_2 n_3^{-1} l_3^{-1} j_3^{-1}) = E^0 + \Delta E_1 + \Delta E_2 + \dots, \quad (6)$$

где E^0 – поправка нулевого приближения; ΔE_1 – поправка первого порядка и т.д..

Рассмотрим далее детальнее вопрос определения матричных элементов оператора возмущения на волновых функциях N -квартичных состояний, используя известный метод Фано.

При расчете матрицы энергии наиболее трудоемкой задачей является вычисление угловых частей матричных элементов, которые возникают при интегрировании по угловым и суммировании по спиновым переменным (см., напр., [1-4]).

Двухквазичастичные операторы связывают по два электрона из начального состояния ψ с двумя электронами из конечного состояния ψ' . Фано предложил обозначить номера оболочек, содержащих эти два "взаимодействующих" электрона в ψ через ρ и σ ($\rho \leq \sigma$) и в ψ' через ρ', σ' ($\rho' \leq \sigma'$). Тогда формула Фано для расчета матричного элемента двухчастичного оператора запишется в виде

$$\langle \psi | V | \psi' \rangle = \sum_{\rho\sigma\rho'\sigma'} \frac{1}{2} (-1)^{\Delta P} [N_\rho (N_\sigma - \delta_{\rho\sigma}) N_{\rho'} (N_{\sigma'} - \delta_{\rho'\sigma'})]^{1/2} \times \\ - \sum_K R_K(\rho\sigma, \rho'\sigma') (l_\rho \| C^K \| l_\sigma) (l_{\sigma'} \| C^K \| l_{\rho'}) A_K(2), \quad (7)$$

где N_λ - количество электронов в λ -ой оболочке

$$\Delta P = \sum_{\lambda=\rho+1}^{\sigma} \bar{N}_\lambda - \sum_{\lambda=\rho'+1}^{\sigma'} N_\lambda,$$

\bar{N}_λ - количество "не взаимодействующих" электронов в λ -ой оболочке;

R_K - радиальные интегралы

$$R_K(\rho\sigma; \rho'\sigma') = \\ = \int dr_1 dr_2 r_1^2 r_2^2 R_{n_\rho l_\rho}(r_1) R_{n_\sigma l_\sigma}(r_2) \frac{r_1^K}{r_2^{K+1}} R_{n_{\rho'} l_{\rho'}}(r_2) R_{n_{\sigma'} l_{\sigma'}}(r_1); \\ A_K(1) = [1 + (1 - \delta_{\rho\sigma})(1 - \delta_{\rho'\sigma'})] [(2l_\sigma + 1)(2l_{\rho'} + 1)]^{-1/2} * \\ * \sum_{(\bar{\alpha}\bar{L})} G_\rho G_\sigma G_{\rho'} G_{\sigma'} R_S(1) R_L(1); \\ A_K(2) = [2 - \delta_{\rho\sigma} - \delta_{\rho'\sigma'}] [(2l_\sigma + 1)(2l_{\rho'} + 1)]^{-1/2} * \\ * \sum_{(\bar{\alpha}\bar{L})} G_\rho G_\sigma G_{\rho'} G_{\sigma'} R_S(2) R_L(2). \quad (8)$$

Здесь G_ρ - генеалогические коэффициенты для оболочки ρ

$$G_\rho = (l^{N_\rho - 1} \bar{\alpha}_\rho \bar{S}_\rho \bar{L}_\rho l_\rho s_\rho L_\rho | l_\rho N_\rho \alpha_\rho S_\rho L_\rho).$$

Коэффициенты $R_L(1)$, $R_S(1)$, $R_L(2)$, $R_S(2)$ выражают так называемые "коэффициенты пересвязи", которые представляют собой параметры преобразования волновой функции из одной схемы связи в другую:

$$R_L(1) = \langle \bar{L}_1 \dots \bar{L}_{\rho-1} (\bar{L}_\rho) l_\rho \dots [\bar{L}_\sigma (l_\sigma k) l_\sigma] l_\sigma \dots \alpha \bar{L}_1 \dots \bar{L}_{\rho-1} (\bar{L}_\rho) l_\rho \dots (\bar{L}_\sigma) l_\sigma \dots \alpha \rangle, \\ R_L(2) = \langle \bar{L}_1 \dots \bar{L}_{\rho-1} (\bar{L}_\rho) l_\rho \dots [\bar{L}_\sigma (l_\sigma k) l_\sigma] l_\sigma \dots \alpha \bar{L}_1 \dots \bar{L}_{\rho-1} (\bar{L}_\rho) l_\rho \dots [\bar{L}_\sigma (k) l_\sigma] l_\sigma \dots \alpha \rangle, \\ R_S(1) = \langle \bar{S}_1 \dots \bar{S}_{\rho-1} (\bar{S}_\rho s_\rho) s_\rho \dots (\bar{S}_\sigma s_\sigma) s_\sigma \dots \alpha \bar{S}_1 \dots \bar{S}_{\rho-1} (\bar{S}_\rho s_\rho) s_\rho \dots (\bar{S}_\sigma s_\sigma) s_\sigma \dots \alpha \rangle, \\ R_S(2) = \langle \bar{S}_1 \dots \bar{S}_{\rho-1} (\bar{S}_\rho s_\rho) s_\rho \dots (\bar{S}_\sigma s_\sigma) s_\sigma \dots \alpha \bar{S}_1 \dots \bar{S}_{\rho-1} (\bar{S}_\rho s_\rho) s_\rho \dots (\bar{S}_\sigma s_\sigma) s_\sigma \dots \alpha \rangle. \quad (9)$$

С вычислительной точки зрения, расчет коэффициентов пересвязи представляет достаточно громозд-

кую задачу. Согласно алгоритму Берка [2], любой коэффициент пересвязи можно выразить через суммы произведений W коэффициентов Рака. Отметим, что различные версии метода Фано использовались в ряде работ (см., напр., [1-3]).

Приведем далее матричные элементы оператора возмущения, построенные на волновых функциях трехквазичастичных состояний. Искомые элементы выражаются через матричные элементы, рассчитанные между двух-квазичастичными состояниями, причем эти выражения различны в зависимости от того, отличаются или нет квантовые числа в каждой из оболочек. Приведем выражения матричного элемента 1-го порядка. Для трех возможных типов трехквазичастичных оболочек: однородно-однородной, однородно-неоднородной и неоднородно-неоднородной электронных конфигураций.

В каждом случае выражение для матричного элемента разбивается на два слагаемых; при этом, первое слагаемое содержит взаимодействие электрон-электрон, второе слагаемое - взаимодействие электрон-вакансия. В приведенных ниже формулах γ означает тройку квантовых чисел $h l j$, степень (-1) относится к вакансии, черта над буквой обозначает квантовые числа конечного состояния. Для матричного элемента однородно-однородной конфигурации

$$\langle \gamma_1^2 (J_{12}) \gamma_3^{-1} J | M | \bar{\gamma}_1^2 (\bar{J}_{12}) \bar{\gamma}_3^{-1} J \rangle$$

Имеем:

а) электрон-электронная часть

$$\langle \gamma_1^2 (J_{12}) | M | \bar{\gamma}_1^2 (J_{12}) \rangle \delta(\gamma_3, \bar{\gamma}_3) \delta(J_{12}, \bar{J}_{12});$$

б) электрон-вакансия часть

$$2 \sum_{J_2} \langle \gamma_1 \gamma_3^{-1} (J_{12}) | M | \gamma_1 \bar{\gamma}_3^{-1} (J_{12}) \rangle \delta(\gamma_1 \bar{\gamma}_1) (-1)^{J_{12} + \bar{J}_{12} + j_3 + \bar{j}_3 + j_1 + \bar{j}_1} * \\ * \begin{Bmatrix} J_{12} & j_3 & J \\ J_{13} & j_1 & j_1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar{J}_{12} & \bar{j}_3 & J \\ J_{13} & \bar{j}_1 & \bar{j}_1 \end{Bmatrix}.$$

Матричный элемент типа

$$\langle \gamma_1^2 (J_{12}) \gamma_3^{-1} J | M | \bar{\gamma}_1 \bar{\gamma}_2 (\bar{J}_{12}) \bar{\gamma}_3^{-1} J \rangle$$

однородно-неоднородной электронной конфигурации содержит два слагаемых:

а) электрон-электронная часть

$$\langle \gamma_1^2 (J_{12}) | M | \bar{\gamma}_1 \bar{\gamma}_2 (\bar{J}_{12}) \rangle \delta(\gamma_3, \bar{\gamma}_3) \delta(J_{12}, \bar{J}_{12}) \delta(\pi_1 \pi_2),$$

где $\pi_1 = (-1)^2$;

б) электрон-вакансия часть

$$\delta(\pi_{13}, \bar{\pi}_{13}) \sum_{J_{13}} \langle \gamma_1 \gamma_3^{-1} (J_{13}) | M | \bar{\gamma}_1 \bar{\gamma}_3^{-1} (J_{13}) \rangle \delta(\gamma_1 \bar{\gamma}_2) \\ (-1)^{J_{12} + \bar{J}_{12} + j_3 + \bar{j}_3 + j_1 + \bar{j}_1} * \begin{Bmatrix} J_{12} & j_3 & J \\ J_{13} & j_1 & j_1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar{J}_{12} & \bar{j}_3 & J \\ J_{13} & \bar{j}_1 & \bar{j}_1 \end{Bmatrix} +$$

$$\begin{aligned}
 & + \delta(\pi_{13}, \bar{\pi}_{23}) \sum_{J_{13}} \langle \gamma_1 \gamma_3^{-1}(J_{13}) | M | \bar{\gamma}_1 \bar{\gamma}_3^{-1}(J_{13}) \rangle \delta(\gamma_1 \bar{\gamma}_1) \\
 & (-1)^{J_{12} + j_3 + \bar{j}_3 + j_1 + j_2} * \left\{ \begin{matrix} J_{12} & j_3 & J \\ J_{13} & j_1 & j_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \bar{J}_{12} & \bar{j}_3 & J \\ J_{13} & \bar{j}_2 & \bar{j}_1 \end{matrix} \right\} * \\
 & * (J_{13}) \sqrt{2(J_{12})(\bar{J}_{12})},
 \end{aligned}$$

где $\pi_{ij} = (-1)^{\ell_i + \ell_j}$.

И, наконец, для неоднородно-неоднородной электронной конфигурации

$$\langle \gamma_1 \gamma_2(J_{12}) \gamma_3^{-1} J | M | \bar{\gamma}_1 \bar{\gamma}_2(\bar{J}_{12}) \bar{\gamma}_3^{-1} J \rangle$$

имеем:

а) электрон-электронная часть

$$\langle \gamma_1 \gamma_2(J_{12}) | M | \bar{\gamma}_1 \bar{\gamma}_2(J_{12}) \rangle \delta(\gamma_3, \bar{\gamma}_3) \delta(J_{12}, \bar{J}_{12});$$

б) электрон-вакансная часть

$$\begin{aligned}
 & \sum_{J_{13}} \langle \gamma_1 \gamma_3^{-1}(J_{13}) | M | \bar{\gamma}_1 \bar{\gamma}_3^{-1}(J_{13}) \rangle \delta(\gamma_2 \bar{\gamma}_2) (-1)^{J_{12} + \bar{J}_{12} + j_3 + \bar{j}_3 + 1} * \\
 & * \left\{ \begin{matrix} J_{12} & j_3 & J \\ J_{13} & j_2 & j_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \bar{J}_{12} & \bar{j}_3 & J \\ J_{13} & \bar{j}_2 & \bar{j}_1 \end{matrix} \right\} (J_{13}) \sqrt{2(J_{12})(\bar{J}_{12})} + \\
 & \sum_{J_{13}} \langle \gamma_2 \gamma_3^{-1}(J_{13}) | M | \bar{\gamma}_2 \bar{\gamma}_3^{-1}(J_{13}) \rangle \delta(\gamma_1 \bar{\gamma}_1) (-1)^{j_2 + j_3 + \bar{j}_2 + \bar{j}_3} * \\
 & * \left\{ \begin{matrix} J_{12} & j_3 & J \\ J_{13} & j_1 & j_2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \bar{J}_{12} & \bar{j}_3 & J \\ J_{13} & \bar{j}_1 & \bar{j}_2 \end{matrix} \right\} (J_{13}) \sqrt{2(J_{12})(\bar{J}_{12})} + \\
 & \sum_{J_{13}} \langle \gamma_1 \gamma_3^{-1}(J_{13}) | M | \bar{\gamma}_2 \bar{\gamma}_3^{-1}(J_{13}) \rangle \delta(\gamma_2 \bar{\gamma}_1) (-1)^{J_{12} + \bar{J}_{12} + \bar{j}_3 + \bar{j}_2 + j_2} * \\
 & * \left\{ \begin{matrix} J_{12} & j_3 & J \\ J_{13} & j_2 & j_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \bar{J}_{12} & \bar{j}_3 & J \\ J_{13} & \bar{j}_1 & \bar{j}_2 \end{matrix} \right\} (J_{13}) \sqrt{2(J_{12})(\bar{J}_{12})} + \\
 & \sum_{J_{13}} \langle \gamma_1 \gamma_3^{-1}(J_{13}) | M | \bar{\gamma}_1 \bar{\gamma}_3^{-1}(J_{13}) \rangle \delta(\gamma_1 \bar{\gamma}_2) (-1)^{\bar{J}_{12} + j_3 + \bar{j}_3 + j_2 + \bar{j}_2} * \\
 & * \left\{ \begin{matrix} J_{12} & j_3 & J \\ J_{13} & j_1 & j_2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \bar{J}_{12} & \bar{j}_3 & J \\ J_{13} & \bar{j}_2 & \bar{j}_1 \end{matrix} \right\} (J_{13}) \sqrt{2(J_{12})(\bar{J}_{12})}.
 \end{aligned}$$

Подробные формулы для других матричных элементов можно найти, напр., в [1-3]. Важно подчеркнуть, точность вычисления приведенных выше матричных элементов разумеется определяется качеством соответствующих базисов волновых функций нулевого приближения.

Наша идея при вычислении приведенных выше матричных элементов заключается в использовании так называемых оптимизированных базисов релятивистских орбиталей. Для их генерации предлагается использовать очень эффективную релятивистскую калибровочно-инвариантную процедуру [9].

Отметим, что эта процедура построения оптимизированного базиса релятивистских орбиталей нулевого приближения ТВ с успехом использовалась при расчетах спектров, вероятностей переходов и сил осцилляторов, одно- и двухквартичных атомов и многозарядных ионов, сечений возбуждения, ионизации, рассеяния с участием атомов, ионов, электронов и фотонов, а также в ряде специфических задач мезоатомной и ядерной физики (см., напр., [6-10]) и по-

зволила достичь спектроскопической точности описания искомым характеристикам. В нашей работе впервые искомым неэмпирическим принципом построения базиса релятивистских орбиталей предлагается использовать при формулировке последовательного метода ТВ для описания характеристик ДС спектральных линий многозарядных ионов (трехквартичных систем).

Для построения неэмпирического оптимизированного одноквартичного приближения КЭД ТВ для многоэлектронных трехквартичных систем согласно [10] используется релятивистский энергетический подход. Задача сводится к формулировке калибровочно-инвариантного принципа определения электронной плотности остова ρ_c в атомной системе (соответственно гамильтониана нулевого приближения или, в частном случае, конкретнее параметра модельного потенциала $V_c(r_i|b(z))$ с несколькими частицами над остовом без использования эмпирической информации. Искомый принцип оптимизации ρ_c сводится к минимизации энергетического функционала, представляющего собой вклад поляризационных диаграмм четвертого порядка КЭД ТВ (второй порядок атомной ТВ). В четвертом порядке КЭД ТВ появляются диаграммы, вклад которых связан с поляризацией атомного остова над остовными квартичными частицами в, скажем, трехквартичной системе. Строго говоря, вклад этих диаграмм будет зависеть от калибровки фотонного пропагатора или потенциалов электромагнитного поля (калибровочно-неинвариантные вклады). Используя далее фундаментальный принцип минимизации вклада поляризационных диаграмм, связанного с обменом продольными фотонами в мнимую часть электронной энергии системы $\text{Im}E$, становится возможной генерация оптимальных базисов релятивистских орбиталей.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе изложена схема вычисления матричных элементов оператора возмущения для N -квартичных состояний на релятивистских орбиталях нулевого приближения ТВ. При этом предложено в вычислительной схеме использование базисов релятивистских орбиталей, или что тоже самое базиса релятивистских волновых функций нулевого приближения ТВ, сгенерированного на основе фундаментального принципа минимизации вклада поляризационных диаграмм, связанного с обменом продольными фотонами в мнимую часть электронной энергии системы. Очевидно, использование такого принципа позволяет обеспечить сохранения принципа калибровочной инвариантности и повысить качество учета вкладов так называемых многоквартичных обменно-корреляционных эффектов, что в результате может существенно повысить и точность расчета характеристик трехквартичных состояний в рамках метода релятивистской многоквартичной ТВ с модельным ненулевым приближением.

REFERENCE

- Burkhalter P., Schneider R., Dozier C.M., Cowan R. Dielectronic satellite spectra of Na-like ions in laser-produced plasma. *Phys.Rev.A*, 1978, vol. 18, pp. 718-725.
- Driker M.N., Ivanova E.P., Ivanov L.N., Shestakov A.F. Relativistic calculation of spectra of 2-2 transitions in O-and F-like atomic ions. *J.Quant.Spectr. Rad.Transfer*, 1982, vol. 28, no. 6, pp. 531-535.
- Burkhalter P., Nagel D.J. Advanced diagnostics based on observation of dielectronic satellite spectra of Ne-and Na-like ions in a laser produced plasmas. *Phys.Rev.A*, 1975, vol. 11, no. 3, pp. 782-788.
- Corliss C., Sugar J. Energy levels of iron. *J.Phys.Chem.Ref.Data*, 1982, vol. 11, no. 1, pp. 135-241.
- Fortov V.E., Bepabov V.E., Kulish M.I., Kuz S.I. *Experimental study of optical properties of strongly coupled plasmas. Strongly Coupled Plasma Physics*. N-Y.: Elsevier Sci.Publ., 1990. 571 p.
- Trabert E., Saathoff G., Wolf A. M1/E2 decay rates in CoXI, NiXII, CuXIII measured at heavy-ion storage ring. *J.Phys.B.:At.Mol.Opt.Phys.*, 2004, vol. 37, pp. 945-952.
- TFR group, Cornille M., Dubau J., Loulergue M. Charge-dependent wavelengths shifts and line intensities in the dielectronic satellite spectrum of helium-like ions. *Phys.Rev.A*, 1985, vol. 32, no. 5, pp. 3000-3010.
- Jupen W.C., Denne B, Martinson I. Transitions in Al-like, Mg-like, Na-like Kr, Mo, observed in the JET Tokamak. *Phys.Scripta*, 1990, vol. 41, no. 5.- P. 669-674.
- Gillaspy J.D. EBIT spectra of highly stripped ions from the visible to the X ray. *Phys.Scripta*, 1996, vol. 65, pp. 169-174.
- Sobelman I.I. *Introduction to the theory of atomic spectra*. Moscow: Nauka, 1977. 213 p.
- Grant I.P. *Relativistic Quantum Theory of Atoms and Molecules*. Oxford, 2008. 650 p.
- Quiney H. Relativistic Quantum Mechanics of Atoms and Molecules. *New Trends in Quantum Systems in Chemistry and Physics*. Springer, 2002, vol. 6, pp. 135-173.
- Bell K.L., Berrington K., Crothers D., Hibbert A., Taylor K.T. BERTHA: 4-Component Relativistic Molecular Quantum Mechanics. *Supercomputing, Collision Processes, and Application, Series: Physics of Atoms and Molecules*. Springer, 2002, pp. 213-224.
- Glushkov A.V. *Relativistic Quantum Theory. Quantum, mechanics of Atomic Systems*. Odessa: Astroprint, 2008. 700 p.
- Ivanov L.N., Ivanova E.P. Extrapolation of atomic ion energies by model potential method: Na-like spectra. *Atom.Dat. Nuc. Dat.Tab.*, 1979, vol. 24, pp. 95-121.
- Glushkov A.V., Ivanov L.N., Ivanova E.P. *Generalized energy approach in relativistic theory of atom. Autoionization Phenomena in Atoms*. Moscow: Moscow State Univ., 1986.
- Ivanova E.P., Gulov A.V. Theoretical investigation of the neon isoelectronic sequence. *Atom.Data.Nucl.Data.Tabl.*, 1991, vol. 49, pp. 1-64.
- Gogava A.L., Ivanova E.P. Calculation of Na-like spectra-satellites to 2-3 transitions in Ne-like ions. *In book: Spectroscopy of autoionization states of atoms and ions*. Moscow: Nauka, 1988, pp. 212-256.
- Ivanova E.P., Glushkov A.V. Theoretical investigation of spectra of multicharged ions of F-and Ne-like isoelectronic sequences. *J.Quant.Spectr.Rad.Tr.*, 1986, vol. 36, pp. 127-145.
- Ivanova E.P., Grant I.P. Oscillator strength anomalies in Ne isoelectronic sequence with applications to X-ray laser modeling. *J.Phys.B.*, 1998, vol. 31, pp. 2871-2883.

ON THE CALCULATION OF THE MATRIX ELEMENTS OF THE OPERATOR OF INTERACTION FOR THREE-QUASIPARTICLE ATOMIC STATES IN THE FRAMEWORK OF RELATIVISTIC PERTURBATION THEORY

Yu.G. Chernyakova, cand.ph.-math.sci., associated prof.,

L.A. Vitavetskaya, cand.ph.-math.sci., associated prof.

P.G. Bashkaryova, cand.ph.-math.sci., associated prof.

Yu.V. Dubrovskaya, cand.ph.-math.sci., associated prof.

*Odessa State Environmental University, 15,
Lvivska St., 65016 Odessa, Ukraine, quantche@mail.ru*

Sets out the elements of a gauge-invariant method of relativistic calculations within the relativistic-relativistic perturbation theory characteristics three-quasiparticle atomic states, in particular, states that correspond to the so-called dielectrons satellites of spectral lines of multiply charged ions complex. Proposed to develop an effective solution to the problem of the computational scheme for calculating matrix elements corresponding perturbation operator for the N-quasiparticle states in the relativistic orbitals gauge-invariant QED TV Single- quasiparticle approach and its use in calculations of the spectra dielectronic satellites complex atomic systems, and multiply charged ions. In order to construct the optimized nonempirical single- quasiparticle approximation of QED PT for mulkti-electron three-quasiparticle atomic system it is used an relativistic energy approach. The problem is reduced to the formulation of a gauge-invariant principle of determining the electron density of the core in the atomic system (or zero-order Hamiltonian, or in the particular case, the specific parameters of the model-building with several particles of the core without the use of empirical data). Seeking the principle of optimization is reduced to minimization of the energy functional, representing the contribution of the QED PT fourth-order polarization diagrams (second-order atomic PT).

Keywords: relativistic perturbation theory, atomic spectra, three-quasiparticle state, electronic satellites of spectral lines.

**ПРО ОБЧИСЛЮВАННЯ МАТРИЧНИХ ЕЛЕМЕНТІВ ОПЕРАТОРА ВЗАЄМОДІЇ
ДЛЯ ТРЬОХКВАЗИЧАСТИЧНИХ АТОМНИХ СТАНІВ У РАМКАХ
РЕЛЯТИВІСТСЬКОЇ ТЕОРІЇ ЗБУРЕННЯ**

Ю.Г. Чернякова, к.ф.-м.н., доц.,

Л.А. Вітавецька, к.ф.-м.н., доц.,

П.Г. Башкар'ов, к.ф.-м.н., доц.

Дубровська Ю.В., к.ф.-м.н., доц.

*Одеський державний екологічний університет,
вул. Львівська, 15, 65016 Одеса, Україна, quantche@mail.ru*

Викладаються елементи калібрувально-інваріантного методу релятивістського розрахунку в рамках релятивістської теорії збурень характеристик трьохквартичних атомних станів, зокрема, станів, які відповідають так званим діелектронним сателітам спектральних ліній складних багатозарядних іонів. Пропонується рішення задачі розробки ефективної обчислювальної схеми розрахунку матричних елементів відповідного оператора збурення для N -квартичних станів на релятивістських орбіталях калібрувально-інваріантного одноквартичного наближення КЕД теорії збурень (ТЗ) і її подальшого використання в розрахунках спектрів діелектронних сателітів складних атомних систем і багатозарядних іонів. Для побудови неемпіричного оптимізованого одноквартичного наближення КЕД ТЗ для багатоелектронних трьохквартичних систем використовується релятивістський енергетичний підхід. Завдання зводиться до формулювання калібрувально-інваріантного принципу визначення електронної щільності остова в атомній системі (відповідно гамільтониана нульового наближення або, в окремому випадку, конкретніше параметра модельного потенціалу з декількома частинками над остовом без використання емпіричної інформації. Бажаємий принцип оптимізації зводиться до мінімізації енергетичного функціонала, який представляє собою внесок поляризаційних діаграм четвертого порядку КЕД ТЗ (другий порядок атомної ТЗ).

Ключові слова: релятивістська теорія збурень, атомні спектри, трьохквартичні стани, електронні сателіти спектральних ліній

*Дата першого представлення: 05.06.2015
Дата поступлення окончательной версии: 25.08.15
Дата опубликования статьи: 24.09.2015*