

2

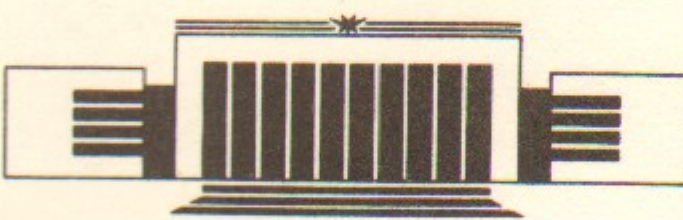


ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ СО АН СССР

В.А. Дзюба

**КОМПЛЕКС ПРОГРАММ  
ДЛЯ ЗАДАЧ АТОМНОЙ ФИЗИКИ.  
II. АТОМ ВО ВНЕШНЕМ ПОЛЕ**

ПРЕПРИНТ 89-142



НОВОСИБИРСК



Комплекс программ  
для задач атомной физики.  
II. Атом во внешнем поле

В.А. Дзюба

Институт ядерной физики  
630090, Новосибирск 90, СССР

АННОТАЦИЯ

Описана реализация метода зависящих от времени уравнений Хартри—Фока и уравнений самосогласованного атома во внешнем стационарном поле для случаев взаимодействия электронов с магнитным полем ядра, с электрическим полем фотона, со слабым полем ядра, а также для совместного учета слабого взаимодействия и взаимодействия с полем фотона, необходимого для расчета эффекта несохранения четности.

1. ВВЕДЕНИЕ

Данная работа является продолжением работы [1] и посвящена описанию реализации метода зависящих от времени уравнений Хартри—Фока (ЗВХФ). Этот метод эквивалентен известному приближению случайных фаз [2] и позволяет рассчитывать взаимодействие атома с внешним полем в приближении самосогласованного поля атома. Итерации уравнений ЗВХФ соответствуют учету части остаточного кулоновского взаимодействия, которую часто называют поляризационными поправками (в отличие от собственно корреляционных поправок, которые в этом методе не учитываются). Физический смысл поляризационных поправок состоит в том, что внешнее поле меняет волновые функции (ВФ) электронов атома, что, в свою очередь, приводит к изменению самосогласованного потенциала.

В данной работе рассматривается случай атома с одним внешним электроном поверх замкнутых подоболочек (Cs, Fr, Tl и т. п.). Для таких атомов удобным является так называемое  $V^{N-1}$ -приближение, которое состоит в том, что процедура самосогласования проводится лишь для замкнутых оболочек остова, а состояния внешнего электрона вычисляются в поле замороженного остова.

В работе [1] было описано простое обобщение уравнений Хартри—Фока для атомов с замкнутыми оболочками на случай, когда имеется один или несколько внешних электронов. А именно, сферически-симметричная часть поля внешних электронов учиты-



вается в прямом самосогласованном потенциале. Такое изменение прямого потенциала не меняет вида уравнений ЗВХФ и делает возможным использования их как в  $V^N$ -приближении для атомов с одним внешним электроном, так и в  $V^N$ - и  $V^{N-1}$ -приближениях для атомов с несколькими электронами.

Данный комплекс был ориентирован на расчеты для тяжелых атомов, поэтому все используемые уравнения написаны в релятивистском варианте. Все программы написаны на языке FORTRAN-IV и реализованы на ЭВМ ЕС-1061.

## 2. УРАВНЕНИЯ ЗАВИСЯЩЕГО ОТ ВРЕМЕНИ МЕТОДА ХАРТРИ—ФОКА

В присутствии периодического по времени возмущения вида

$$\hat{H}_{int} = \hat{f} e^{-i\omega t} + \hat{f}^+ e^{i\omega t} \quad (1)$$

полная волновая функция атома может быть записана как слейтеровский детерминант, составленный из одноэлектронных функций вида [3]

$$\bar{\psi} e^{-i\epsilon t} = (\psi + \psi^{(-)} e^{-i\omega t} + \psi^{(+)} e^{i\omega t}) e^{-i\epsilon t}, \quad (2)$$

где  $\psi$  удовлетворяют «невозмущенным» уравнениям Хартри—Фока

$$H_0 \psi = \epsilon \psi, \quad (3)$$

а  $\psi^{(-)}$  и  $\psi^{(+)}$  в линейном по  $\hat{H}_{int}$  приближении определяются из уравнений

$$\begin{aligned} (H_0 - \epsilon - \omega) \psi^{(-)} &= -(\hat{f} + \delta V) \psi, \\ (H_0 - \epsilon + \omega) \psi^{(+)} &= -(\hat{f}^+ + \delta V^+) \psi; \end{aligned} \quad (4)$$

$H_0$  — релятивистский хартри—фоковский гамильтониан:

$$H_0 = c\bar{\alpha}\bar{p} + (\beta - 1)mc^2 - Ze^2/r + \hat{V}; \quad (5)$$

$\bar{\alpha}$ ,  $\beta$  — дираковские матрицы;  $Ze$  — заряд ядра;  $V$  — самосогласованный потенциал атома, который состоит из двух частей: прямого (локального) и обменного (нелокального) потенциалов:

$$\hat{V} = \hat{V}_d - \hat{V}_{ex},$$

$$\hat{V}_d \psi(\vec{r}) = e^2 \sum_n \int \frac{\psi_n^*(\vec{r}') \psi_n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' \psi(\vec{r}),$$

$$\hat{V}_{ex} \psi(\vec{r}) = e^2 \sum_n \int \frac{\psi_n^*(\vec{r}') \psi(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' \psi_n(\vec{r}); \quad (6)$$

$\delta V$  — изменение самосогласованного потенциала атома, обусловленное изменением волновых функций всех его электронов под действием внешнего поля. Таким образом, уравнения (4) должны решаться самосогласованным образом для всех ВФ атома. В  $V^{N-1}$ -приближении [1] процедура самосогласования проводится лишь для ВФ остова, а поправки  $\psi^{(+)}$ ,  $\psi^{(-)}$  к ВФ внешнего электрона вычисляются затем в поле замороженного остова.  $V^N$ -приближение [1] строится следующим образом. Учитывается вклад ВФ внешнего электрона  $\psi$  в прямой самосогласованный потенциал  $V_d$ , а вклад  $\psi$  в обменный потенциал  $V_{ex}$  и вклад в  $\delta V$  поправок  $\psi^{(+)}$ ,  $\psi^{(-)}$  к ВФ внешнего электрона не учитываются. Такой подход значительно упрощает дальнейший учет корреляционных поправок по многочастичной теории возмущений, так как в этом случае он оказывается одинаковым как в  $V^{N-1}$ -, так и в  $V^N$ -приближении.

Вид гамильтониана взаимодействия электронов атома с электрическим полем электромагнитной волны:

$$\vec{E}(t) = \vec{E}_0 (e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}) \quad (7)$$

зависит от выбора калибровки потенциала. Взаимодействие в форме «длины» соответствует выбору [3]:

$$\begin{aligned} \varphi &= -2\vec{E}_0 \vec{r} \cos(\omega t - \vec{k} \vec{r}), \\ \vec{A} &= -[2(\vec{E}_0 \vec{r}) \vec{k} / \omega] \cos(\omega t - \vec{k} \vec{r}) \approx 0, \\ H_{int}^{(l)} &= -e\vec{r} \vec{E}(t), \quad \hat{f}_l = -e\vec{r} \vec{E}_0, \end{aligned} \quad (8)$$

где  $\vec{k}$  — волновой вектор. Мы пренебрегаем здесь поправками порядка  $\vec{k} \vec{r}$  и магнитным взаимодействием.

Взаимодействие в форме «скорости» соответствует выбору:

$$\begin{aligned} \varphi &= 0, \\ \vec{A} &= -(2\vec{E}_0 / \omega) \sin(\omega t - \vec{k} \vec{r}), \\ H_{int}^{(v)} &= -(2e\vec{\alpha} \vec{E}_0 / \omega) \sin \omega t, \\ \hat{f}_v &= ie(\vec{\alpha} \vec{E}_0 / \omega). \end{aligned} \quad (9)$$



Калибровка (9) получается из (8) с помощью калибровочного преобразования

$$\begin{aligned} \varphi &\rightarrow \varphi + \frac{\partial \theta}{\partial t}, \\ \vec{A} &\rightarrow \vec{A} - \nabla \theta, \\ \theta &= (2\vec{E}_0 \vec{r} / \omega) \sin(\omega t - \vec{k} \vec{r}). \end{aligned} \quad (10)$$

Решения  $\psi^{(+)}$ ,  $\psi^{(-)}$  уравнений (4) в форме длины и в форме скорости связаны между собой соотношением:

$$\begin{aligned} \psi_v^{(-)} &= \psi_l^{(-)} + \frac{e\vec{r}\vec{E}_0}{\omega} \psi, \\ \psi_v^{(+)} &= \psi_l^{(+)} - \frac{e\vec{r}\vec{E}_0}{\omega} \psi. \end{aligned} \quad (11)$$

Поправки  $\psi^{(+)}$ ,  $\psi^{(-)}$  к ВФ электрона удобно разложить по сферическому базису:

$$\psi^{(\pm)} = \sum_{\kappa'm} \psi_{\kappa'm}^{(\pm)}, \quad \kappa' = (-1)^{j'+l'+1/2} \left( j' + \frac{1}{2} \right). \quad (12)$$

Функции  $\psi_{\kappa'm}^{(\pm)}$  запишем в виде

$$\psi_{\kappa'm}^{(\pm)}(\vec{r}) = (-1)^{j'-m} \begin{pmatrix} j' & 1 & j \\ -m & 0 & m \end{pmatrix} \frac{1}{r} \begin{pmatrix} f_{\kappa'}^{(\pm)}(r) \Omega_{j'l'm} \left( \frac{\vec{r}}{r} \right) \\ i\alpha g_{\kappa'}^{(\pm)}(r) \tilde{\Omega}_{j'l'm} \left( \frac{\vec{r}}{r} \right) \end{pmatrix} \quad (13)$$

где  $\Omega$  — шаровой спинор,  $\tilde{\Omega} = -(\vec{\sigma} \vec{n}) \Omega$ ,  $\alpha = 1/137,036$ . Тогда уравнения (4) принимают вид

$$\begin{aligned} \frac{df_{\kappa'}^{(\pm)}}{dr} + \frac{\kappa'}{r} f_{\kappa'}^{(\pm)} - [2 + \alpha^2(\varepsilon \mp \omega - V_d)] g_{\kappa'}^{(\pm)} &= F_f(r) - \alpha^2 \delta V_d g_{\kappa'}(r), \\ \frac{dg_{\kappa'}^{(\pm)}}{dr} - \frac{\kappa'}{r} g_{\kappa'}^{(\pm)} + (\varepsilon \mp \omega - V_d + V_{ex}) f_{\kappa'}^{(\pm)} &= F_g(r) + \delta V_d f_{\kappa'}(r) + \delta V_{ex} f_{\kappa'}(r). \end{aligned} \quad (14)$$

Здесь  $\kappa$  соответствует функции,  $\kappa'$  — поправке. Вид функций  $F_f$  и  $F_g$  зависит от калибровки потенциала. В форме длины

$$F_f(r) = -\alpha^2 C_R(\kappa', \kappa) r g_{\kappa'}(r),$$

$$F_g(r) = C_R(\kappa', \kappa) r f_{\kappa'}(r). \quad (15)$$

В форме скорости

$$\begin{aligned} F_f(r) &= \pm \frac{C_F(\kappa', \kappa)}{\omega} f_{\kappa'}(r), \\ F_g(r) &= \mp \frac{C_G(\kappa', \kappa)}{\omega} g_{\kappa'}(r). \end{aligned} \quad (16)$$

Здесь  $C_R$ ,  $C_F$ ,  $C_G$  — угловые коэффициенты:

$$C_R(\kappa_1, \kappa_2) = (-1)^{j_2 + l_{\max} + 3/2} \sqrt{(2j_1 + 1)(2j_2 + 1) l_{\max}} \begin{Bmatrix} j_1 & 1 & j_2 \\ l_2 & 1/2 & l_1 \end{Bmatrix}, \quad (17)$$

$$l_{\max} = \max(l_1, l_2);$$

(напомним, что  $\kappa$  дает полный ( $j$ ) и орбитальный ( $l$ ) моменты электрона.)

$$\begin{aligned} C_F(\kappa_1, \kappa_2) &= (-1)^{j_1 + 1/2 + l_2} \sqrt{6(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)} \begin{Bmatrix} 1/2 & j_1 & l_2 \\ j_2 & 1/2 & 1 \end{Bmatrix} \delta_{l_2 l_1}, \\ C_G(\kappa_1, \kappa_2) &= (-1)^{j_1 + 3/2 + l_1} \sqrt{6(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)} \begin{Bmatrix} 1/2 & j_1 & l_1 \\ j_2 & 1/2 & 1 \end{Bmatrix} \delta_{l_1 l_2}; \end{aligned} \quad (18)$$

$$\bar{l} = 2j - l.$$

$\delta V_d$  — поправка к прямому самосогласованному потенциалу дается выражением:

$$\begin{aligned} \delta V_d(r) &= \frac{1}{3} (-1)^{2j+1} C_q(1, \kappa', \kappa) \sum_{nn'} (-1)^{2j_n+1} C_q(1, \kappa_n, \kappa_n) \times \\ &\times \int \frac{|f_n(r') f_{n'}^{(\pm)}(r') + \alpha^2 g_n(r') g_{n'}^{(\pm)}(r')|}{r_{>}^2} r_{<} dr', \\ r_{<} &= \min(r, r'), \quad r_{>} = \max(r, r'); \end{aligned} \quad (19)$$

$n$  нумерует ВФ остова;  $n'$  нумерует поправки к данной ВФ остова (формулы (12) и (2)).

$\delta \tilde{V}_{ex}$  — поправка к обменному самосогласованному потенциалу, определяемая выражением:

$$\begin{aligned} \delta \tilde{V}_{ex} f(r) &= \\ &= \sum_{nn'k} \left\{ (-1)^{j'+j_n'+k} C_Q(k, \kappa_n, \kappa, \kappa', \kappa_n) f_n(r) \int \frac{f(r') f_n^{(-)}(r')}{r_{>}^{k+1}} r_{<}^k dr' + \right. \end{aligned}$$



$$+(-1)^{j'+j_n+k} C_Q(k, \kappa_n, \kappa', \kappa, \kappa_n) f_n^{(+)}(r) \int \frac{f(r') f_n(r') r^k}{r^{k+1}} dr' \}. \quad (20)$$

Выражение написано для уравнений на  $f^{(+)}$ ,  $g^{(+)}$ . Для уравнения на  $f^{(-)}$ ,  $g^{(-)}$  индексы (+) и (-) надо поменять местами.

В формулах (19), (20)  $C_q$  и  $C_Q$  — угловые коэффициенты:

$$C_q(k, \kappa_1, \kappa_2) = \sqrt{(2j_1+1)(2j_2+1)} \begin{pmatrix} k & j_2 & j_1 \\ 0 & 1/2 & -1/2 \end{pmatrix} \zeta(k+l_1+l_2),$$

$$C_Q(k, \kappa_1, \kappa_2, \kappa_3, \kappa_4) =$$

$$=(-1)^{j_1+j_2+j_3+j_4+1} \sqrt{(2j_1+1)(2j_2+1)(2j_3+1)(2j_4+1)} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} k & j_2 & j_1 \\ 0 & 1/2 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k & j_4 & j_3 \\ 0 & 1/2 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} 1 & j_2 & j_3 \\ k & j_4 & j_1 \end{Bmatrix} \zeta(k+l_1+l_2) \zeta(k+l_3+l_4) =$$

$$=(-1)^{j_1+j_2+j_3+j_4+1} C_q(k, \kappa_1, \kappa_2) C_q(k, \kappa_3, \kappa_4) \begin{Bmatrix} 1 & j_2 & j_3 \\ k & j_4 & j_1 \end{Bmatrix}. \quad (21)$$

$$\zeta(x) = \begin{cases} 1, & \text{если } x \text{ — четно} \\ 0, & \text{если } x \text{ — нечетно} \end{cases}$$

Мы пренебрегаем обменным взаимодействием в первом из уравнений (14) и нижней компонентой ВФ в обменном взаимодействии (формула (20) и формула (6) из [1]). Такая форма записи уравнений соответствует точному учету всех релятивистских эффектов пропорциональных  $(Z\alpha)^2$  и пренебрежению теми эффектами, которые пропорциональны меньшим степеням  $Z$ .

Уравнения (14) линейны по внешнему полю, поэтому  $E_0$  в них опущено (см. формулы (7) — (9)).

Сделаем еще одно замечание, относящееся к вычислениям в форме длины и в форме скорости. Дело в том, что частота внешнего поля  $\omega$ , для которой решается задача, как правило, мала. Гамильтониан же электромагнитного взаимодействия в форме скорости (9) сингулярен по  $\omega$ , соответственно электромагнитные поправки в форме скорости содержат сингулярные по  $\omega$  составляющие (см. (11)), которые должны точно сокращаться при вычислении матричных элементов. Это делает вычисления в форме скорости менее устойчивыми в смысле численной ошибки.

### 3. ДРУГИЕ ВАРИАНТЫ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ АТОМА ВО ВНЕШНЕМ ПОЛЕ

Уравнения, аналогичные (4) и (14) возникают для внешнего поля любого вида. Если внешнее поле не зависит от времени, то вместо термина ЗВХФ удобнее пользоваться термином уравнения Хартри—Фока во внешнем поле (ХФВП). В этом случае вместо (2) имеем

$$\tilde{\psi} = \psi + \delta\psi, \quad (22)$$

а вместо двух уравнений (4) одно уравнение вида

$$(H_0 - \epsilon_0) \delta\psi = -(\hat{f} + \delta V + \delta\epsilon) \psi. \quad (23)$$

Напомним, что мы рассматриваем линейное по внешнему полю приближение, поэтому в уравнениях ЗВХФ  $\delta\epsilon = 0$  (линейный эффект Штарка отсутствует). Для произвольных полей, вообще говоря,  $\delta\epsilon \neq 0$ . Отметим также, что уравнения ЗВХФ принимают форму (23) при  $\omega = 0$ .

Разберем здесь случаи, когда внешним полем является магнитное поле ядра (при расчете сверхтонкой структуры) или слабое поле ядра (при расчете эффекта несохранения четности).

В первом случае оператор взаимодействия электронов с внешним полем имеет вид [4]

$$\hat{H}_{int} = \frac{|e|\hbar}{c} \vec{\mu} \vec{F}(r),$$

$$\vec{F}(r) = \begin{cases} \{|\vec{r} \times \vec{\alpha}|/r_m^3, & r < r_m \\ [|\vec{r} \times \vec{\alpha}|/r^3, & r \geq r_m \end{cases} \quad (24)$$

где  $r_m = 1,1A^{1/3}$  ферми — магнитный радиус ядра,  $A$  — массовое число ядра.

Уравнения (14) принимают вид

$$\frac{df_{\kappa'}}{dr} + \frac{\kappa'}{r} f_{\kappa'} - [2 + \alpha^2(\epsilon_0 - V_d)] g_{\kappa'} = -W_{\kappa'\kappa} G(r) f_{\kappa} + \delta_{\kappa\kappa'} \delta\epsilon g_{\kappa},$$

$$\frac{dg_{\kappa'}}{dr} - \frac{\kappa'}{r} g_{\kappa'} + (\epsilon_0 - V_d + V_{ex}) f_{\kappa'} = W_{\kappa'\kappa} G(r) g_{\kappa} - \delta_{\kappa'\kappa} \delta\epsilon f_{\kappa} - \delta V_{ex} f_{\kappa}, \quad (25)$$

где

$$G(r) = \begin{cases} r/r_m^3, & r < r_m \\ 1/r^2, & r \geq r_m \end{cases}$$



$\delta_{xx}$  — символ Кронекера,

$$W_{x'x} = (-1)^{l'+l+1/2} \sqrt{\frac{3}{2}(2j+1)(2j'+1)} \times \\ \times \left[ \begin{Bmatrix} 1/2 & j' & l' \\ j & 1/2 & 1 \end{Bmatrix} \delta_{l'l} + \begin{Bmatrix} 1/2 & j' & \bar{l}' \\ j & 1/2 & 1 \end{Bmatrix} \delta_{\bar{l}'l'} \right], \\ \bar{l}' = 2j - l.$$

Выражение  $\delta V_{exf}$  дается формулой (20).

Отметим, что выражение  $\delta V_d f_x$  здесь не возникает, так как электронная часть сверхтонкого взаимодействия является псевдовектором ( $\vec{F}$  в формуле (24)) и поэтому в линейном приближении не может изменить кулоновское поле замкнутых оболочек.

Выпишем теперь уравнения для несохраняющего четность слабого взаимодействия электронов с ядром. В модели Вайнберга — Салама гамильтониан такого взаимодействия имеет вид

$$h_{pv} = -\frac{G}{2\sqrt{2}} \rho(r) Q_W \gamma_5, \quad (26)$$

где  $G$  — фермиевская константа;  $Q_W = 0,9793N + Z(0,9783 - 3,8968 \sin^2 \theta_W)$  — слабый заряд ядра [5];  $N$  и  $Z$  — число нейтронов и протонов в ядре;  $\theta_W$  — угол Вайнберга;  $\gamma_5$  — дираковская матрица

$$\gamma_5 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix};$$

$\rho(r)$  — нормированная на единицу плотность нуклонов [6]:

$$\rho(r) = \frac{C}{1 + \exp\left(\frac{r-r_\omega}{d/4 \ln 3}\right)}, \quad (27)$$

где  $r_\omega = 1,1A^{1/3} \Phi$  — радиус ядра,  $d$  — диффузность ядра,  $C$  определяется из условия  $\int \rho dV = 1$ .

Уравнения для определения поправок к волновой функции в этом случае отличаются от (25) лишь правой частью:

$$\frac{df_{x'}}{dr} + \frac{x'}{r} f_{x'} - [2 + \alpha^2(\epsilon - V_d)] g_{x'} = -f_{x'} \rho(r),$$

$$\frac{dg_{x'}}{dr} - \frac{x'}{r} g_{x'} + (\epsilon - V_d + V_{ex}) f_{x'} = -g_{x'} \rho(r) + \delta V_{exf}, \quad (28)$$

где

$$\delta V_{exf} = \sum_{nk} \frac{1}{(2j+1)} \left\{ C_q(k, \kappa_n, \kappa')^2 f_n \int \frac{f_n f_{r'}^k}{r_{>}^{k+1}} dr' + \right. \\ \left. + C_q(k, \kappa_n, \kappa)^2 f_n \int \frac{f_n f_{r'}^k}{r_{>}^{k+1}} dr' \right\}. \quad (29)$$

#### 4. СОВМЕСТНЫЙ УЧЕТ СЛАБОГО И ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

Матричный элемент нарушающего четность E1-перехода между состояниями 6s и 7s в Cs имеет следующую структуру:

$$\langle \tilde{6s} | D_z | \tilde{7s} \rangle = \sum_p \left\{ \frac{\langle 6s | h_{pv} | p \rangle \langle p | D_z | 7s \rangle}{\epsilon_{6s} - \epsilon_p} + \frac{\langle 6s | D_z | p \rangle \langle p | h_{pv} | 7s \rangle}{\epsilon_{7s} - \epsilon_p} \right\}, \quad (30)$$

где  $h_{pv}$  — оператор слабого взаимодействия;  $D_z$  — оператор дипольного момента.

Другими словами, слабое взаимодействие примешивает к обоим уровням 6s и 7s состояния противоположной четности ( $|\tilde{6s}\rangle = |6s\rangle + \alpha|p\rangle$ ,  $|\tilde{7s}\rangle = |7s\rangle + \beta|p\rangle$ ), в результате чего между ними оказывается возможным электрический дипольный переход. Эта ситуация является довольно общей и не связана, разумеется, только с переходом 6s — 7s в Cs.

Из выражения (30) видно, что для расчета эффекта несохранения четности необходимо одновременно учитывать электрическое поле фотона и слабое взаимодействие электронов с ядром. Волновая функция электрона представляется в этом случае в виде

$$\tilde{\psi} = \psi + \delta\psi_E + \delta\psi_W + \delta\psi_{WE}, \quad (31)$$

где  $\psi$  — «невозмущенная» хартри — фоковская волновая функция, удовлетворяющая уравнению (3);  $\delta\psi_E$  — электромагнитная поправка, обусловленная полем фотона;  $\delta\psi_W$  — слабая поправка, обусловленная слабым взаимодействием электронов атома с ядром;  $\delta\psi_{WE}$  — «электрослабая» поправка, обусловленная совместным действием слабого и электромагнитного поля.

$\delta\psi_{WE}$  появляется из-за перекрестного влияния  $\delta\psi_W$  и  $\delta\psi_E$  друг



на друга: слабое взаимодействие изменяет волновые функции остова, из-за чего меняется самосогласованный потенциал, а следовательно, и электромагнитные поправки к волновым функциям. И, наоборот, электромагнитное взаимодействие приводит к изменению слабых поправок.

$\delta\psi_E$  и  $\delta\psi_W$  определяются независимо друг от друга из самосогласованного решения уравнений (14) и (28), соответственно. Для определения  $\delta\psi_{WE}$  необходимо, чтобы предварительно были вычислены все электромагнитные и слабые поправки к волновым функциям остова. Как и  $\delta\psi_E$ ,  $\delta\psi_{WE}$  имеет положительночастотную и отрицательночастотную составляющие:

$$\delta\psi_{WE} = \psi^{(-)} e^{-i\omega t} + \psi^{(+)} e^{i\omega t}. \quad (32)$$

Для  $\psi^{(-)}$  и  $\psi^{(+)}$  справедливы разложения (12) и представление (13). Уравнения, для определения радиальных компонент  $f_{\kappa'}^{(\pm)}$ ,  $g_{\kappa'}^{(\pm)}$  функции  $\delta\psi_{WE}$  отличаются от (14) лишь правой частью. Выпишем эти уравнения, используя калибровку потенциала в форме длины:

$$\begin{aligned} \frac{df_{WE}^{(\pm)}}{dr} + \frac{\kappa'}{r} f_{WE}^{(\pm)} - [2 + \alpha^2(\varepsilon \mp \omega - V_d)] g_{WE}^{(\pm)} &= \\ = -f_E^{(\pm)} \rho(r) - \alpha^2 C_R(\kappa' - \kappa) r g_W - \alpha^2 (-1)^{j+1/2} C_q(1, \kappa', -\kappa) g_W \delta V_d, \\ \frac{dg_{WE}^{(\pm)}}{dr} - \frac{\kappa'}{r} g_{WE}^{(\pm)} + (\varepsilon \mp \omega - V_d + V_{ex}) f_{WE}^{(\pm)} &= \\ = -g_E^{(\pm)} \rho(r) + C_R(\kappa', -\kappa) r f_W + (-1)^{j+1/2} C_q(1, \kappa', -\kappa) f_W \delta V_d + \\ + \delta V_{ex}(f_{WE}, f) f_{\kappa} + \delta V_{ex}(f_W, f) f_E + \delta V_{ex}(f_E, f) f_W + \delta V_{ex}(f_W, f_E) f_{\kappa}. \end{aligned} \quad (33)$$

Здесь  $f_{WE}$ ,  $g_{WE}$ ,  $f_E$ ,  $g_E$ ,  $f_W$ ,  $g_W$  — радиальные компоненты электрослабой, электромагнитной и слабой поправок к волновой функции электрона;  $\rho(r)$  — плотность нуклонов (27);  $C_R$ ,  $C_q$  — угловые коэффициенты (17), (21);  $\delta V_d$  — поправка к прямому потенциалу, обусловленная электромагнитным взаимодействием (формула (19));

$\delta V_{ex}(f_W, f) f_E$  получается из (29) заменой  $f_n \rightarrow f_{Wn}$ ,  $\kappa_n \rightarrow -\kappa_n$ . Заметим, что выражение (20) для поправки к обменному потенциалу, обусловленной электромагнитным взаимодействием, можно было бы записать как  $\delta V_{ex}(f_E, f) f_{\kappa}$ . Отсюда сразу виден рецепт получения выражений для  $\delta V_{ex}(f_{WE}, f) f_{\kappa}$ ,  $\delta V_{ex}(f_E, f) f_W$  и  $\delta V_{ex}(f_W, f_E) f_{\kappa}$ : надо в выражении (20) произвести соответствующие подмены радиальных волновых функций и соответствующих им  $\kappa$ .

## 5. ПРАВИЛА ОТБОРА ДЛЯ ПОПРАВOK

В этом параграфе установим вид разложения (12) для различных типов взаимодействия и нумерацию поправок к хартри—фоксовским волновым функциям электрона. Наиболее просто разложение (12) выглядит для слабого взаимодействия — оно содержит всего одно слагаемое, соответствующее переходу  $\kappa \rightarrow -\kappa$  и правилам отбора  $\Delta j = 0$ ,  $\Delta l = 1$ . Соответственно слабые поправки к волновым функциям имеют ту же нумерацию, что и сами функции и для их хранения используется дисковый файл того же формата, что и для функций.

Для сверхтонкого взаимодействия (СТВ) отличны от нуля матричные элементы для переходов между состояниями с  $\Delta l = 0, 2$ ;  $\Delta j = 0, 1$ . Однако переходы с  $\Delta l = 2$  очень малы, и мы их не учитываем. Поэтому для СТВ остается два вида поправок: диагональные ( $\Delta l = 0$ ,  $\Delta j = 0$ ) и недиагональные ( $\Delta l = 0$ ,  $\Delta j = 1$ ). Для каждого типа поправок используется дисковый файл с той же нумерацией и того же формата, что и для функций.

Для электрического дипольного перехода правила отбора следующие:  $\Delta j = 0, 1$ ;  $\Delta l = 1$ .  $\kappa'$  поправки вычисляются по  $\kappa$ -функции по следующей формуле:

$$\kappa' = (-1)^{i+1} (\kappa - 2 + i), \quad (34)$$

где  $i$  — порядковый номер поправки.

Кроме того, при каждом  $\kappa'$  имеется положительная частотная поправка  $\psi^{(+)}$  и отрицательночастотная поправка  $\psi^{(-)}$  (см. (2)). Нумерацию поправок к  $s_{1/2}$ - и  $p_{1/2}$ -функциям иллюстрирует таблица.

Как видно из таблицы и из формулы (34), каждая  $s_{1/2}$ -функция имеет четыре электромагнитные поправки, а все остальные по шесть. Для удобства адресации под поправки к  $s_{1/2}$ -функциям также зарезервировано шесть мест, два из которых остаются пустыми. Номер поправки вычисляется по формуле

$$n_p = 6(n-1) + 2(i-1) + j, \quad (35)$$

где  $n$  — номер функции;  $i$  — порядковый номер поправки (как в формуле (34));  $j = 1$  соответствует отрицательночастотной поправке;  $j = 2$  — положительночастотной поправке.



Номер поправки	$\kappa$ функции	Частотность	$\kappa'$ поправки
1	-1 ( $s_{1/2}$ )	-	-2 ( $p_{3/2}$ )
2		+	-2 ( $p_{3/2}$ )
3		-	1 ( $p_{1/2}$ )
4		+	1 ( $p_{1/2}$ )
5		-	0
6		+	0
1	1 ( $p_{1/2}$ )	-	-3 ( $d_{5/2}$ )
2		+	-3 ( $d_{5/2}$ )
3		-	2 ( $d_{3/2}$ )
4		+	2 ( $d_{3/2}$ )
5		-	-1 ( $s_{1/2}$ )
6		+	-1 ( $s_{1/2}$ )

Способ нумерации электрослабых поправок такой же, как для электромагнитных, с той лишь разницей, что  $\kappa'$  поправки отличаются от (34) знаком.

## 6. ВЫЧИСЛЕНИЕ ПРАВЫХ ЧАСТЕЙ

Прежде чем вычислить поправку к волновой функции атомного электрона из уравнений (14), (25), (28) или (33), необходимо вычислить соответствующую правую часть. Это вычисление не составляет большой проблемы, но требует машинного времени даже большего, чем решение уравнений. Для экономии машинного времени и минимизации численной ошибки при вычислении правых частей необходимо учитывать следующие обстоятельства:

1. Хорошим тестом на сходимость уравнений ЗВХФ является выполнение теоремы Шиффа — полная экранировка внешнего электрического поля на ядре [7, 8]. В уравнениях ЗВХФ (14) членом, ответственным за экранировку является  $\delta V_{af}$ -поправка к прямому потенциалу. Поэтому этот член необходимо вычислять в диапазоне значений  $r$ :  $r_0 \leq r \leq r_a$ , где  $r_0 \ll r_N$ ,  $r_N$  — радиус ядра,  $r_a$  — радиус атомного остова. Для поправок к обменному взаимодействию достаточно ограничиться областью  $a_B/Z \leq r \leq r_a$ .

2. Для минимизации численной ошибки поправки к прямому и обменному потенциалу в правых частях должны вычисляться с той

же точностью, что прямой и обменный потенциал в левой части. Во всех программах этой части комплекса (атом во внешнем поле) обменное взаимодействие представляется в виде матрицы в координатном пространстве, для вычисления которой используются не все точки координатного массива, а лишь каждая четвертая (см. [1] §6). Аналогично построено вычисление в правых частях: соответствующие интегралы вычисляются по формуле Симпсона через четыре точки. После суммирования по всем функциям остова и их поправкам производится интерполяция в промежуточные точки с помощью полинома Лагранжа, проведенного через четыре соседние точки. Нижняя компонента волновой функции не учитывается. Поправка к прямому потенциалу вычисляется по формуле Симпсона с использованием всех точек координатного массива и с учетом нижней компоненты волновой функции.

3. Если в поправке к прямому потенциалу (19) выделить множитель  $(-1)^{2j+1} C_q(1, \kappa', \kappa)$ , то оставшаяся часть будет одинаковой для всех волновых функций остова. Поэтому ее выгодно вычислять один раз на итерацию и в цикле по поправкам к волновым функциям остова прибавлять к соответствующим правым частям.

4. Последние три члена правой части уравнений (33) не зависят от  $\delta\psi_{WE}$  и, следовательно, не меняются в процессе итераций. Поэтому их выгодно вычислить один раз после того, как определены все электромагнитные и слабые поправки к волновым функциям остова и перед тем, как начинать итерации для определения электрослабых поправок.

## 7. РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ДИРАКА С ПРАВОЙ ЧАСТЬЮ

В этом параграфе обсудим алгоритм решения любого из уравнений (14), (25), (28) или (33) для определения некоторой конкретной поправки к волновой функции атомного электрона. Эти уравнения можно записать в общем виде:

$$(H_{0\kappa} - \varepsilon) \varphi_{\kappa} = P(r), \quad (36)$$

где  $H_{0\kappa}$  — релятивистский хартри — фоковский гамильтониан (5), спроектированный на угловой спинор  $\Omega_{jlm}(\kappa = (-1)^{l+j+1/2} \times (j+1/2))$ ;  $P(r)$  — правая часть.

По форме это уравнение Дирака с правой частью (уравнение



Штернгеймера [9]). Параметр  $\varepsilon$  фиксирован и может совпадать или не совпадать с собственным значением гамильтониана  $H_{0\kappa}$ . Если  $\varepsilon$  близко или совпадает с собственным значением  $\varepsilon_0$  гамильтониана  $H_{0\kappa}$  (например, при вычислении диагональной поправки, обусловленной сверхтонким взаимодействием), то задания граничных условий в нуле и на бесконечности недостаточно для однозначного определения решения. Действительно, если  $u(r)$  — решение уравнения (36), то при любом  $\alpha$  функция  $u(r) + \alpha\varphi_0(r)$  ( $\varphi_0$  — собственная функция, отвечающая собственному значению  $\varepsilon_0$ ) также является решением. В этом случае требуется наложение условия ортогональности решения к функции  $\varphi_0$ . Правая часть при этом также преобразуется, в ней появляется слагаемое  $\langle \varphi_0 | H_{int} | \varphi_0 \rangle \langle \varphi_0 |$ . Часто, даже если  $\varepsilon$  не совпадает ни с одним собственным значением гамильтониана  $H_{0\kappa}$ , для стабилизации алгоритма решения уравнения, требуется наложение условия ортогональности к функции  $\varphi_0$ , чья энергия  $\varepsilon_0$  максимально близко отстоит от  $\varepsilon$ . В этом случае, после решения уравнения (36), вклад выброшенной функции  $\varphi_0$  может быть восстановлен в решении по теории возмущений.

Уравнение (36) решается итерациями по обменному взаимодействию. На каждой итерации алгоритм отыскания решения аналогичен алгоритму, который используется при решении уравнений Хартри—Фока [1], где обменное взаимодействие также образует правую часть. В обоих случаях вычисляются свободное (при нулевой правой части) и вынужденное решение интегрированием уравнения методом Адамса из нуля и из бесконечности до точки сшивки. Комбинацией свободного и вынужденного решений устраняется разрыв в точке сшивки.

Но оказывается, что вынужденное решение не всегда можно определить методом Адамса. Дело в том, что свободное и вынужденное решения могут иметь существенно разный радиус. Свободное решение имеет асимптотику  $\exp(-\sqrt{|\varepsilon|}r)$ , а, как видно из выражения (20), правая часть при  $r \rightarrow \infty$  спадает не быстрее, чем  $\exp(-\sqrt{|\varepsilon_{min}|}r)$ , где  $\varepsilon_{min}$  — энергия самой верхней орбитали остова. Поэтому, если мы вычисляем поправку к волновой функции внутреннего электрона, так что  $|\varepsilon| \gg |\varepsilon_{min}|$ , то  $r_{своб.} \ll r_{вынуж.}$

В этом случае при интегрировании уравнений из бесконечности, из-за численной ошибки к вынужденному решению подмешивается свободное, которое в этой области очень быстро растет и может не только существенно исказить решение, но и привести к

переполнению. Для отыскания вынужденного решения здесь используется способ, предложенный в [10] для определения асимптотики хартри—фоковских орбиталей. Решение строится в виде ряда

$$\begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} = \left(1 - A^{-1} \frac{d}{dr}\right)^{-1} \begin{pmatrix} f_0 \\ g_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_0 \\ g_0 \end{pmatrix} + A^{-1} \frac{d}{dr} \begin{pmatrix} f_0 \\ g_0 \end{pmatrix} + \dots, \quad (37)$$

где  $A$  — матрица, размером  $2 \times 2$

$$A = \begin{pmatrix} -\kappa/r & 2 - \alpha^2(\varepsilon - V) \\ -\varepsilon + V & \kappa/r \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} f_0 \\ g_0 \end{pmatrix} = A^{-1} \begin{pmatrix} P_1 \\ P_2 \end{pmatrix},$$

$P$  — правая часть. Ряд (37) асимптотический, поэтому из него используется лишь два первых члена.

В [11] были описаны два алгоритма решения уравнения Дирака с правой частью — отдельно для диагонального случая ( $\kappa$  функции совпадает с  $\kappa'$  поправки) и недиагонального случая ( $\kappa \neq \kappa'$ ). Первый алгоритм реализован в подпрограмме SOLDRT, второй — в подпрограмме SOLD. Как показал опыт работы с этими подпрограммами, второй алгоритм прекрасно работает и в диагональном случае. Ниже приводится его схематическое описание.

1. Определяются решения  $(f_0, g_0)$  уравнения (36) при зануленной правой части и зануленном обменном взаимодействии в диапазонах от  $r = r_{max}$  до точки сшивки  $r_c$  и от  $r_0 \ll r_N$  до  $r_c$ .

2. Находится вынужденное решение в этих областях при зануленном обменном взаимодействии. Это решение имеет скачок при  $r = r_c$  как в верхней, так и в нижней компоненте. Эти скачки устраняются путем добавления решений  $(f_0, g_0)$  в правой и левой области (с разными коэффициентами).

Получившаяся функция решала бы задачу в отсутствии обменного взаимодействия. В принципе, решение задачи можно было бы получить итерациями пункта 2. Однако, оказывается, что такие итерации сходятся плохо или вообще не сходятся. Поэтому решение находится более сложным путем.

3. Находится вынужденное решение при включенном обменном взаимодействии, решение, полученное в п.2, используется в качестве нулевого приближения. При этом скачок в верхней компоненте устраняется путем добавления решения  $(f_0, g_0)$  при  $r > r_c$ . В нижней компоненте остается конечный скачок. Затем процедура п.3



повторяется до тех пор, пока решение не перестает изменяться. Подчеркнем, что граничные условия при  $r=r_0$  остаются в этом случае неизменными. Как раз этим условием и обеспечивается стабильная сходимость.

4. Находится свободное решение  $(\tilde{f}, \tilde{g})$  ( $P=0$ ) при ненулевом обменном взаимодействии. Это решение также содержит скачок нижней компоненты  $\Delta\tilde{g}$  в точке сшивки, так как радиальное уравнение решается при энергии, вообще говоря, не совпадающей с собственным значением при данном  $\kappa$ . Свободное решение  $(\tilde{f}, \tilde{g})$  прибавляется к вынужденному с таким весом  $\alpha$ , чтобы занулить скачок нижней компоненты:

$$\alpha = (g_L(r_c) - g_R(r_c)) / (\tilde{g}_R(r_c) - \tilde{g}_L(r_c)).$$

5. Производится ортогонализация полученного решения к заданной функции  $\varphi_0$ :

$$\varphi'_\kappa(r) = \varphi_\kappa(r) - \langle \varphi | \varphi_0 \rangle \varphi_0(r).$$

6. Вычисления, описанные в пунктах 3—5 повторяются до тех пор, пока функция в точке сшивки не перестает изменяться («внешние итерации»). Это происходит довольно быстро, поскольку сама необходимость внешних итераций обусловлена только вычислительными погрешностями.

## 8. ПРОЦЕДУРА САМОСОГЛАСОВАНИЯ

Уравнения для атома во внешнем поле решаются самосогласованным образом для всех электронов атомного остова с помощью подходящей итерационной процедуры. Можно представить множество возможных вариантов организации итерационной процедуры. Укажем здесь два из них:

1. Вычисленная поправка к волновой функции электрона сразу же используется при вычислении правой части в уравнении на следующую поправку.

2. Поправки к самосогласованным потенциалам замораживаются на все время итерации, пока не будут пересчитаны поправки ко всем волновым функциям остова.

На матричном языке первый вариант соответствует итерации Зейделя, а второй — простой итерации. Между этими крайними вариантами можно придумать множество промежуточных.

Как показывает опыт работы с программами, сходимость итерационного процесса зависит от количества степеней свободы системы. Так, для легких атомов (He, Li и т. п.) неважно, каким образом организовывать итерации, — они всегда сходятся. Для более тяжелых атомов процесс п.1 расходится. Сходимости можно добиться частичным замораживанием самосогласованных потенци-

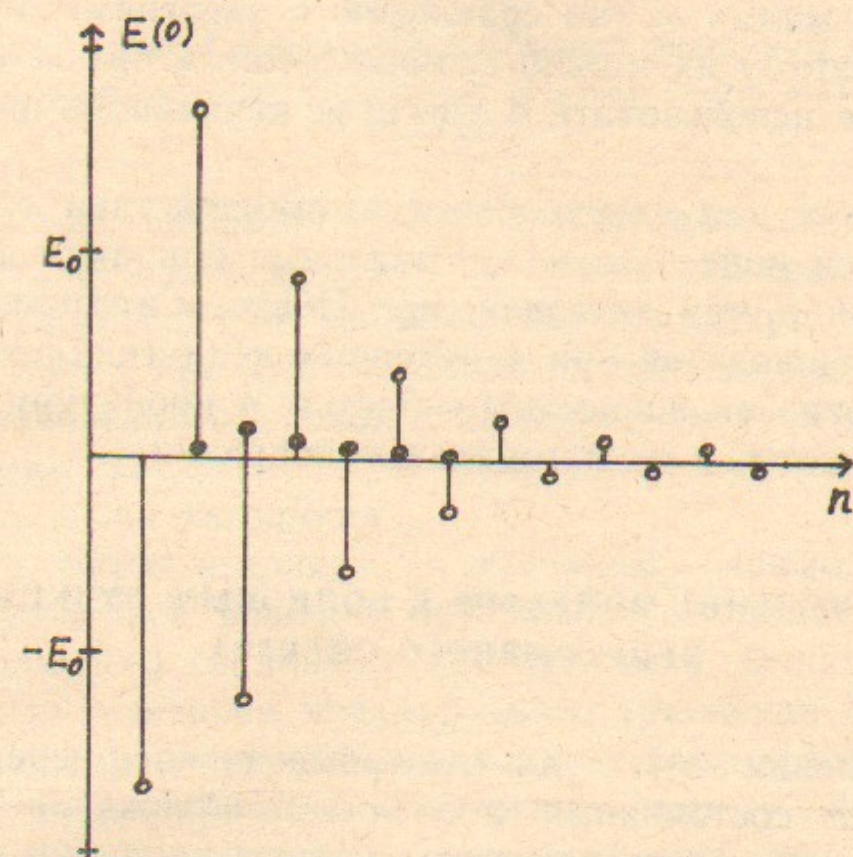


Рис. 1. Поле на ядре атома как функция номера итерации:

○ — вычисление без «взвешивания» поправок; ● — со «взвешиванием» по формуле (38).

алов. Для тяжелых атомов (Cs, Tl и т. п.) сходится лишь процесс п.2. Другими словами, ограничение степеней свободы замораживанием самосогласованных потенциалов стабилизирует сходимость.

Рис. 1 иллюстрирует характер сходимости решения уравнений ЗВХФ для атома цезия. На нем изображены значения поля на ядре атома как функция номера итерации. Видно, что сходимость очень медленная и носит колебательный характер. Правильное значение поля на ядре достигается лишь после нескольких десятков итераций. Сходимость можно существенно ускорить, если включить «взвешивание» поправок:

$$\delta\psi_i^{(n+1)} = \frac{1}{2}(\delta\psi_i^{(n)} + \delta\psi_i^{(n)}), \quad (38)$$



где  $n$  — номер итерации;  $i$  — начальное приближение на данной итерации;  $f$  — результат вычислений на данной итерации.

Заметим, что при  $\omega=0$  положительночастотная и отрицательночастотная поправки совпадают ( $\psi^{(+)} \equiv \psi^{(-)}$ ). Этим обстоятельством можно воспользоваться для экономии машинного времени. Кроме того отметим, что уравнения ЗВХФ, как правило, приходится решать при малых  $\omega$  (по сравнению с энергиями возбуждений из остова). Поэтому их можно сначала решить при  $\omega=0$ , и полученное решение использовать в качестве начального приближения для  $\omega \neq 0$ .

В уравнениях для сверхтонкого взаимодействия есть строгая иерархия в роли поправок: недиагональные поправки дают гораздо меньший вклад, чем диагональные. Поэтому итерационный процесс сначала проводится при зануленных недиагональных поправках, и лишь когда он полностью сойдется, в процедуру самосогласования включаются и недиагональные поправки.

### 9. ВЫЧИСЛЕНИЕ ПОПРАВОК К ВОЛНОВЫМ ФУНКЦИЯМ НЕПРЕРЫВНОГО СПЕКТРА

Для вычисления амплитуды электромагнитного перехода между возбужденными состояниями атома в приближении ЗВХФ нет необходимости вычислять электромагнитные поправки к этим возбужденным состояниям. Действительно, искомая величина дается матричным элементом  $\langle \psi | \hat{f} + \delta \hat{V} | \psi \rangle$  (см. (4)), где  $\delta \hat{V}$  можно рассматривать как перенормировку оператора  $\hat{f}$ , т. е. достаточно вычислить правую часть в уравнении на поправку и свернуть ее с соответствующей волновой функцией. То же относится к константам сверхтонкой структуры возбужденных состояний и т. п. Однако, приближение ЗВХФ учитывает не все остаточное кулоновское взаимодействие, а лишь часть, которую часто называют поляризационной: внешнее поле изменяет волновые функции остова (поляризует остов), что приводит к изменению самосогласованного потенциала, в котором движется внешний электрон. При этом не учитываются собственно корреляционные диаграммы, одна из которых приведена на рис. 2.

Очень часто корреляционные поправки играют более важную роль, чем поляризационные (см., например, [4, 12]). При их вычислении возникает необходимость рассчитывать поправки,

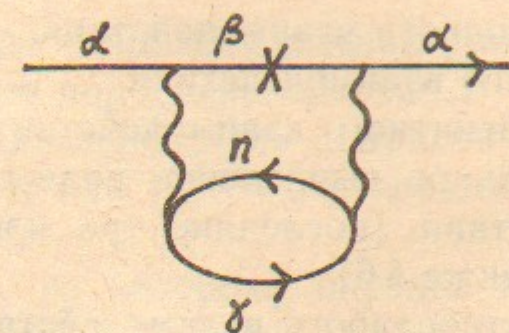


Рис. 2. Пример корреляционной диаграммы:

$\alpha, \beta, \gamma$  — возбужденные состояния;  $n$  — состояние из остова; крестик означает взаимодействие с внешним полем.

индуцированные внешним полем, к волновым функциям возбужденных состояний дискретного и непрерывного спектров. Поправки для дискретного спектра вычисляются подпрограммой SOLD (см. § 7) точно также, как для состояний внутри остова.

Для вычисления поправок в непрерывном спектре используется подпрограмма SOLCON. Ниже приводится краткое описание реализованного в ней алгоритма.

Сначала, путем итераций по обменному взаимодействию, находится вынужденное решение при некоторых заданных граничных условиях при  $r \rightarrow 0$  (например, при нулевых). Функция, являющаяся требуемым решением неоднородного уравнения Дирака, согласно формуле теории возмущений, должна быть ортогональна к свободному решению при данной энергии. Поэтому далее из полученного вынужденного решения вычитается свободное с таким коэффициентом, чтобы получившаяся функция имела в асимптотической области ( $r \rightarrow \infty$ ) квазиклассическую фазу, отличающуюся от фазы свободного решения на  $\pi/2$ . Это условие обеспечивает ортогональность искомой функции к свободному решению. При вычитании свободного решения соответственно переопределяются граничные условия. Затем весь цикл повторяется до тех пор, пока решение не перестает изменяться.

### 10. ВХОДНЫЕ ДАННЫЕ ПРОГРАММ

Комплекс программ «атом во внешнем поле» содержит целый ряд программ, отличающихся, в основном, видом внешнего взаимодействия на атом. Главными из них являются следующие программы:



HFST — для сверхтонкого взаимодействия,  
 WEAK — для слабого взаимодействия,  
 R5 — для электромагнитного взаимодействия ( $l$  — форма),  
 MVF — предварительное вычисление правых частей для электрослабого взаимодействия (последние три члена в правой части уравнений (33), см. также §6)  
 WEARR — для электрослабого взаимодействия ( $l$  — форма).

Кроме того, имеется большое количество программ, играющих вспомогательную роль. Ниже описаны входные данные перечисленных программ. Параметры, имеющие одинаковое название, как правило, имеют одинаковый смысл в разных программах, поэтому они описываются один раз. Так, например, все параметры, описанные оператором NAMELIST с названием ATOM имеют в точности одинаковый смысл во всех программах, где есть этот оператор.

Входные параметры программы HFST содержатся в двух операторах NAMELIST с названиями PARAM и ATOM:

```
/PARAM/NN1,NN2,IWR,KMAX,IDISD,IDISND,NAI,NW1,NW2,
BR,EPS,VES,PRDF,GI
```

NN1, NN2: поправки, обусловленные сверхтонким взаимодействием, вычисляются, начиная с функции с номером NN1 и кончая функцией с номером NN2. Это могут быть как функции остова, так и возбужденные состояния. Способ нумерации описан в [1].

IWR равно 1 — подробная распечатка; равно 0 — сокращенная распечатка.

KMAX — требуемое количество матриц обменного взаимодействия.

IDISD равно —1 — первый запуск: стартовое приближение для диагональных поправок полагается нулевым; равно 1 — последующие запуски: стартовое приближение берется с диска.

IDISND — то же для недиагональных поправок.

NAI — количество итераций.

NW1, NW2 — параметры цикла по диагональным-недиагональным поправкам:

NW1	NW2	
1	1	Вычисляются только диагональные поправки
2	2	Вычисляются только недиагональные поправки
1	2	Вычисляются и те, и другие поправки

BR=0,5 — стандарт (параметр подпрограммы SOLD).  
 EPS — точность для подпрограммы SOLD (см. §7),  $EPS \sim 10^{-4}$ .  
 VES — параметр «взвешивания» поправок от итерации к итерации (см. ф-лу (38)), при VES=0 итерации идут без «взвешивания».

PRDF — параметр, по которому определяется  $r_{max}$  поправки по соответствующей правой части из соотношения  $P(r_{max}) = PRDF \cdot P_{max}$   $PRDF \sim 10^{-4}$ .

GI —  $g_l$  — фактор ядра =  $\mu/l$ .

```
/ATOM/ZZ,ZE,N2,ND,IO,RNMO,RNO,DNO
```

ZZ — Z (заряд ядра).

ZE — количество электронов, участвующих в формировании самосогласованного потенциала (количество электронов остова в  $V^{N-1}$ -приближении).

N2 — количество волновых функций (подоболочек) остова.

ND — полное количество состояний дискретного спектра, записанное на диске.

RNMO — магнитный радиус ядра (ферми) (см. (24)).

RNO — электрический радиус ядра (ферми) (см. [1]).

DNO — диффузность ядра (ферми).

Кроме того, во входных данных содержатся названия дисковых файлов ( $\leq 8$  символов) со следующей информацией:

- а) координатный массив, энергии и другая служебная информация;
- б) функции дискретного спектра;
- в) диагональные поправки;
- г) недиагональные поправки.

Программа WEAK имеет следующие параметры:

```
/PARAM/NN1,NNN,IWR,KMAX,KM,IDIS,NAI,BR,EPS,PRDF,MT
/ATOM/ZZ,ZE,N2,ND,IO,RNMO,RNO,DNO
```

NNN — при вычислении правой части учитывать поправки начиная с NNN (NNN=1 — стандарт).

KM — при вычислении правой части учитывать KM мультиполей.

IDIS — аналогично IDISD и IDISND в программе HFST.

MT равно 0 — поправки пишутся на диск; равно 1 — поправки пишутся на магнитную ленту.



Кроме того, во входных данных содержатся названия файлов (а), (б) и файла для слабых поправок.

Программа R5 имеет следующие параметры:

/PARAM/MT,NN1,IWR,KMAX,IDIS,NAI,W,BR,EPS,VES,PRDF  
/ATOM/ZZ,ZE,N2,ND,IO,RNMO,RNO,DNO

W — частота внешнего поля (в атомных единицах).

Кроме того — названия файлов (а) и (б).

Входные данные программы MVF описаны оператором NAMELIST с названием WRVF:

/WRVF/MT,N2,NN1,NN2

Кроме того, во входных данных содержатся названия файлов (а), (б) и файла для слабых поправок.

Программа WEARR имеет следующие параметры:

/PARAM/MT,VES,NN1,NN2,KMAX,IWR,NAI,IDIS,W,BR,  
EPS,PRDF,IWS  
/ATOM/ZZ,ZE,N2,ND,IO,RNMO,RNO,DNO

IWS = -1 — стандарт.

Кроме того — названия файлов (а), (б) и файла для слабых поправок.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Дзюба В.А. Препринт ИЯФ СО АН СССР 89-92. Новосибирск, 1989.
2. Amusia M.Ya. and Cherepkov N.A. Case Stud. at. Phys., 1975, v.5, p.47.
3. Dzuba V.A., Flambaum V.V., Silvestrov P.G. and Sushkov O.P. J. Phys., 1987, v.B20, p.1399.
4. Dzuba V.A., Flambaum V.V. and Sushkov O.P. J. Phys., 1984, v.B17, p.1953.
5. Marciano W.J. and Sirlin A. Phys. Rev., 1983, v.D27, p.552.
6. Ким Е. Мезонные атомы и ядерная структура. М.: Атомиздат, 1975.
7. Schiff L.I. Phys. Rev., 1963, v.132, p.2194.
8. Dzuba V.A., Flambaum V.V., Silvestrov P.G. and Sushkov O.P. Phys. Lett., 1986, v.A118, p.177.
9. Sternheimer R.M. Phys. Rev., 1951, v.84, p.244.
10. Dzuba V.A., Silvestrov P.G., Flambaum V.V. J. Phys., 1982, v.B15, p.L575.
11. Дзюба В.А., Сушков О.П., Фламбаум В.В. Препринт ИЯФ СО АН СССР 82-89. Новосибирск, 1982.
12. Dzuba V.A., Flambaum V.V., Silvestrov P.G. and Sushkov O.P. J. Phys., 1987, v.B20, p.1399.

В.А. Дзюба

Комплекс программ для задач атомной физики.  
II. Атом во внешнем поле

Ответственный за выпуск С.Г.Попов

Работа поступила 23.10 1989 г.  
Подписано в печать 13.11 1989 г. МН 10483  
Формат бумаги 60×90 1/16 Объем 2,1 печ.л., 1,8 уч.-изд.л.  
Тираж 230 экз. Бесплатно. Заказ № 142

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.