

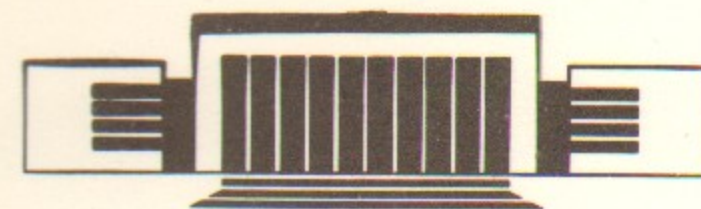


ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ СО АН СССР

В.А. Дзюба

КОМПЛЕКС ПРОГРАММ
ДЛЯ ЗАДАЧ АТОМНОЙ ФИЗИКИ
· МЕТОД САМОСОГЛАСОВАННОГО ПОЛЯ

ПРЕПРИНТ 89-92



НОВОСИБИРСК

Комплекс программ
для задач атомной физики
I. Метод самосогласованного поля

В.А. Дзюба

Институт ядерной физики
630090, Новосибирск 90, СССР

АННОТАЦИЯ

Описана реализация методов Хартри—Фока—Слейтера и Хартри—Фока в релятивистском варианте. Их использование позволяет рассчитывать уровни энергии, интервалы тонкой и сверхтонкой структуры, $E1$ и $M1$ амплитуды и т. п. для любых атомов в приближении центрально-симметричного поля а также получить полный ортонормированный набор состояний дискретного и непрерывного спектров, который необходим для учета поляризационных и корреляционных эффектов по многочастичной теории возмущений.

1. ВВЕДЕНИЕ

Данная работа посвящена описанию комплекса программ для задач атомной физики, который является дальнейшим развитием комплекса программ, описанного в [1], и предназначен для расчета с высокой точностью таких характеристик атомов, как уровни энергии, интервалы тонкой и сверхтонкой структуры, амплитуды $E1$ - и $M1$ -переходов, g -факторы, эффекты несохранения четности. Точность понимается как степень совпадения расчетных параметров с соответствующими экспериментальными (там, где они есть). Данный комплекс обеспечивает точность расчетов на уровне 0,1—1%. Высокая точность достигается путем использования релятивистского метода Хартри—Фока (РХФ) с последующим учетом поляризационных и корреляционных эффектов:

- а) поляризация остова внешним полем учитывается во всех порядках по кулоновскому взаимодействию путем решения зависящих от времени уравнений Хартри—Фока;
- б) все корреляционные поправки второго порядка по остаточному кулоновскому взаимодействию учитываются либо прямым суммированием, либо с помощью фейнмановской диаграммной техники и функций Грина;
- в) доминирующие классы диаграмм высших порядков учитываются суммированием геометрической прогрессии, либо решением соответствующих уравнений.

Описание комплекса состоит из трех частей:

1. «Метод самосогласованного поля». — Описаны реализации

методов Хартри—Фока—Слэйтера и Хартри—Фока в релятивистском варианте.

2. «Атом во внешнем поле». — Описана реализация метода решения зависящих от времени уравнений Хартри—Фока (метод, аналогичный известному приближению случайных фаз [2]).

3. «Расчет корреляционных поправок». — Описаны программы расчета корреляционных поправок второго порядка двумя способами: по многочастичной теории возмущений и с помощью фейнмановской диаграммной техники, а также программы учета трех доминирующих классов диаграмм высших порядков:

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

Все программы ориентированы, в основном, на атомы, содержащие один внешний электрон поверх заполненных оболочек (Cs, Au, Tl и т. п.) однако они могут быть использованы и для расчета других атомов. При этом центрально-симметричное взаимодействие внешних электронов между собой учитывается уже в методе Хартри—Фока, а обменное и корреляционное взаимодействия должны быть учтены отдельно по теории возмущений. Для этого существуют специальные программы, описание которых выходит за рамки данной работы.

Данный комплекс программ широко применялся для расчета различных характеристик тяжелых атомов (см., например, [3—10]). Все программы написаны на языке FORTRAN-IV и реализованы на ЭВМ ЕС-1061.

2. УРАВНЕНИЯ ХАРТРИ—ФОКА И ХАРТРИ—ФОКА—СЛЕЙТЕРА

Расчеты атомов методами Хартри—Фока и Хартри—Фока—Слэйтера хорошо известны (см., например, [11—13]). Выпишем здесь соответствующие уравнения для удобства дальнейших ссылок.

Рассмотрим для начала атом с замкнутыми оболочками. В приближении Хартри—Фока его волновая функция представляется в виде антисимметризованного произведения одночастичных волновых функций (ВФ), имеющих вид

$$\Psi_{nljj_z} = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} f(r) \Omega_{jlj_z}(\vec{r}/r) \\ i \alpha g(r) \tilde{\Omega}_{jlj_z}(\vec{r}/r) \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где l, j — орбитальный и полный моменты электрона; n — главное квантовое число, Ω_{jlj_z} — шаровой спинор ($\tilde{\Omega} = -(\vec{\sigma} \vec{n}) \Omega$); $\alpha = 1/137,036$ — постоянная тонкой структуры. Таким образом, все электроны одной подоболочки имеют одинаковые радиальные ВФ.

Система уравнений релятивистского метода Хартри—Фока (РХФ) для радиальных ВФ имеет вид (см., например, [14]) (в данной работе пользуемся атомными единицами):

$$f'_u(r) + \frac{\kappa_u}{r} f_u(r) - [2 + \alpha^2(\epsilon_u - V(r))] g_u(r) = - \sum_{v,k} C_{uvk} K_{uvk}(r) g_v(r),$$

$$g'_u(r) - \frac{\kappa_u}{r} g_u(r) + (\epsilon_u - V(r)) f_u(r) = - \sum_{v,k} C_{uvk} K_{uvk}(r) f_v(r). \quad (2)$$

здесь u, v нумеруют состояния электронов (т. е. соответствуют набору квантовых чисел n, l, j); $\kappa = (-1)^{l+j+1/2} (j+1/2)$; ϵ_u — энергия электрона; $V(r)$ — прямой потенциал, создаваемый электронами и атомным ядром:

$$V(r) = - \frac{1}{r} \int_0^r \rho_N(r) dr - \int_r^\infty \frac{\rho_N(r)}{r} dr + \frac{1}{r} \int_0^r \rho_e(r) dr + \int_r^\infty \frac{\rho_e(r)}{r} dr, \quad (3)$$

ρ_N — ядерная плотность:

$$\rho_N(r) = \frac{N}{\exp\left(\frac{r-r_N}{d}\right) + 1}, \quad (4)$$

r_N — радиус ядра ($r_N = 1,1 A^{1/3}$ ферми), d — диффузность ($d = 0,57$ ферми) [15]. Константа N определяется из условия нормировки:

$$\int \rho_N(r) dV = Z.$$

ρ_e — электронная плотность:

$$\rho_e(r) = \sum_u (f_u^2(r) + \alpha^2 g_u^2(r)) (2j_u + 1). \quad (5)$$

Правая часть в уравнении (2) описывает обменное взаимодействие электронов (выражения такого вида обычно называют «нелокальным потенциалом»):

$$C_{uvk} = (2j_v + 1) \begin{pmatrix} k & j_u & j_v \\ 0 & 1/2 & -1/2 \end{pmatrix}^2$$

$$K_{uvk}(r) = \frac{1}{r^k} \int_0^r x^k (f_u(x) f_v(x) + \alpha^2 g_u(x) g_v(x)) dx + \\ + r^{k+1} \int_r^\infty \frac{(f_u(x) f_v(x) + \alpha^2 g_u(x) g_v(x))}{x^{k+1}} dx, \quad (6)$$

$k=0, 1, 2, \dots$ — мультипольность кулоновского кванта.
Волновые функции нормированы условием:

$$\int_0^\infty (f_u^2(r) + \alpha^2 g_u^2(r)) dr = 1.$$

Остановимся теперь вкратце на атомах, содержащих один или более электронов поверх замкнутых подболочек. Если это один электрон (Cs, Tl и т. п.), то для таких атомов удобным является так называемое V^{N-1} — приближение, которое состоит в том, что процедура самосогласования проводится для $N-1$ электрона остова, содержащего лишь замкнутые подболочки, а состояния внешнего электрона вычисляются затем в поле замороженного остова. В этом случае все выражения (2) — (6) остаются справедливыми. Если внешних электронов больше, чем один, то создаваемый ими потенциал может быть учтен прибавлением к (5) сферически симметризованной плотности внешних электронов:

$$\rho_{out}(r) = \sum_u (f_u^2(r) + \alpha^2 g_u^2(r)) n_u,$$

где n_u — количество электронов на данной внешней подболочке (см. гл. 5). Аналогично можно поступить в случае одного внешнего электрона (V^N -приближение). Что касается обменного взаимодействия внешних электронов между собой, то его учет удобно перенести в теорию возмущений. Отметим, что мы здесь не рассматриваем случай сложных атомов с незаполненными d и f оболочками, которые требуют специальной техники расчета.

Для метода Хартри—Фока актуальным является вопрос о выборе начального приближения. Как известно, уравнения РХФ могут сходиться к не той конфигурации либо не сходиться вовсе.

Хорошая сходимость имеет место практически всегда, если в качестве начального приближения использовать метод Хартри—Фока—Слейтера (ХФС) [16]. В методе ХФС обменное взаимодействие аппроксимируется добавкой к прямому потенциалу:

$$\sum_{vk} C_{uvk} f_v(r) K_{uvk}(r) \rightarrow \delta V(r) f_u(r), \\ \delta V(r) = \frac{3}{2} C \left(\frac{3\rho_e(r)}{4\pi^2} \right)^{1/3}, \quad \frac{2}{3} \leq C \leq 1. \quad (7)$$

Электронная плотность вычисляется по формуле:

$$\rho_e(r) = \sum_u (f_u^2(r) + \alpha^2 g_u^2(r)) n_u,$$

где n_u — числа заполнения подболочек, не обязательно равные $2j_u + 1$, т. е. метод ХФС применим для атомов с незаполненными подболочками.

Приближение (7) неприменимо при больших r , где $\rho(r) < 1$. Это видно уже из того, что (7) приводит к неправильной асимптотике потенциала. Для исправления асимптотики используется правило Лэттера [17], которое состоит в том, что при $|V(r)| < q/r$ следует положить $V(r) = -q/r$, где $q = Z - N + 1$, N — число электронов.

В результате, система уравнений ХФС имеет вид:

$$f'_u(r) + \frac{\kappa_u}{r} f_u(r) - [2 + \alpha^2(\epsilon_u - \tilde{V}(r))] g_u(r) = 0, \\ g'_u(r) - \frac{\kappa_u}{r} g_u(r) + (\epsilon_u - \tilde{V}(r)) f_u(r) = 0, \quad (8) \\ \tilde{V}(r) = V(r) + \delta V(r).$$

Нерелятивистский вариант уравнений РХФ и ХФС получается при $\alpha = 0$.

3. ВЫБОР КООРДИНАТНОГО МАССИВА

В настоящем комплексе программ реализовано два способа формирования координатного массива. В первом, более простом, производится переход к новой переменной x [18]:

$$x = r + \beta \ln r, \quad (9)$$

β приблизительно равно размеру атомного остова. Сетка с постоянным шагом по x имеет сгущение к нулю и подходит как для внешних, так и для внутренних электронов. Вычисления производятся подпрограммой XXXX.

Второй способ основан на требовании пропорциональности шага по радиусу де-Бройлевской длине волны электрона: $h \sim \lambda = 2\pi\hbar/p$. Полученный таким способом координатный массив позволяет иметь меньшую вычислительную погрешность на том же количестве точек, что и в первом способе, однако он существенно более сложный, так как требует вычисления де-Бройлевской длины волны электрона:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m(E-U(r))}}. \quad (10)$$

Потенциал $U(r)$ мы задаем параметрической формулой

$$U(r) = U_1(r) + U_2(r) + U_3(r). \quad (11)$$

$U_1(r)$ выбирается так, чтобы воспроизводить энергетический спектр атома:

$$U_1(r) = \frac{(Z-q)}{r(1-\eta r)^2} \frac{e^{-\mu/d} + 1}{e^{(r-\mu)/d} + 1} - \frac{q}{r}. \quad (12)$$

$U_2(r)$ обеспечивает дополнительное сгущение точек на тех расстояниях, которые дают существенный вклад в корреляционные поправки:

$$U_2(r) = \frac{\beta}{(r^2 + b^2)}. \quad (13)$$

$U_3(r)$ обеспечивает сгущение точек в области атомного ядра, что важно для расчета матричных элементов сверхтонкого и слабого взаимодействий:

$$U_3(r) = \frac{\delta}{r^2(r+1,2r_N)^{\gamma-2}}. \quad (14)$$

Мы берем для Cs $Z=55$, $\mu=3,1 a_B$, $d=0,4 a_B$, $\eta=2,235 a_B^{-1}$, $\beta=0,0955$, $b=3 a_B$, $r_N=10^{-4}$, $\delta=0,563$, $\gamma=3,29$.

Переход к новой переменной x осуществляется путем численно-

го интегрирования по формуле Симпсона выражения для классического импульса электрона:

$$x = k \int \sqrt{E - U(r)} dr. \quad (15)$$

Шаг по x считается постоянным. Коэффициент k выбирается так, чтобы размер шага был равен единице, — тогда x имеет смысл номера точки. Параметр E мы берем равным $-1/16$ а.е., что примерно соответствует энергии внешнего электрона.

Этот способ формирования координатного массива реализован в подпрограмме XXXN.

4. ИНТЕГРИРОВАНИЕ УРАВНЕНИЙ НА ОДНОМ ШАГЕ

Для интегрирования дифференциальных уравнений применяется метод, аналогичный методу Нумерова, использующий интерполяционную формулу Адамса пятого порядка [19]:

$$y_m = y_{m-1} + h(c_1 y'_m + c_2 y'_{m-1} + c_3 y'_{m-2} + c_4 y'_{m-3} + c_5 y'_{m-4}), \quad (16)$$

$$c_1 = \frac{271}{720}, \quad c_2 = \frac{676}{720}, \quad c_3 = -\frac{264}{720}, \quad c_4 = \frac{106}{720}, \quad c_5 = -\frac{19}{720}.$$

Запишем систему уравнений (2) в виде, разрешенном относительно производных:

$$\begin{aligned} \frac{df}{dx} &= a_{11}f + a_{12}g + q, \\ \frac{dg}{dx} &= a_{21}f + a_{22}g + p, \end{aligned} \quad (17)$$

Применяя формулу (16) для каждой из функций f и g и подставляя производные в точке x_m согласно (17), получим:

$$\begin{aligned} f_m &= f_{m-1} + h[c_1(a_{11}f_m + a_{12}g_m + q) + c_2 f'_{m-1} + c_3 f'_{m-2} + c_4 f'_{m-3} + c_5 f'_{m-4}] \\ g_m &= g_{m-1} + h[c_1(a_{21}f_m + a_{22}g_m + p) + c_2 g'_{m-1} + c_3 g'_{m-2} + c_4 g'_{m-3} + c_5 g'_{m-4}] \end{aligned} \quad (18)$$

Разрешив эту систему относительно f_m и g_m , мы выразим их через f_{m-1} , g_{m-1} и значения производных в предыдущих точках.

Интегрирование на одном шаге осуществляет подпрограмма DIFR, которая использует также подпрограммы DERY — вычисле-

ние матрицы системы (18) и EQV2—решение системы из двух линейных уравнений по правилу Крамера.

5. ВЫЧИСЛЕНИЕ ЛОКАЛЬНОГО ПОТЕНЦИАЛА

Вычисление прямого локального потенциала производится интегрированием электронной и ядерной плотности (см. (3) — (5)). Для этого вводится вспомогательная функция

$$Y(r) = \frac{1}{r} \int_0^r \rho(r) dr \quad (19)$$

и интегрируются дифференциальные уравнения

$$\begin{aligned} \frac{dY}{dr} &= \frac{Y}{r} + \frac{\rho}{r}, \\ \frac{dV}{dr} &= \frac{Y}{r} \end{aligned} \quad (20)$$

с граничными условиями

$$Y(r) \rightarrow 0 \text{ при } r \rightarrow 0, \quad V(r) \rightarrow \frac{Z}{r} \text{ при } r \rightarrow \infty.$$

Первое из уравнений (20) интегрируется от r_{\min} до r_{\max} , второе — в обратном направлении. Интегрирование производится по интерполяционной формуле Адамса пятого порядка (16). Эта формула требует задания начальных данных в четырех первых точках. При $r = r_{\min}$ полагаем что $\rho \sim r^\gamma$, тогда

$$\begin{aligned} \gamma &= \ln[\rho(r_4)/\rho(r_1)] / \ln(r_4/r_1), \\ Y(r_i) &= \frac{\rho(r_i)}{\gamma+1}, \quad Y'(r_i) = \frac{\gamma}{r_i} Y(r_i), \\ i &= 1, 2, 3, 4; \end{aligned}$$

при $r = r_{\max}$ полагаем

$$\begin{aligned} V(r_i) &= Y(r_i), \quad V'(r_i) = -Y(r_i)/r_i, \\ i &= \max, \max-1, \max-2, \max-3. \end{aligned}$$

Как отмечалось выше (см. гл. 2), потенциал, создаваемый внешними электронами, может быть учтен прибавлением к электронной плотности остова электронной плотности, создаваемой частью внешних электронов. Ниже приведены примеры вариантов потенциала внешних электронов для Tl, Pb и Bi:

Tl, V^{N-1} -приближение:	$V=0,$
Tl, V^N -приближение:	$V=V(6p_{1/2}),$
Tl, V^N -приближение:	$V=\frac{1}{3}V(6p_{1/2}) + \frac{2}{3}V(6p_{3/2}),$
Pb, V^{N-1} -приближение:	$V=V(6p),$
Pb, V^N -приближение:	$V=V(6p_{1/2}) + V(6p_{3/2}),$
Bi, V^{N-1} -приближение:	$V=V(6p_{1/2}) + V(6p_{3/2}),$

Вычисление прямого потенциала производится в подпрограмме HFROT, которая использует также подпрограммы RONUC—вычисление плотности заряда на ядре по формуле (4), KKG—интегрирование уравнений (20), DIFZY—один шаг метода Адамса.

6. ВЫЧИСЛЕНИЕ ОБМЕННОГО (НЕЛОКАЛЬНОГО) ПОТЕНЦИАЛА

В настоящем комплексе реализовано два способа вычисления обменного взаимодействия. Первый из них, точный, состоит в том, что входящие в (6) интегралы:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{r^k} \int_0^r x^k (f_u(x) f_v(x) + \alpha^2 g_u(x) g_v(x)) dx + \\ &+ r^{k+1} \int_r^\infty \frac{f_u(x) f_v(x) + \alpha^2 g_u(x) g_v(x)}{k^{k+1}} dx \end{aligned}$$

вычисляются по формуле Симпсона. Сначала вычисляется первый интеграл от r_{\min} до r_{\max} , затем второй от r_{\max} до r_{\min} и результаты суммируются. Вычисления проводятся в подпрограмме KKFF. При этом один раз в начале программы должна быть вызвана подпрограмма KMULT.

Во втором, приближенном, способе формируется матрица в координатном пространстве, изображающая ядро интегрального оператора во втором из уравнений (2). Это делается в два этапа.

Сначала вычисляется матрица

$$Y(i, j) = \sum_{k, v} C_{uvk} f_v(r_i) r_i^k y_i f_v(r_j) y_j / r_j^{k+1}, \quad (22)$$

где $y_i = (dx/dr)_{r=r_i}$ — якобиан преобразования от r к x (см. гл. 3), коэффициенты C_{uvk} приведены в формуле (6). При этом не используются малые и большие расстояния, где обменное взаимодействие несущественно (например, для Cs $0.1/Z < r < 16 a_B$). А в промежуточной области берутся не все точки, а лишь каждая четвертая. Заложенный в программу размер матрицы (22) 59×59 позволяет вычислять обменное взаимодействие с хорошей точностью. Затем, все элементы матрицы $Y(i, j)$ умножаются на коэффициенты:

$$\begin{aligned} 2/3(4h) & \text{— если } i \text{ и } j \text{ имеют одинаковую четность,} \\ 4/3(4h) & \text{— если } i \text{ и } j \text{ имеют разную четность.} \end{aligned} \quad (23)$$

где h — шаг по переменной x . После этой операции умножение матрицы на вектор-функцию будет эквивалентно интегрированию по r по формуле Симпсона. Следует обратить внимание на то, что функция (22) имеет излом при $r_1 = r_2$, поэтому правило (23) подобрано так, чтобы излом всегда попадал на границу интервала формулы Симпсона. Строго говоря, правило (23) надо было бы согласовать с формулой Симпсона и при $r = r_{\min}$ и $r = r_{\max}$. Однако на этих расстояниях интегрируемая функция мала и это становится несущественным.

Отметим, что определенная таким образом матрица обменного взаимодействия зависит от x как от параметра ($x = (-1)^{l+j+1/2} (j+1/2)$). Так, в цезии, где есть только s -, $p_{1/2}$ -, $p_{3/2}$ -, $d_{3/2}$ - и $d_{5/2}$ -функции, требуется всего пять матриц.

При умножении матрицы (22), (23) на функцию, обменное взаимодействие оказывается вычисленным не во всех точках, а лишь в каждой четвертой. Промежуточные точки заполняются с помощью интерполяционного полинома Лагранжа третьей степени, который проводится по двум точкам, лежащим слева от данной, и двум точкам, лежащим справа от данной. Для первого и последнего интервалов используется полином второй степени.

Таким образом, в этом способе вычисления обменного взаимодействия делается три упрощения:

- 1) используются не все точки координатного массива;
- 2) не учитываются нижние компоненты ВФ в матрице (22);
- 3) не учитывается обменное взаимодействие в первом из уравнений (2).

Тем не менее, получаемая при этом точность, достаточна для подавляющего большинства приложений. Кроме того, этот способ имеет два существенных преимущества:

- 1) значительно сокращается время вычислений;
- 2) появляется возможность учесть корреляционное взаимодействие в одночастичных орбиталях (Бракнеровские орбитали), так как массовый оператор Σ , описывающий корреляционное взаимодействие, также является матрицей в координатном пространстве (см. [8] а также ч. III настоящей работы) и его можно просто прибавить к обменной матрице (22).

Вычисление обменных матриц осуществляется подпрограммой MAKEU, вычисление обменного взаимодействия по готовой матрице — подпрограммой KKFFU.

7. ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ

Рассмотрим сначала граничные условия при $r \rightarrow 0$. Если нам не нужна ВФ внутри и в непосредственной близости от ядра, то граничные условия можно задавать при $r_N \ll r \ll a_B/Z$ ($r_N = A^{1/3}/m_\pi$ радиус ядра). В этой области

$$V(r) \approx -\frac{Z}{r} + C,$$

Z — заряд ядра, C — потенциал электронов, который здесь можно считать постоянным. Таким образом, возникает задача о движении в кулоновском поле частицы с эффективной энергией $\epsilon' = \epsilon - C$. Ее решение хорошо известно и соответствующие формулы приведены в [20] и [1]. Часто, однако, необходимо знать волновую функцию на ядре и в непосредственной близости от ядра (например, при расчете матричных элементов слабого или сверхтонкого взаимодействий). С другой стороны, удобно иметь универсальные волновые функции, пригодные для расчета любого эффекта. Поэтому мы, как правило, задаем граничные условия при $r \ll r_N$. Здесь потенциал ядра можно считать постоянным ($U_0 \approx \frac{3}{2} Z/r_N$) а электрон — ультрарелятивистским ($mc^2 \ll U_0$). Нетрудно убедиться, что в этом случае

$$f = A \frac{\alpha^2 U_0}{2x+1} r^{x+1}, \quad g = Ar^x \quad \text{при } x > 0;$$

$$f = A r^{|\kappa|}, \quad g = -A \frac{U_0}{(2|\kappa| + 1)} r^{|\kappa| + 1} \quad \text{при } \kappa < 0. \quad (24)$$

Для простоты полагаем $A = 1$. Соответствующие вычисления осуществляет подпрограмма FGRQ0.

Теперь о граничных условиях при $r \rightarrow \infty$. Для расчета волновых функций в фиксированном локальном потенциале при больших r применимо квазиклассическое приближение

$$f(r) = \frac{1}{\sqrt{p(r)}} \exp\{-\int p(r) dr\},$$

$$p(r) = \sqrt{2\left(V(r) + \frac{\kappa(\kappa+1)}{2r^2} - \varepsilon\right)}. \quad (25)$$

Нижняя компонента спинора находится с помощью уравнения (8):

$$g(r) = \frac{1}{2} \left(-p(r) + \frac{\kappa}{r} \right) f(r); \quad (26)$$

формулы (25), (26) применимы, если

$$\exp\left(\int_{r_1}^r p(r) dr\right) \gg 1$$

(r_1 — точка остановки).

Вычисления проводятся подпрограммами ASIMPO или ASIMPK.

Наличие обменного взаимодействия по разному проявляется для внешних и внутренних электронов. Для внешних электронов при $r \rightarrow \infty$ обменное взаимодействие становится несущественным и формулы (25) и (26) применимы. Для внутренних электронов обменное взаимодействие меняет вид асимптотики [21]. Однако для простоты и единообразия мы пользуемся формулами (25), (26) и для внутренних электронов. Дело в том, что ошибка, вызванная неправильным заданием граничного условия на бесконечности, быстро убывает по мере удаления от граничной точки и практически не оказывает влияния на решение в целом.

8. РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ДИРАКА В ФИКСИРОВАННОМ ПОТЕНЦИАЛЕ

Точное решение задачи РХФ или ХФС сводится к интегрированию системы связанных интегро-дифференциальных уравнений (2) — (6) или (7) — (8). Для этого, уравнения (2) или (8) интегрируем по очереди для каждой из внутренних подоболочек атома при фиксированных локальном и нелокальном потенциалах. Соответствующие алгоритмы описаны в [1]. Рассмотрим здесь для цельности изложения алгоритм решения уравнения Дирака в более общем случае наличия нелокального потенциала. Этот же алгоритм пригоден для решения задачи в отсутствие нелокального потенциала, хотя здесь существует и более простой алгоритм [1]. Итак, нам надо решить уравнение Дирака при заданном потенциале $V(r)$ и ядре интегрального оператора $Q(r, r')$:

$$f'(r) + \frac{\kappa}{r} f(r) - [2 + \alpha^2(\varepsilon - V(r))] g(r) = \int_0^\infty Q(r, r') g(r') dr',$$

$$g'(r) - \frac{\kappa}{r} g(r) + (\varepsilon - V(r)) f(r) = \int_0^\infty Q(r, r') f(r') dr'. \quad (27)$$

Это обычная задача на собственные значения, но с нелокальным потенциалом. Она решается итерациями, которые устроены следующим образом. На каждой итерации считаем заданными энергию $\varepsilon_n = -0,5/v_n^2$ и правую часть

$$F_n(r) = \int Q(r, r') f(r') dr' \quad G_n(r) = \int Q(r, r') g(r') dr'$$

(n — номер итерации). Сначала находим свободное решение (т. е. при $F(r) = 0$ и $G(r) = 0$), интегрируя (27) от $r = r_{\max}$ до точки, в которой происходит смена знака производной верхней компоненты этого решения (точка сшивки r_c). Затем находим вынужденное решение, интегрируя (27) справа и слева до r_c . Решение справа от точки сшивки мы переопределяем далее, прибавляя к вынужденному решению свободное с таким весом, чтобы обеспечить непрерывность верхней компоненты ВФ в точке сшивки. Таким образом, на каждой итерации мы получаем решение с непрерывной верхней компонентой и разрывной нижней. Чтобы перейти к следующей итерации, необходимо переопределить энергию и правую часть. Считая, что энергия и ВФ достаточно близки к точному решению, можно получить следующую экстраполяционную формулу:

$$\begin{aligned} v^{(n+1)} &= v^{(n)} + \Delta v^{(n)}, \\ \Delta v^{(n)} &= \Delta v_1^{(n)} + \Delta v_2^{(n)}, \end{aligned} \quad (28)$$

где

$$\Delta v_1 = -v^3 \frac{f(r_c)(g_R - g_L)}{\int_0^\infty (f^2 + \alpha^2 g^2) dr},$$

$$\Delta v_2 = \frac{v^3}{\int_0^\infty (f^2 + \alpha^2 g^2) dr} \int_0^\infty \int_0^\infty dr dr' f^{(n)}(r) Q(r, r') [f^{(n)}(r') - f^{(n-1)}(r')].$$

Здесь g_R и g_L — значения нижней компоненты ВФ в точке сшивки, полученные при интегрировании уравнений справа и слева, соответственно.

Правая часть на следующей итерации определяется так:

$$\begin{aligned} F^{(n+1)}(r) &= aF^{(n)}(r) + (1-a)F^{(n-1)}(r), \\ G^{(n+1)}(r) &= aG^{(n)}(r) + (1-a)G^{(n-1)}(r), \end{aligned}$$

$F^{(n-1)}$, $G^{(n-1)}$ — правая часть на предыдущей итерации. Параметр a выбирается таким образом, чтобы функция $\tilde{g}(r) = ag^{(n)}(r) + (1-a)g^{(n-1)}(r)$ не имела разрыва:

$$a = \frac{\Delta v_1^{(n-1)}}{\Delta v_1^{(n-1)} - \Delta v_1^{(n)}}.$$

Если $a > 1$ или $a < 0$, то мы полагаем $a = 1$.

Итерации прекращаются, если каждая из величин Δv_1 , Δv_2 становится меньше заданного значения. Дело в том, что обычно Δv_1 и Δv_2 сильно компенсируются, так что $|\Delta v_1|, |\Delta v_2| \gg |\Delta v|$ и, поэтому, именно малость Δv_1 и Δv_2 , а не Δv определяет близость к точному решению. Фактически это означает, что сходимость к точной энергии значительно более быстрая, чем к волновой функции. После завершения итераций ВФ нормируются.

Применяемая здесь итерационная процедура сходится существенно медленнее, чем аналогичная процедура для локального потенциала (см. [1]). Для локального потенциала $\Delta v^{(n+1)} \sim (\Delta v^{(n)})^2$, здесь же $\Delta v_{1,2}^{(n+1)} \sim (F/V)\delta v_{1,2}^{(n)}$, где (F/V) — некоторая величина, характеризующая отношение нелокального взаимодействия к

локальному. В атомах величина обменного взаимодействия такова, что точность $10^{-3} \div 10^{-4}$ достигается за 10—15 итераций.

Описанная процедура реализована в подпрограммах FGDPOD и FGNDP.

9. ЗАДАНИЕ НАЧАЛЬНЫХ ДАННЫХ И ПРОЦЕДУРА САМОСОГЛАСОВАНИЯ В МЕТОДЕ ХАРТРИ—ФОКА—СЛЕЙТЕРА

На первом шаге процедуры самосогласования в методе ХФС используется параметрический потенциал, задаваемый формулой (12). Значения параметров для Cs приведены ниже формулы (14). В грубом приближении для других атомов можно считать, что $\eta \sim Z^{1/3}$ а μ и d не зависят от Z . Кроме того, чтобы начать вычисления, необходимо задать конфигурацию и начальные приближения для энергии и радиуса каждой подоболочки. В программе принята стандартная схема заполнения оболочек, которая состоит в том, что сначала изменяется главное квантовое число n от 1 до n_{\max} ; затем, при фиксированном n , изменяется l от 0 до $n-1$; и, наконец, при фиксированных n и l изменяется j от $l-1/2$ до $l+1/2$. На каждой подоболочке находится $2j+1$ электронов. Следовательно, стандартная последовательность заполнения подоболочек выглядит следующим образом:

$$1s^2, 2s^2, 2p_{1/2}^2, 2p_{3/2}^4, 3s^2, 3p_{1/2}^2, 3p_{3/2}^4, 3d_{3/2}^4, 3d_{5/2}^6, \dots$$

Входными данными к программе описываются лишь те подоболочки, где эта схема оказывается нарушенной (как правило, внешние). Например, для Cs после $4d_{5/2}$ идут $5s$, $5p_{1/2}$, $5p_{3/2}$, а в стандартной схеме было бы: ..., $4d_{5/2}$, $4f_{5/2}$, $4f_{7/2}$, $5s$, $5p_{1/2}$, $5p_{3/2}$. Следовательно, в Cs стандартная схема оказывается нарушенной, начиная с $5s$ -функции. Поэтому функции $5s$, $5p_{1/2}$, $5p_{3/2}$ (и только они) должны быть заданы извне. Задание конфигурации производится в подпрограмме ZKAP.

Нулевое приближение для эффективного главного квантового числа v_0 ($\epsilon = -0,5/v^2$) для подоболочки с номером i задается по формуле

$$v_0 = \frac{1/Z + x(1-1/Z)}{-4x^2 + 4x + 1}, \quad (29)$$

где $x = (i-1)/(n_2-1)$, n_2 — количество подоболочек.

Формула (29) дает $v=1/Z$ для $i=1$, $v=1$ для $i=n_2$ и в боль-

шинстве случаев обеспечивает сходимость итерационной процедуры (см. гл. 8) к заданной волновой функции. Контроль осуществляется по количеству нулей полученной волновой функции. Если количество нулей отличается от заданного на величину Δn , то стартовое v_0 исправляется по формуле

$$v'_0 = v_0 - a \frac{\Delta n}{|\Delta n|} v_0, \quad (30)$$

где a — численный коэффициент, и итерационная процедура повторяется. Если использование формулы (30) приводит к осцилляциям между двумя соседними ВФ, лежащими по обе стороны от заданной, то коэффициент a уменьшается в два раза и т. д.

Вычисление начальных v_0 производится в подпрограмме ZANP, а их исправление, а также вызов FGDPOD (с зануленным обменным взаимодействием) — в подпрограмме FGMAD.

Радиус ВФ задается по формуле $r_{\max} = 2v^2 + 10v + 0,1$.

Стартовый потенциал на каждой следующей итерации метода ХФС $V_i^{(n+1)}$ вычисляется путем «взвешивания» стартового потенциала на предыдущей итерации $V_i^{(n)}$ и потенциала, полученного из электронной плотности по формулам (3), (7) $V_i^{(n)}$:

$$V_i^{(n+1)}(r) = aV_i^{(n)}(r) + (1-a)V_i^{(n)}(r). \quad (31)$$

В большинстве случаев $a = 1/2$ обеспечивает быструю сходимость. Если приближение (12) является слишком грубым, необходимо брать a ближе к единице, для того чтобы замедлить изменение потенциала и тем самым избежать раскачки итераций.

10. ПРОЦЕДУРА САМОСОГЛАСОВАНИЯ В МЕТОДЕ ХАРТРИ—ФОКА

Как уже отмечалось выше, для решения системы связанных уравнений РХФ (2) в качестве нулевого приближения мы обычно используем ВФ и энергии, полученные методом ХФС. Дело в том, что метод ХФС требует сравнительно малого объема вычислений и, в то же время, является весьма точным для всех внутренних электронов. Практически во всех случаях метод Хартри—Фока сходится к той же конфигурации, которая была получена в методе ХФС. Контроль за тем, что эта конфигурация такая как надо в методе ХФС легко осуществляется по количеству нулей ВФ (см. гл. 9). В методе же РХФ такой контроль затруднен, так как

обменное взаимодействие меняет асимптотику ВФ и может привести к появлению дополнительных нулей на больших расстояниях [21].

Для ускорения сходимости в методе РХФ применяется «взвешивание» прямого потенциала точно так же как и в методе ХФС (см. (31)). Заметим, что взвешивание обменного потенциала потребовало бы большой дополнительной памяти машины, так как пришлось бы хранить либо функции на предыдущей итерации, либо матрицы, описывающие обменное взаимодействие (см. гл. 6). С другой стороны обменное взаимодействие мало, и способ его учета слабо влияет на скорость сходимости метода РХФ. Поэтому в данной версии программ «взвешивание» обменного потенциала не предусмотрено.

Напомним здесь, что скорость сходимости решения уравнения Дирака с фиксированным нелокальным и локальным потенциалом зависит от относительной величины обменного взаимодействия (см. гл. 8). Поэтому в данном комплексе, так же, как в [1], предусмотрена возможность диагональное обменное взаимодействие (между электронами одной подоболочки) представлять в виде локального потенциала и переносить в левую часть уравнения (2). Такая перестановка заметно ускоряет сходимость итераций в подпрограмме FGDPOD или FGNDP. Соответствующую добавку к локальному потенциалу вычисляет подпрограмма DOBU. В то же время в подпрограмме KKFF, которая вычисляет обменное взаимодействие первым способом (см. гл. 6), должно быть исключено диагональное слагаемое. При представлении нелокального потенциала в виде матрицы в координатном пространстве перестановка диагонального обменного взаимодействия не предусмотрена, так как тогда эти матрицы пришлось бы часто пересчитывать, на что уходит заметное машинное время.

11. ВОЗБУЖДЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ ДИСКРЕТНОГО И НЕПРЕРЫВНОГО СПЕКТРОВ

После того, как процедура самосогласования в методе РХФ проведена, ВФ возбужденных состояний электрона вычисляются в поле замороженного остова. Для состояний дискретного спектра расчет проводится точно так же, как для электронов остова — с помощью программы FGDPOD (см. гл. 8). Однако, описанная в

гл. 8 процедура может не сходиться при вычислении возбужденных d -состояний некоторых атомов (например, Au). Причиной является большая величина обменного взаимодействия. Сходимости можно добиться, если обменное взаимодействие домножить на коэффициент $k < 1$, полученное при этом решение использовать как стартовое приближение для решения задачи с новым k ($k_1 > k_0$) и т. д. Например, для $6d$ -, $7d$ -, $8d$ -функций Au сходимость достигается следующей последовательностью значений k : 0,2; 0,4; 0,6; 0,8; 0,9; 0,95; 0,98; 1.

Для вычисления корреляционных поправок (к энергии и т. п.) могут понадобиться функции непрерывного спектра. Как и состояния дискретного спектра, мы нумеруем состояния непрерывного спектра с помощью «главного квантового числа» ν ($\epsilon = 0,5/\nu^2$). Однако здесь, естественно, ν меняется непрерывно от 0 до ∞ . Волновые функции непрерывного спектра мы нормируем на $\delta(\nu - \nu')$:

$$\int_0^{\infty} (f_{\nu}(r) f_{\nu'}(r) + \alpha^2 g_{\nu}(r) g_{\nu'}(r)) dr = \delta(\nu - \nu'). \quad (32)$$

Нормированные таким образом ВФ при $r \rightarrow \infty$ имеют следующий вид:

$$f_{\nu}(r) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{\nu} \sin(r/\nu + \nu \ln(2r/\nu) + \varphi_{\nu}). \quad (33)$$

Удобно воспользоваться квазиклассическим приближением, чтобы в аналитическом виде продлить решение (33) как можно дальше влево (в область меньших r). Тогда

$$\begin{aligned} f_{\nu}(r) &= \frac{A}{\sqrt{p(r)}} \sin S(r), \\ g_{\nu}(r) &= \frac{A}{2\sqrt{p(r)}} \left[-p(r) \sin S(r) + \frac{\kappa}{r} \cos S(r) \right], \\ A &= \sqrt{\frac{2}{\pi \nu^3}}, \quad p(r) = \sqrt{2\left(\epsilon - V(r) - \frac{\kappa(\kappa+1)}{2r^2}\right)}, \\ S(r) &= \int p(r) dr + S_0. \end{aligned} \quad (34)$$

ВФ непрерывного спектра для уравнения Дирака с локальным потенциалом вычисляются следующим образом. Уравнения интег-

рируются численно слева направо до тех пор, пока решение с точностью до нормировки не совпадет с квазиклассическим. Затем производится перенормировка, численного решения, а оставшиеся справа точки координатного массива заполняются по квазиклассическим формулам (34).

Что касается уравнения Дирака с нелокальным потенциалом (27), то оно решается итерациями. В качестве нулевого приближения используется ВФ, найденная в локальном потенциале без учета обменного взаимодействия. На каждой итерации решение находится так же, как в случае с локальным потенциалом, с той лишь разницей, что в уравнении имеется правая часть. В области же применимости асимптотических формул (34) правая часть (обменное взаимодействие) пренебрежимо мала. Итерации прекращаются, когда изменение фазы рассеяния на итерации становится меньше заданной величины. Описанный алгоритм реализует подпрограмма CONDP.

12. ВХОДНЫЕ ПАРАМЕТРЫ ПРОГРАММ

Ниже описаны входные параметры трех программ:

HFSL — программа, реализующая метод ХФС.

HFDP — программа, реализующая метод РХФ.

MTEST5 — программа вычисления возбужденных состояний дискретного и непрерывного спектров в поле замороженного остова.

а) Основные числовые параметры для программы HFSL описаны одним оператором NAMELIST с названием PARAM:

NAMELIST/PARAM/NDI,Z,NE,NV,STEP,NT,AS,RMIN,RMAX, BE,AM,DD,POT,C0,IDIS,N2

здесь

NDI — длина координатного массива (< 5000);

Z — заряд ядра;

NE — количество электронов;

NV — количество «нестандартных» внешних подоболочек (см. гл. 9);

STEP — параметр «взвешивания» потенциала от итерации к итерации (см. формулу (31));

NT — сколько сделать итераций;

AS — параметр a , формула (30);

RMIN, RMAX — минимальная и максимальная точки координатного массива (б.р.);

BE — параметр β , формула (9);

AM, DD, POT — параметры потенциала μ , d , η , соответственно;

IDIS < 0 — начинать с самого начала;

IDIS > 0 — начальное приближение брать с диска;

N2 — полное количество подболочек атома;

Если NV > 0, то во входных данных должно быть NV строк описывающих внешние «нестандартные» подболочки:

KAPPA, NO, NZ

где KAPPA = $\kappa = (-1)^{l+j+1/2} \left(j + \frac{1}{2} \right)$, NO — количество нулей ВФ;

NZ — количество электронов на данной подболочке.

Кроме того, программа HFSL читает названия двух файлов, в которых будет содержаться результат работы программы — координатный массив, волновые функции и другая служебная информация. Например, для Cs входные данные могут выглядеть следующим образом:

```
&PARAM NDI=500,Z= 55.,NE= 54,NV=3,NT=15,
RMIN=1.E-6,RMAX=40.,BE=4.,IDIS=-1,N2=17 &END
VXYDEBCS
HFFUNCCS
-1 4 2
 1 3 2
-2 3 4
```

б) Основные числовые параметры для программы HFDP описаны двумя операторами NAMELIST с названиями PARAM и BEGIN:

```
NAMELIST/PARAM/IWR,ZZ,ZE,N2,NOS,NF2,NAI,VES,PRDEL,
KMAX,EPS,I0,RN0,DN0
```

```
NAMELIST BEGIN/IBEG,MIN,QIN,MOUT,QOUT,KAP3
```

где

IWR = 1 — подробная распечатка;

IWR = 0 — сокращенная распечатка;

ZZ = Z (заряд ядра);

ZE — количество электронов, участвующих в формировании самосогласованного потенциала;

N2 — количество подболочек атома;

NOS, NF2 — с какой по какую подболочку включить в итерации;

NAI — сколько сделать итераций;

VES — параметр «взвешивания» потенциала (формула (31));

PRDEL — точность по v для подпрограммы FGDPOD (см. гл. 8);

KMAX — количество матриц обменного взаимодействия, необходимых на каждой итерации (см. гл. 6);

EPS — параметр, по которому выбирается радиус ВФ:

$$f(r_{max}) = EPS \cdot f_{max}$$

I0 — номер точки r_0 в координатном массиве ($r_0 \ll$ радиуса ядра);

RN0 — радиус ядра (ферми);

DN0 — диффузность ядра (ферми).

В операторе NAMELIST с именем BEGIN собраны параметры, описывающие те состояния внешних электронов, которые участвуют в формировании самосогласованного потенциала (см. конец гл. 5):

IBEG = 0 — стандарт;

IBEG = 1 — ВФ внешних электронов были вычислены программой HFSL, взять их в качестве начального приближения;

MIN — номера ВФ внешних электронов, создающих потенциал, действующий на внутренние электроны (не более двух номеров);

QUIN — соответствующие числа заполнения;

MOUT — номера ВФ внешних электронов, создающих потенциал, действующий на внешние же электроны;

QOUT — соответствующие числа заполнения;

KAP3 — κ внешних электронов.

Кроме того, как и программа HFSL, программа HFDP читает названия файлов для ВФ и другой служебной информации.

Например, данные для Рв, V^{N-1} -приближение, могут выглядеть так:

```
&PARAM IWR=0,ZZ=82.,ZE=81.,N2=22,NOS=1,
NF2=23,NAI=20,VES=0.5,PRDEL=1.E-6,KMAX=7,
EPS=1.E-5,I0=150,RN0=6.49,DN0=2.5 &END
&BEGIN IBEG=0,MIN=27,QIN=1.,MOUT=27,
QOUT=1.,KAP3=1 &END
VXYDEBPB
VXYDEBPB
HFFUNCPB
HFFUNCPB
```

в) В программе MTEST5 задаются следующие параметры:
NAMELIST/PARAM/NN1, NN2, IWR, ICOR, NIMP, OBMEN, VSC,
PRDEL, PRED, PRD, BR, KMIN, KMAX, KMAXD, MOR, MI, QV
NAMELIST/ATOM/ZZ, ZE, N2, ND, RN0, DN0

NN1, NN2: функции непрерывного спектра имеют двойную нумерацию: по ν ($\epsilon=0,5/\nu^2$) и по k . В программе заложены 13 различных значений ν : 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. Параметры NN1, NN2 относятся к нумерации по ν . NN1=1, NN2=13 означает, что надо вычислять ВФ непрерывного спектра для всех возможных ν (если KMAX > 0).

Параметры KMIN, KMAX относятся к нумерации по k . Если KMAX=0 то ВФ непрерывного спектра вычислять не надо.

NIMP=1 означает, что начальное приближение для ВФ непрерывного спектра лежит на диске.

ICOR=1 — учитывать корреляции (к обменным матрицам прибавить массовый оператор, сосчитанный заранее и лежащий на диске). В этом случае программа будет вычислять Бракнеровские орбитали (см. [8], ч.III, а также гл. 6 настоящей работы).

VSC — коэффициент перед массовым оператором (обычно VSC=1);

OBMEN — параметр k перед обменным взаимодействием (см. гл. 11);

KMAXD — количество обменных матриц для ВФ дискретного спектра;

MI, QV — то же, что MOUT, QOUT в программе HFDP;

ND — полное количество ВФ дискретного спектра;

Смысл параметров IWR, PRDEL, ZZ, ZE, N2, RN0, DN0 такой же, как в программе HFDP.

Кроме того, программа читает названия файлов с функциями, массовым оператором, другой служебной информацией, а также ND — N2 строк вида:

NF, KAP, AN0

где NF — номер ВФ внешнего электрона; KAP — его k ; AN0 — стартовое ν .

ЛИТЕРАТУРА

1. Дзюба В.А., Сушков О.П., Фламбаум В.В. Комплекс программ для расчета волновых функций и энергий электронов тяжелых атомов. — Препринт ИЯФ СО АН СССР 82-89. Новосибирск, 1982.
2. Amusia M.Ya. and Cherepkov N.A. Case Studies in Atomic Physics, 1975, v.5, p.47.
3. Dzuba V.A., Flambaum V.V., Sushkov O.P. J. Phys., 1983, v.B16, p.715.
4. Dzuba V.A., Flambaum V.V., Sushkov O.P. Phys. Lett., 1983, v.A95, p.230.
5. Dzuba V.A., Flambaum V.V., Sushkov O.P. J. Phys., 1984, v.B17, p.1953.
6. Dzuba V.A., Flambaum V.V., Silvestrov P.G., Sushkov O.P. Phys. Scr., 1985, v.31, p.275.
7. Dzuba V.A., Flambaum V.V., Silvestrov P.G., Sushkov O.P. J. Phys., 1985, v.B18, p.597.
8. Dzuba V.A., Flambaum V.V., Silvestrov P.G., Sushkov O.P. J. Phys., 1987, v.B20, p.1399.
9. Dzuba V.A., Flambaum V.V., Silvestrov P.G., Sushkov O.P. J. Phys. 1987, v.B20, p.3297.
10. Dzuba V.A., Flambaum V.V., Silvestrov P.G., Sushkov O.P. Europhys. Lett., 1988, v.7(5), p.413.
11. Банд И.М., Фомичев В.И. Комплекс программ RAINE, ч.I—IV. — Препринт ЛИЯФ — 498, 1979.
12. Амусья М.Я., Чернышева Л.В. Автоматизированная система исследования структуры атомов. — Л.: Наука, 1983.
13. Froese-Fischer C. Comput. Phys. Commun., 1987, v.43, p.355.
14. Grant I.P. Adv. Physics, 1979, v.19, p.747.
15. Ким Е. Мезонные атомы и ядерная структура. М.: Атомиздат, 1975.
16. Slater J.C. Quantum theory of atomic structure. — New York, Mc. Graw-Hill, 1960.
17. Latter R. Phys. Rev., 1955, v.99, p.510.
18. Братцев В.Ф. Таблицы атомных волновых функций. Л.: Наука, 1966.
19. Березин И.С., Жидков Н.П., Методы вычислений. — Физматгиз, 1962.
20. Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Пятаевский Л.П. Релятивистская Квантовая теория. ч.1. — М., 1968.
21. Dzuba V.A., Flambaum V.V., Silvestrov P.G. J. Phys., 1982, v.B15, p.L575.

В.А. Дзюба

**Комплекс программ для задач атомной физики
I. Метод самосогласованного поля**

Ответственный за выпуск С.Г.Попов

Работа поступила 14 июня 1989 г.
Подписано в печать 23.06. 1989 г. МН 10289
Формат бумаги 60×90 1/16 Объем 1,8 печ.л., 1,5 уч.-изд.л.
Тираж 290 экз. Бесплатно. Заказ № 92

*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.*