Краткие сообщения по физике № 5,6 — 1992 г.

УДК 535.8

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ГРУППЫ 0(4) ДЛЯ КЛАССИФИКАЦИИ СОСТОЯНИЙ МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ АТОМОВ И ИОНОВ

А.В. Виноградов, Д.Б. Саакян

Состояние атома предложено характеризовать не (как обычно) набором электронных оболочек $(1s)^{N_1}(2s)^{N_2}(2p)^{N_3}$ ... одноэлектронных орбиталей 1s, 2s, 2p ... самосогласованного центрального поля, а набором слоев $1^{N_1}2^{N_2}3^{N_3}$ ..., где орбитали 1, 2, 3 соответствуют состояниям водородоподобного иона с главными квантовыми числами n = 1, 2, 3 ... Приведена полная система термов для слоя с главным квантовым числом n = 2. Получены уравнения для определения генеалогических коэффициентов.

Большинство приближенных методов теории атома используют волновые функции, классифицируемые по представлениям группы вращения O_3. Такой подход позволяет сконструировать волновую функцию многоэлектронного атома, содержащего оболочки $(1s)^{N_1}(2s)^{N_2}(2p)^{N_3}$ одноэлектронных орбиталей 1s, 2s, 2p...

Однако, как отмечал В.А. Фок /1/, для ряда задач более естественным является разбиение электронов не на оболочки $(n_i l_i)^{N_i}$, а на слои, объединяющие все электроны с данным главным квантовым числом n: $1^{N_1}2^{N_2}3^{N_3}$... К таким задачам относится прежде всего теория многозарядных ионов, а также некоторые вопросы теории взаимодействия атома с рентгеновским излучением и высокоэнергетичными частицами, где главную роль играют внутренние атомные электроны. В этих случаях исходным приближением по существу является многоэлектронный атом, в котором нет межэлектронного взаимодействия, а имеется только взаимодействие атомных электронов с ядром. Такой атом описывается суперпозицией произведений водородных волновых функций, которые, как показал В.А. Фок /2/, обладают более высокой группой симметрии O_4, соответствующей вращению в 4-мерном пространстве. Отсюда естественно возникают задачи классификации волновых функций многоэлектронного атома по представлениям группы O_4. Этому вопросу и посвящена настоящая работа.

Представления группы O_4 характеризуются двумя квантовыми числами моментов (J_A, J_B) и их магнитными квантовыми числами (M_A, M_B) /3/.

В водородоподобном атоме волновая функция электрона с главным квантовым числом n преобразуется по представлению (k, k) группы O_4, где $k = (n-1)/2$. Математически задача сводится к разложению антисимметричного тензорного представления ранга N (соответствующего состоянию электронного слоя n^N) по неприводимым представлениям группы O_4. Задача решается стандартными методами теории групп /4/.

Будем обозначать термы следующим образом: $(J_A, J_B)_S$, где S — полный спин терма.

Для электронного слоя n^N при n = 2 получаем следующие термы:

$$N = 2,\ 2^2 \sim (1,1)_0,\ (0,0)_0,\ (0,1)_1,\ (1,0)_0;$$
$$N = 3,\ 2^3 \sim (1/2,1/2)_{3/2},\ (3/2,1/2)_{1/2},\ (1/2,3/2)_{1/2},\ (1/2,1/2)_{1/2};$$
$$N = 4,\ 2^4 \sim (0,0)_2,\ (1,1)_1.$$

Для N > 4 классификация термов совпадает со случаем $N_1 = 2n^2 - N = 8 - N$. Определим генеалогические коэффициенты для данной задачи.

Пусть $|k^{N-1}(J_{1a}J_{1b})_{S_1} M_{1a} M_{1b} S_1>$ является антисимметричной нормированной волновой функцией N—1 электронов. Потребуем, чтобы линейная комбинация волновых функций, соответствующих декартовому произведению представлений $(J_{1a}J_{1b})_{S_1}$ и $(k,k)_{1/2}$, была антисимметричной нормированной функцией координат N электронов.

$$|n^N(J_AJ_B)_S M_A M_B M_S> =$$
$$= \sum_{J_{1A} J_{1B} S_1} (k^{N-1}(J_{1A}J_{1B})_{S_1}\ n(k,k)_{1/2}||n^N(J_AJ_B)_S)\cdot|n^{N-1}(J_{1A}J_{1B})_{S_1}\ n(k,k), J_A, J_B>_S. \qquad (1)$$

Квантовые моменты J_{1A}, J_{1B}, S складываются с моментами k, k, 1/2 независимо от значений (J_A, J_B, S) как обычные моменты (представления) группы O_3.

Для системы двух электронов имеем следующие значения генеалогических коэффициентов

$$(n^2(J_A,J_B)_S||n(k,k)_{1/2},\ (k,k)_{1/2}) = [1+(-1)^{J_A+J_B+S}]/2. \qquad (2)$$

Применяя метод, использованный Рака для группы O_3 /5/, получим следующие уравнения для генеалогических коэффициентов:

$$\sum_{J_{1A} J_{1B} S_1} (-1)^{2J_{1A}+2J_{1B}+2S_1+1} [(2S_1+1)(2S_0+1)(2J_{1A}+1)(2J_{1B}+1)(2J_{0A}+1)(2J_{0B}+1)]^{1/2} \times$$

$$\times \begin{Bmatrix} S_2 & 1/2 & S_1 \\ S & 1/2 & S_0 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J_{2A} & k & J_{1A} \\ J_A & k & J_A \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J_{2B} & k & J_{1B} \\ J_B & k & J_B \end{Bmatrix} \times \tag{3}$$

$$\times (n^N (J_A, J_B)_S || n^{N-1} (J_{1A}, J_{1B})_{S_1}, n(k,k)_{1/2}) (n^{N-1} (J_{1A}, J_{1B})_{S_1} || n^{N-2} (J_{2A}, J_{2B})_{S_2}, n(k,k)_{1/2}) = 0.$$

Определим генеалогические коэффициенты также для случая, когда волновая функция остова (J_{1A}, J_{1B}) задается в суженном виде, как сумма представлений группы O_3 $[J_{1A}, J_{1B}]_{LS}$

$$|n^N [J_A, J_B]_{LS} M_L M_S> = \sum_{J_{1A} J_{1B} L_1 S_1 l} (n^N [J_A, J_B]_{LS} || n^{N-1} [J_{1A}, J_{1B}]_{L_1 S_1}, l) \times$$

$$\times |n^{N-1} [J_{1A}, J_{1B}]_{L_1 S_1}, l, M_L M_S>. \tag{4}$$

В формуле (4) складываются представления $L_1 l$ группы O_3. Генеалогические коэффициенты из (4) выражаются через генеалогические коэффициенты из (1) формулой:

$$\sum (n^N (J_A, J_B) || n^{N-1} (J_{1A}, J_{1B}), n(k,k)_{1/2} > \times$$

$$\times [J_{1A} k, J_A, J_{1B} k, J_B, L | J_{1A} J_{1B}, L_1, kk, l, L], \tag{5}$$

где выражения в квадратных скобках являются матрицей преобразования между разными схемами сложения четырех моментов /5/:

$$[(2J_0+1)(2J_B+1)(2L_1+1)(2l+1)]^{1/2} \begin{Bmatrix} J_{1A} & k & J_A \\ J_{1B} & k & J_B \\ L_1 & k & L \end{Bmatrix}. \tag{6}$$

В случае конфигурации $n > 2$ система равнений (3) может служить для определения возможных термов слоя. Если терм $[J_A, J_B]_S$ отсутствует, то система (3) будет противоречива, а если есть несколько термов $[J_A, J_B]_S$, то система (3) будет вырождена и тогда надо ортонормировать эти решения.

Авторы благодарят Л.А. Вайнштейна и Л.А. Шелепина за обсуждение работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Фок В.А. Начала квантовой механики, М., Наука, 1976.

2. Фок В.А. Изв. АН СССР, серия мат. и естественные науки, №2, 169 (1935).

3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика, М., Наука, 1974.

4. Хамермеш М. Теория групп и ее применения к физическим проблемам, М., Мир, 1966.

5. Юцис А.П., Бандзайтис А.А. Теория момента количества движения в квантовой механике, Вильнюс, изд. "Минтис", 1965.

Поступила в редакцию 16 марта 1992 г.