MARIA BASTER

Poprawka relatywistyczna do przekroju czynnego na rozpraszanie neutronów przez jon paramagnetyczny

WPROWADZENIE

W dotychczasowych pracach teoretycznych ([1] ... [19]) dotyczących przekroju czynnego na rozpraszanie neutronów jedynie Stassis [16] uwzględnił efekty relatywistyczne. Celem mojej pracy jest znalezienie postaci poprawki relatywistycznej do wzoru na przekrój czynny dla rozpraszania neutronów przez jon paramagnetyczny o dwóch niesparowanych, równoważnych elektronach, wyprowadzonego metodą Loveseya [15]. (W poprzedniej pracy wykazałam, że metoda ta jest wygodniejsza do obliczeń numerycznych od metody Stassisa).

ZAŁOŻENIA WSTĘPNE

Przyjmijmy ogólny wzór na przekrój czynny w pierwszym przybliżeniu Borna w postaci:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, dE'} = \left(\frac{M}{4\pi\hbar^2}\right)^2 \frac{k'}{k} \sum_{\lambda\chi} p_\lambda p_\chi \sum_{\lambda'\chi'} \left|\langle \lambda'\chi'\vec{k}'|V|\lambda\chi\vec{k}\rangle\right|^2 \delta(E_\lambda - E_{\lambda'} + \hbar\omega) \qquad (2.1)$$

gdzie

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2}{2M}(k^2 - k'^2) = E - E'$$

$$|\vec{k}\rangle = \exp(i\vec{k}\cdot\vec{r}_N)$$

$$|\vec{k}'\rangle = \exp(i\vec{k}'\cdot\vec{r}_N)$$

M - masa neutronu, $\vec{k}$, $\vec{k}'$ - wektor falowy padającego i rozproszonego neutronu, E, E' - energia początkowa i końcowa neutronu, λ, λ' - stan początkowy i końcowy jonu, χ, χ' - stan spinowy początkowy i końcowy neutronu, p_λ, p_χ - prawdopodobieństwo stanu λ i stanu χ, $\vec{r}_N$ promień wodzący neutronu, V potencjał oddziaływania magnetycznego neutronu z elektronami jonu. Funkcję falową $|\lambda\rangle$ niesparowanych elektronów jonu przyjmujemy w postaci:

$$|\lambda\rangle = \sum_M a_M |\psi_{JM}\rangle = \sum_{M,i} a_M c_i |JM\rangle \tag{2.2}$$

gdzie

a_M - współczynniki pola krystalicznego,

C_i - współczynniki sprzężenia pośredniego,

$|JM\rangle \equiv |SLJM\rangle$ funkcja falowa elektronów o liczbach kwantowych SLJM.

Potencjał oddziaływania V zapiszmy w postaci:

$$V = -\frac{1}{c}\int \vec{j}(\vec{r})\cdot\vec{A}_N(\vec{r})d\vec{r} \tag{2.3}$$

gdzie

$$\vec{j}(\vec{r}) = \vec{j}_c(\vec{r}) + \vec{j}_m(\vec{r})$$

$$\vec{j}_c(\vec{r}) = \sum_\nu \frac{1}{2} e_\nu \left[\vec{v}_\nu \delta(\vec{r}-\vec{r}_\nu) + \delta(\vec{r}-\vec{r}_\nu)\vec{v}_\nu \right]$$

$$\vec{j}_m(\vec{r}) = \sum_\nu \frac{\hbar e_\nu}{m_\nu} \nabla \times \left[\vec{s}_\nu \delta(\vec{r}-\vec{r}_\nu) \right]$$

$$\vec{v}_\nu = \frac{i}{\hbar}\left[\mathcal{H}, \vec{r}_\nu\right] = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_\nu}$$

$\mathcal{H}$ - hamiltonian elektronów jonu.

Można pokazać (patrz praca poprzednia [20]), że wzór (2.3) jest w granicy nierelatywistycznej równoważny rozważanemu przez Loveseya wzorowi

$$V = \vec{\mu}\cdot\vec{H} \tag{2.4}$$

gdzie

$$\vec{H} = \text{rot}\,\vec{A}$$

$$\vec{\mu} = -\gamma\mu\vec{\sigma}$$

$$\gamma = -1.91$$

$\vec{\mu}$ - moment magnetyczny cząstki o spinie 1/2,

$\vec{\sigma}$ - wektorowa macierz Pauliego,

$\vec{A}$ - potencjał wektorowy pola,w którym znajduje się cząstka.

Zapiszmy

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 \tag{2.5}$$

gdzie

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\nu} \frac{p_{\nu}^2}{2m} \qquad \mathcal{H}_1 = \sum_{\nu} \xi(r_{\nu})\vec{l}_{\nu}\vec{s}_{\nu} - \frac{p_{\nu}^4}{8m^3c^2}$$

$$\vec{v}_{0\nu} = \frac{\vec{p}_{\nu}}{m} \qquad v_{1\nu} = \frac{\partial \mathcal{H}_1}{\partial \vec{p}_{\nu}} \qquad \xi(r_{\nu}) = \frac{\hbar^2}{2m^2c^2r_{\nu}} \frac{dU}{dr_{\nu}}$$

U - centralnosymetryczne pole wytworzone przez jądro i zapełnione powłoki

Wtedy

$$\langle\lambda'\vec{k}'\chi'|V|\lambda\vec{k}\chi\rangle = \langle\lambda'\chi'|\frac{2\pi\hbar^2}{M} W\vec{\sigma}\cdot\vec{Q}|\lambda\chi\rangle = \tag{2.6}$$

$$= \langle\lambda'\chi'|\frac{2\pi\hbar^2}{M} W \sum_{q=\pm1,0} (-1)^q\sigma_{-q}Q_q|\lambda\chi\rangle$$

gdzie

$$W = \frac{\gamma e^2}{mc^2}$$

q - współrzędna sferyczna,

a po przekształceniach:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, dE'} = \frac{k'}{k} W^2 \sum_{\lambda} p_{\lambda} \sum_{\lambda'} \sum_{q} \left| \sum_{M,i} \sum_{M',i'} a^*_{M'} c^*_{i'} a_M c_i \langle J'M'|Q_q|JM\rangle \right|^2 \delta(E_{\lambda} - E_{\lambda'} + \hbar\omega) \tag{2.7}$$

Korzystając z komutatorów:

$$[\exp(i\vec{\varkappa}\vec{r}),\ (\hat{\varkappa}\times\nabla_\nu)] = 0$$

$$[\exp(i\vec{\varkappa}\vec{r}),\ (\hat{\varkappa}\times\nabla_\nu^2\nabla)] = \hat{\varkappa}\times[\varkappa^2\exp(i\vec{\varkappa}\vec{r}_\nu)\nabla - 2i\exp(i\vec{\varkappa}\vec{r}_\nu)(\vec{\varkappa}\cdot\nabla)\nabla] \tag{2.8}$$

element macierzowy $\langle J'M'|Qq|JM\rangle$ ze wzoru (2.7) możemy przedstawić w następującej postaci:

$$\begin{aligned}\langle J'M'|Q_q|JM\rangle &= \langle J'M'|Q_{1q}|JM\rangle + \langle J'M'|Q_{2q}|JM\rangle + \\ &+ \langle J'M'|R_{1q}|JM\rangle + \langle J'M'|R_{2q}|JM\rangle\end{aligned} \tag{2.9}$$

gdzie

$$\langle J'M'|Q_{1q}|JM\rangle = \langle J'M'|\sum_\nu[\exp(i\vec{\varkappa}\vec{r}_\nu)\hat{\varkappa}\times(\vec{s}_\nu\times\hat{\varkappa})]_q|JM\rangle$$

$$\langle J'M'|Q_{2q}|JM\rangle = \langle J'M'|\frac{i}{\varkappa}\sum_\nu\exp(i\vec{\varkappa}\vec{r}_\nu)(\hat{\varkappa}\times\nabla_\nu)_q|JM\rangle$$

$$\langle J'M'|R_{1q}|JM\rangle = \langle J'M'|\frac{im}{\hbar^2\varkappa}\sum_\nu\exp(i\vec{\varkappa}\vec{r}_\nu)[\hat{\varkappa}\times\xi(r_\nu)(\vec{s}_\nu\times\vec{r}_\nu)]_q|JM\rangle$$

$$\begin{aligned}\langle J'M'|R_{2q}|JM\rangle = \langle J'M'|\sum_\nu\Big\{\frac{\hbar^2}{2m^2c^2\varkappa}\exp(i\vec{\varkappa}\vec{r}_\nu)[\hat{\varkappa}\times\nabla_\nu^2\nabla_\nu]_q + \\ - \exp(i\vec{\varkappa}\vec{r}_\nu)[\hat{\varkappa}\times\varkappa^2\nabla_\nu]_q + 2i\exp(i\vec{\varkappa}\vec{r}_\nu)\vec{\varkappa}\nabla_\nu[\hat{\varkappa}\times\nabla_\nu]_q\Big\}|JM\rangle\end{aligned} \tag{2.10}$$

Dwa pierwsze składniki wzoru (2.9) dotyczą przybliżenia nierelatywistycznego i zostały rozpracowane w pracy Loveseya [15], dwa ostatnie stanowią poprawkę relatywistyczną i są przedmiotem tej pracy (w dalszych obliczeniach przyjmuję $\hbar = c = 1$).

Zauważmy, że we wzorach (2.10) mamy do czynienia z dwoma typami operatorów:

a. Wyrażenia Q_{1q} i R_{1q} zawierające obok innych operatorów operator spinu elektronu $\vec{s}_\vartheta$.

Przy wyliczaniu elementów macierzowych tych operatorów wygodnie jest wprowadzić mieszany tensor sferyczny $F^{K'}$ postaci:

$$F^{K'} = \sum_\vartheta [s_\vartheta \times Y^K]^{K'} \qquad (3.1)$$

o elementach

$$F^{K'}_{Q'} = \sum_\vartheta \sum_{q_1, Q''} s_{\vartheta q_1} Y_{KQ''}(\hat{r}_\vartheta) \langle 1 q_1 K Q'' | K' Q' \rangle \qquad (3.2)$$

gdzie

s_ϑ - tensor nieprzewiedlny rzędu 1 o elementach $s_{\vartheta q_1}$

Y^K - tensor nieprzewiedlny rzędu K o elementach $Y_{KQ''}(\hat{r}_\vartheta)$

Można udowodnić, że element zredukowany tensora $F^{K'}$ wyraża się wzorem:

$$[l^2 S' L' J' \| F^{K'} \| l^2 SLJ] = 2(-1)^{K+1+2l+2s} [s \| \vec{s} \| s][l \| Y^K \| l] \times$$

$$\times \{(2K'+1)(2J+1)(2S+1)(2S'+1)(2L+1)(2L'+1)\}^{\frac{1}{2}} \times$$

$$\times \begin{Bmatrix} S' & S & 1 \\ L' & L & K \\ J' & J & K' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} S & 1 & S' \\ s & s & s \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L & K & L' \\ l & l & l \end{Bmatrix} \qquad (3.3)$$

gdzie

$$[s \| \vec{s} \| s] = \sqrt{\frac{3}{2}}$$

$$[l \| Y^K \| l] = (-1)^l (2l+1) \left(\frac{2K+1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} l & K & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

b. Wyrażenia Q_{2q} i R_{2q} będące symetrycznymi, ze względu na przestawienie elektronów, operatorami postaci:

$$F = \sum_{\nu} f_{\nu} \tag{3.4}$$

gdzie wszystkie operatory f_{ν} działające na orbitalny stan ν-tego elektronu mają taką samą postać.

Elementy macierzowe tego typu operatorów dla przypadku dwóch równoważnych elektronów można wyznaczyć korzystając z wzorów:

$$|SLJM\rangle = \sum_{M_S M_L} \langle SM_S LM_L|JM\rangle |SM_S LM_L\rangle \tag{3.5}$$

$$|SM_S LM_L\rangle = 0, \qquad \text{gdy} \quad L+S \quad \text{nieparzyste}$$

$$|SM_S LM_L\rangle = \sum_{\substack{m_1 \\ m_2}} \sum_{\substack{m_{s1} \\ m_{s2}}} \langle lm_1\ lm_2|LM_L\rangle\langle sm_{s1} sm_{s2}|SM_S\rangle \times$$
$$\times |lm_1\rangle |lm_2\rangle |sm_{s1}\rangle |sm_{s2}\rangle$$

$$\text{gdy} \quad L+S \quad \text{parzyste} \tag{3.6}$$

oraz

$$\sum_{m_s m_{s1}} \langle sm_{s1}\ sm_s|SM_S\rangle\langle sm_{s1}\ sm_s|S'M'_S\rangle = \delta_{SS'}\delta_{M_S M'_S} \tag{3.7}$$

zapisać w postaci:

$$\langle J'M'\sum_{\nu} f_{\nu}|JM\rangle = 2\sum_{\substack{M_S M_L \\ M'_S M'_L}} \sum_{\substack{mm_1 \\ m'}} \langle S'M'_S L'M'_L|J'M'\rangle\langle S M_S LM_L|JM\rangle \times$$

$$\times \langle lm_1 lm'|L'M'_L\rangle\langle lm_1 lm|LM_L\rangle \sum_{\substack{m_s \\ m_{s1}}} \langle sm_{s1}\ sm_s|SM_S\rangle \times$$

$$\times \langle sm_{s1}\ sm_s|S'M'_S\rangle\langle lm'|f|lm\rangle \tag{3.8}$$

ELEMENT MACIERZOWY $\langle J'M'|R_{1q}|JM\rangle$

Z wzoru (2.10) mamy:

$$\langle J'M'|R_{1q}|JM\rangle = \langle J'M'\ \frac{im}{\varkappa}\sum_{\nu}\xi(r_\nu)\exp(i\vec{\varkappa}\vec{r}_\nu)\ x$$

$$x\left[s_{\nu q}\sum_{q_1}(-1)^{q_1}\varkappa_{-q_1}r_{\nu q_1} - r_{\nu q}\sum_{q_1}(-1)^{q_1}\varkappa_{-q_1}s_{\nu q_1}\right]|JM\rangle \tag{4.1}$$

Policzmy pierwszy składnik sumy (4.1):

$$\langle J'M'|\frac{im}{\varkappa}\sum_{\nu}\xi(r_\nu)\exp(i\vec{\varkappa}\vec{r}_\nu)\ s_{\nu q}\sum_{q_1}(-1)^{q_1}\varkappa_{-q_1}\ r_{\nu q_1}|JM\rangle =$$

$$=\langle J'M'|\frac{(4\pi)^2 m}{3}\sum_{\substack{K''Q''\\ \nu}} i^{K''+1}\xi(r_\nu)j_{K''}(\varkappa r_\nu)r_\nu s_{\nu q}\ Y_{K''Q''}(\hat{r}_\nu)\ Y^*_{K''Q''}(\hat{\varkappa})\ x$$

$$x\sum_{q_1}(-1)^{q_1}\ Y_{1,-q_1}(\hat{\varkappa})\,Y_{1,q_1}(\hat{r}_\nu)|JM\rangle = \ldots \tag{4.2}$$

$j_{K''}(X)$ funkcja sferyczna Bessela $Y_{K''Q''}$ funkcja sferyczna harmoniczna

Stosując wzór:

$$Y_{K_1Q_1}(\hat{\varkappa})\ Y_{K_2Q_2}(\hat{\varkappa}) = \sum_{K'Q'}\left\{\frac{(2K_1+1)(2K_2+1)(2K'+1)}{4\pi}\right\}^{\frac{1}{2}} Y_{K'Q'}(\hat{\varkappa})\ x$$

$$x\begin{pmatrix} K_1 & K_2 & K' \\ Q_1 & Q_2 & Q' \end{pmatrix}\begin{pmatrix} K_1 & K_2 & K' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

mamy

$$\ldots = \langle J'M'|\frac{4\pi m}{3}\sum_{\substack{K''Q''\\ \nu\, q_1}}\ \sum_{\substack{KQ\\ K'Q'}} i^{K''+1}\ \xi(r_\nu)j_{K''}(\varkappa r_\nu)(-1)^{q_1+Q'+Q''}\ r_\nu s_{\nu q}\ x$$

$$x\left\{(2K''+1)(2+1)(2K+1)\right\}^{\frac{1}{2}}\ Y^*_{KQ}\ (\hat{\varkappa})\begin{pmatrix} K'' & 1 & K \\ -Q' & -q_1 & Q \end{pmatrix}\begin{pmatrix} K'' & 1 & K \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}x$$

$$x \cdot \left\{(2K''+1)(2+1)(2K'+1)\right\}^{\frac{1}{2}} Y_{K'Q'}(\hat{r}_\nu) \begin{pmatrix} K'' & 1 & K' \\ Q'' & q_1 & -Q' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K'' & 1 & K' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} |JM\rangle = \ldots \tag{4.3}$$

Zapiszmy

$$\langle K_1Q_1JM | J'M'\rangle C'(K'K_1K'') \overset{\text{ozn}}{=} \frac{4\pi m}{3} \sum_{\substack{\nu q_0 \\ Q_0}} \langle 1q_0K'Q_0|K_1Q_1\rangle \; x$$

$$x\langle J'M'|\xi(r_\nu)\, j_{K''}(\varkappa r_\nu) r_\nu\, s_{\nu q_0} Y_{K'Q_0}(\hat{r}_\nu)\, | JM\rangle \tag{4.4}$$

oraz

$$\sum_{K_1Q_1} \langle 1qK'Q'|K_1Q_1\rangle\langle 1q_0K'Q_0|K_1Q_1\rangle = \delta_{qq_0}\delta_{Q'Q_0} \tag{4.5}$$

wtedy

$$\ldots = \sum_{\substack{K''Q'' \\ q_1}} \sum_{\substack{KQ \\ K'Q'}} \sum_{K_1Q_1} i^{K''+1} (-1)^{q_1+Q'+Q''}\, 3(2K''+1)\left\{(2K+1)(2K'+1)\right\}^{\frac{1}{2}} \; x$$

$$x\; C'(K'K_1K'') \langle K_1Q_1JM | J'M'\rangle\langle 1qK'Q'|K_1Q_1\rangle \; Y^*_{KQ}(\hat{\varkappa}) \; x$$

$$x \begin{pmatrix} K'' & 1 & K \\ -Q'' & -q_1 & Q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K'' & 1 & K \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K'' & 1 & K' \\ Q'' & q_1 & -Q' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K'' & 1 & K' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{4.6}$$

W celu wyliczenia jawnej postaci $C'(K'K_1\, K'')$ wprowadzamy tensor nieprzywiedlny rzędu K_1

$$F^{K_1} = \sum_{\nu} \left[s_\nu \times Y^{K'}\right]^{K_1} \tag{4.7}$$

o następujących elementach

$$F^{K_1}_{Q_1} = \sum_{\nu} \sum_{q_0Q_0} s_{\nu q_0}\, Y_{K'Q_0}(\hat{r}_\nu) \langle 1q_0K'Q_0|K_1Q_1\rangle \tag{4.8}$$

wtedy wzór (4.4) przyjmuje postać

$$\langle K_1Q_1JM|J'M'\rangle C'(K'K_1K'') = \frac{4m}{3}\langle \xi j_{K''}\rangle\langle J'M'|F^{K_1}_{Q_1}|JM\rangle \tag{4.9}$$

gdzie

$$\langle \xi j_{K''} \rangle = \int_0^\infty \xi(r) r j_{K''}(\varkappa r) \, |f(r)|^2 dr \qquad (4.10)$$

Stosując twierdzenie Eckarta-Wignera mamy

$$\langle K_1 Q_1 JM | J' M' \rangle C'(K' K_1 K'') = \frac{4\pi m}{3} (-1)^{K_1 - J + J'} (2J'+1)^{-\frac{1}{2}} \times$$

$$\times \langle \xi j_{K''} \rangle \langle K_1 Q_1 JM | J' M' \rangle \left[\gamma J' \| F^{K_1} \| \gamma J \right] \qquad (4.11)$$

Wstawiając wzór (3.3) na element zredukowany otrzymujemy

$$C'(K' K_1 \; K'') = \left(\frac{8\pi}{3}\right)^{\frac{1}{2}} m(-1)^{K_1 - J + J' + K' + 1 + 3l + 2s} \langle \xi j_{K''} \rangle \times$$

$$\times (2J'+1)^{-\frac{1}{2}} (2l+1) \{(2K'+1)(2K_1+1)(2J+1)(2S+1)(2S'+1)(2L+1)(2L'+1)\}^{\frac{1}{2}} \times$$

$$\times \begin{Bmatrix} S' & S & 1 \\ L' & L & K' \\ J' & J & K_1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} S & 1 & S' \\ s & s & s \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L & K' & L' \\ l & l & l \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} l & K' & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad (4.12)$$

Analogicznie liczymy drugi składnik sumy we wzorze (4.1)

$$\langle J' M' | \frac{-im}{\varkappa} \sum_{\nu} \xi(r_\nu) \exp(i \vec{\varkappa} \vec{r}_\nu) r_{\nu q} \sum_{q_1} (-1)^{q_1} \varkappa_{-q_1} s_{\nu q_1} | JM \rangle =$$

$$= \langle J' M' | \frac{-im4\pi}{3} \sum_{\nu} \xi(r_\nu) \exp(i \vec{\varkappa} \vec{r}_\nu) r_\nu \; Y_{1q}(\hat{r}_\nu) \sum_{q_1} (-1)^{q_1} Y_{1,-q_1}(\hat{\varkappa}) s_{\nu q_1} | JM \rangle =$$

$$= \langle J' M' | \frac{4\pi m}{3} \sum_{\substack{K''Q'' \\ \nu \, q_1}} \sum_{\substack{KQ \\ K'Q'}} i^{K''+1} \xi(r_\nu) \, j_{K''}(\varkappa r_\nu) r_\nu \{(2+1)(2K''+1)(2K'+1)\}^{\frac{1}{2}} \times$$

$$\times \; (-1)^{q_1 + 1 + Q'' + Q'} \{(2K''+1)(2+1)(2K+1)\}^{\frac{1}{2}} Y_{K' Q'}(\hat{r}_\nu) \; Y^*_{K Q}(\hat{\varkappa}) s_{\nu q_1} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} 1 & K'' & K' \\ q & Q'' & -Q' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & K'' & K' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K'' & 1 & K \\ -Q'' & -q_1 & Q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K'' & 1 & K \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} |JM\rangle = \ldots \qquad (4.13)$$

wtedy

$$\langle K_1Q_1JM|J'M'\rangle\, C'(K'K_1K'') = \frac{4\pi m}{3} \sum_{\substack{\vartheta q_0\\ Q_0}} \langle 1 q_0 K' Q_0 | K_1 Q_1\rangle \times$$

$$\times \langle J'M'|\xi(r_\vartheta)\, j_{K''}(\varkappa r_\vartheta)\, r_\vartheta\, s_{\vartheta q_0}\, Y_{K'Q_0}(\hat{r}_\vartheta)\, |JM\rangle \qquad (4.14)$$

$$\ldots = \sum_{\substack{K''Q''\\ q_1}} \sum_{\substack{KQ\\ K'Q'}} i^{K''+1} (-1)^{q_1+1+Q''+Q'}\, C'(K'K_1K'') \langle K_1Q_1JM|J'M'\rangle \times$$

$$\times \langle 1q_1K'Q'|K_1Q_1\rangle\, 3(2K''+1)\, \{(2K'+1)(2K+1)\}^{\frac{1}{2}}\, Y^*_{KQ}(\hat{\varkappa}) \times$$

$$\times \begin{pmatrix} 1 & K'' & K' \\ q & Q'' & Q' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & K'' & K' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K'' & 1 & K \\ -Q'' & -q_1 & Q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K'' & 1 & K \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad (4.15)$$

gdzie $C'(K'K_1\ K'')$ ma postać (4.12)

ELEMENT MACIERZOWY $\langle J'M'|R_{2q}|JM\rangle$

Policzmy teraz element macierzowy operatora R_{2q} ze wzoru (2.10):

$$\langle J'M'|R_{2q}|JM\rangle = \langle J'M' \sum_\vartheta \exp(i\vec{\varkappa}\vec{r}_\vartheta) \{-\varkappa^2 [\hat{\varkappa} \times \nabla_\vartheta]_q +$$

$$+ \frac{1}{2m^2\varkappa} [\hat{\varkappa} \times \nabla_\vartheta^2 \nabla_\vartheta]_q + 2i(\vec{\varkappa}\cdot\nabla_\vartheta)[\hat{\varkappa} \times \nabla_\vartheta]_q\}|JM\rangle \qquad (5.1)$$

Na podstawie wzoru (3.8):

$$\langle J'M'R_{2q}|JM\rangle = 2 \sum_{\substack{M_SM_L\\ M'_SM'_L}} \sum_{\substack{mm_1\\ m'}} \langle S'M'_SL'M'_L|J'M'\rangle \langle SM_SLM_L|JM\rangle \times$$

$$\times \langle lm_1\ lm'|L'M'_L\rangle \langle lm_1\ lm|LM_L\rangle \sum \langle s\ m_{s1}\ sm_s|SM_S\rangle \times$$

$$x \langle sm_{s1}\ sm_s | S' M_S' \rangle \left[\varkappa^2 \langle lm' | f_1 | lm \rangle + \frac{1}{2m^2\varkappa} \langle lm' | f_2 | lm \rangle + \right.$$

$$\left. + 2i \langle lm' | f_3 | lm \rangle \right] \tag{5.2}$$

gdzie

$$f_1 = \exp(i\vec{\varkappa}\cdot\vec{r})(\hat{\varkappa}\times\nabla)_q$$

$$f_2 = \exp(i\vec{\varkappa}\cdot\vec{r})[\hat{\varkappa}\times\nabla^2\nabla]_q$$

$$f_3 = \exp(i\vec{\varkappa}\cdot\vec{r})(\hat{\varkappa}\cdot\nabla)[\hat{\varkappa}\times\nabla]_q \tag{5.3}$$

Liczę element jednoelektronowy $\langle lm' | f_1 | lm \rangle$

$$f_1 = \exp(i\vec{\varkappa}\vec{r})(\hat{\varkappa}\times\nabla) = -4\pi\sqrt{2}\sum_{KQ} i^{K+1} \sum_{q_1} \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{\frac{1}{2}} Y^*_{KQ}(\hat{\varkappa})\, Y_{1q_1}(\hat{\varkappa})\ x$$

$$x \sum_{q_2} j_K(\varkappa r)\, Y_{KQ}(\hat{r})\, \nabla_{q_2} \langle 1q_1\, 1q_2 | 1\, q \rangle \tag{5.4}$$

Stosując wzór

$$Y_{K_1Q_1}(\hat{\varkappa})\, Y_{K_2Q_2}(\hat{\varkappa}) = \sum_{K'Q'} \left\{ \frac{(2K_1+1)(2K_2+1)(2K'+1)}{4\pi} \right\}^{\frac{1}{2}} Y^*_{K'Q'}(\hat{\varkappa})\ x$$

$$x \begin{pmatrix} K_1 & K_2 & K' \\ Q_1 & Q_2 & Q' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K_1 & K_2 & K' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} . \tag{5.5}$$

oraz

$$\sum_{q_1} (-1)^{l_1+l_2+\mu_2+\mu_2} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & q_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & j_3 \\ \mu_1 & -\mu_2 & q_1 \end{pmatrix} =$$

$$= \sum_{K''Q''} (-1)^{K''+Q''} (2K''+1) \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & K'' \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & j_2 & K'' \\ -\mu_1 & m_2 & Q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & l_2 & K'' \\ m_1 & 2 & -Q'' \end{pmatrix}$$

(5.6)

otrzymujemy

$$f_1 = \exp(i\vec{\varkappa}\vec{r})(\hat{\varkappa}\times\nabla)_q = -4\pi\sqrt{2}\sum_{K\,K'\,K''} i^{K+1}\left\{(2K+1)(2K'+1)(2K''+1)\right\}^{\frac{1}{2}} \times$$

$$\times \sum_{Q'Q''} Y_{K'Q'}(\hat{\varkappa}) \sum_{Qq'} j_K(\varkappa r)\, Y_{KQ}(\hat{r})\,\nabla_{q'} \langle KQ1q'|K''Q''\rangle\langle K'Q'K''Q''|1q\rangle \times$$

$$\times \begin{Bmatrix} K & 1 & K' \\ 1 & K'' & 1 \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} K & 1 & K' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad (5.7)$$

Liczymy:

$$\langle lm'|j_K(\varkappa r)\sum_{Qq'} Y_{KQ}(\hat{r})\nabla_{q'}\langle KQ\,1q'|K''Q''\rangle|lm\rangle = \ldots \qquad (5.8)$$

Wstawiając

$$|lm\rangle = f(r)\, Y_{lm}(\hat{r}) \qquad (5.9)$$

oraz stosując następujące wzory i oznaczenia

$$\nabla_q\left\{f(r)\, Y_{lm}(\hat{r})\right. = -(l+1)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{d}{dr} - \frac{l}{r}\right)f(r)\sum_{Q_1}(-1)^q\, Y_{l+1,Q_1}(\hat{r})\,(-1)^{l+m} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} l+1 & 1 & l \\ Q_1 & - & -m \end{pmatrix} + l^{\frac{1}{2}}\left(\frac{d}{dr} + \frac{l+1}{r}\right)f(r)\sum_{Q_1}(-1)^q\, Y_{l-1,Q_1}(\hat{r})(-1)^{l+m} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} l-1 & l & l \\ Q_1 & -q & -m \end{pmatrix} \qquad (5.10)$$

$$\int Y^*_{lm}(\hat{r})\, Y_{KQ}(\hat{r})\, Y_{l'm'}(\hat{r})\, d\hat{r} = (-1)^m\left\{\frac{(2l+1)(2K+1)(2l'+1)}{4\pi}\right\}^{\frac{1}{2}}$$

$$\times \begin{pmatrix} l & K & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} l & K & l' \\ -m & Q & m' \end{pmatrix} \qquad (5.11)$$

$$\begin{aligned} j_{K-1} + j_{K+1} &= \frac{2K+1}{z}\, j_K \\ j_K &= \frac{K-1}{z}\, j_{K-1} - \frac{d}{dz}\, j_{K-1} \end{aligned} \qquad (5.12)$$

gdzie

$$\frac{d}{dz} j_K = \frac{k}{z} j_K - j_{K+1} = \frac{K}{2K+1} j_{K-1} - \frac{K+1}{2K+1} j_{K+1}$$

$$z = \varkappa r$$

otrzymujemy

$$\ldots = \frac{\varkappa}{2} \left\{ \frac{(2l+1)(2K''+1)}{4\pi(2K+1)} \right\}^{\frac{1}{2}} \langle K''Q'' lm | lm' \rangle \times$$

$$\times \left\{ [(2l+1-K)A(K,K'',l)-(2l+1+K)B(K,K'',l)] \langle j_{K+1} \rangle + \right.$$

$$\left. + [(2l+2+K)A(K,K'',l)-(2l-K)B(K,K'',l)] \langle j_{K-1} \rangle \right. \qquad (5.13)$$

gdzie

$$A(K,K'',l) \overset{ozn}{=} (2l+3) \begin{pmatrix} l & 1 & l+1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & K & l+1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} K'' & 1 & K \\ l+1 & l & l \end{Bmatrix}$$

$$B(K,K'',l) \overset{ozn}{=} (2l-1) \begin{pmatrix} l & 1 & l-1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & K & l-1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} K'' & 1 & K \\ l-1 & l & l \end{Bmatrix} \qquad (5.14)$$

$$\langle j_K \rangle = \int_0^\infty r^2 |f(r)|^2 j_K(\varkappa r) dr$$

Wtedy

$$\langle lm' | f_1 | lm \rangle = \langle lm' | \exp(i\vec{\varkappa}\vec{r})(\vec{\varkappa} \times \nabla)_q | lm \rangle =$$

$$= \varkappa \sum_{K K' K''} i^{K+1} C(K\,K'\,K'') \sum_{Q'Q''} Y_{K'Q'}(\hat{\varkappa}) \langle K''Q'' lm | lm' \rangle \langle K'Q' K''Q'' | 1q \rangle \qquad (5.15)$$

gdzie

$$C(K\,K'\,K'') \overset{ozn}{=} \sqrt{2\pi}\,(2K'+1)^{\frac{1}{2}} (2K''+1)(2l+1)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} K & 1 & K' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} K & 1 & K' \\ 1 & K'' & 1 \end{Bmatrix} \times$$

$$\times \left\{[(2l+1-K)A(KK''1)-(2l+1+K)B(KK''1)]\langle j_{K+1}\rangle + \right.$$

$$\left. + \; [(2l+2+K)A(KK''1)-(2l-K)B(KK''1)]\langle j_{K-1}\rangle \right. \tag{5.16}$$

Przekształcając podobnie jak operator f_1 operatory f_2 i f_3 oraz wykorzystując wzór (5.15) można zapisać wzór (5.2) w następującej postaci:

$$\langle J'M'|R_{2q}|JM\rangle = -4\pi\sqrt{2}\sum_{\substack{M_S,M_L\\ M_S' \; M_L'}} \; \sum_{\substack{m\; m_1\\ m'}} \langle SM_S LM_L|JM\rangle\langle S'M_S'L'M_L'|J'M'\rangle \times$$

$$\times \langle lm_1 lm'|LM_L\rangle\langle lm_1 lm|L'M_L'\rangle\, \delta_{SS'}\,\delta_{M_S M_S'}\sum_{KK'K''} i^{K+1}\{(2K'+1)(2K''+1)\}^{\frac{1}{2}} \times$$

$$\times \begin{Bmatrix} K & 1 & K' \\ 1 & K'' & 1 \end{Bmatrix}\begin{pmatrix} K & 1 & K' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\sum_{Q'Q''} Y_{K'Q'}(\hat{\varkappa})\sum_{Qq'}\langle K'Q'K''Q''|1q\rangle \times$$

$$\times \left[-\frac{1}{4\sqrt{\pi}}\varkappa^3(2l+1)^{\frac{1}{2}}\left\{[(2l+1-K)A(KK''1)-(2l+1+K)B(KK''1)]\langle j_{K+1}\rangle + \right.\right.$$

$$\left. + [(2l+2+K)A(KK''1)-(2l-K)B(KK''1)]\langle j_{K-1}\rangle\right\} +$$

$$+ \frac{1}{m^2\varkappa}\langle KQ\,1q'|K''Q''\rangle(2K+1)^{\frac{1}{2}}\langle lm'|j_K(\varkappa r)\,Y_{KQ}(\hat{r})\;\nabla^2\nabla_{q'}\,|\,lm\rangle +$$

$$\left. + \; 2i\langle KQ1q'|K''Q''\rangle(2K+1)^{\frac{1}{2}}\langle lm'|j_K(\varkappa r)\,Y_{KQ}(\hat{r})\sum_{q''}(-1)^{q''}\varkappa_{-q''}\nabla_{q''}\nabla_{q'}|lm\rangle\right] \tag{5.17}$$

gdzie oznaczenia A (K K$''$1), B (K K$''$1), $\langle j_K\rangle$ zgodne są z wzorami (5.14)
Pozostają więc do wyliczenia dwa elementy macierzowe:

$$\langle lm'\; j_K(\varkappa r)\; Y_{KQ}(\hat{r})\,\nabla^2\nabla_{q'}\,|\,lm\rangle \tag{5.18}$$

oraz

$$\langle lm'|j_K(\varkappa r)\;\; Y_{KQ}(\hat{r})\sum_{q''}(-1)^{q''}\varkappa_{-q''}\,\nabla_{q''}\nabla_{q'}\,|\;lm\rangle \tag{5.19}$$

Stosując wzór (5.10) otrzymamy

$$\nabla^2 \nabla_{q'}\{f(r)Y_{lm}(\hat{r})\} = -(l+1)^{\frac{1}{2}} \Big\{\nabla_r^2 \Big[\Big(\frac{d}{dr} - \frac{l}{r}\Big)f(r)\Big]\sum_{Q_1}(-1)^{q'} Y_{l+1,Q_1}(\hat{r}) +$$

$$+ \frac{1}{r^2}\Big(\frac{d}{dr} - \frac{l}{r}\Big)f(r)\sum_{Q_1}(-1)^{q'}\nabla_\Omega^2 Y_{l+1,Q_1}(\hat{r})\Big\}(-1)^{l+m}\begin{pmatrix} l+1 & 1 & l \\ Q_1 & -q' & -m \end{pmatrix} +$$

$$+ l^{\frac{1}{2}}\Big\{\nabla_r^2 \Big[\Big(\frac{d}{dr} + \frac{l+1}{r}\Big)f(r)\Big]\sum_{Q_1}(-1)^{q'} Y_{l-1,Q_1}(\hat{r}) +$$

$$+ \frac{1}{r^2}\Big(\frac{d}{dr} + \frac{l+1}{r}\Big)f(r)\sum_{Q_1}(-1)^{q'}\nabla_\Omega^2 Y_{l-1,Q_1}(\hat{r})\Big\}(-1)^{l+m}\begin{pmatrix} l-1 & 1 & l \\ Q_1 & -q' & -m \end{pmatrix} \tag{5.20}$$

gdzie

$$\nabla^2 = \nabla_r^2 + \frac{1}{r^2}\nabla_\Omega^2$$

$$\nabla_r^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\Big\{r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big\} \tag{5.21}$$

$$\nabla_\Omega^2 = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big\{\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Big\} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

Zauważmy, że część kątową laplasjanu ∇_Ω^2 można wyrazić poprzez operator orbitalnego momentu pędu:

$$\nabla_\Omega^2 = -\vec{L}^2 \tag{5.22}$$

Wtedy

$$\nabla^2\nabla_{q'}\{f(r)\,Y_{lm}(\hat{r})\} = \Big[-(l+1)^{\frac{1}{2}}\,\nabla_r^2\Big(\frac{d}{dr} - \frac{l}{r}\Big)f(r) +$$

$$+(l+1)^{3/2}\,(l+2)\,\frac{1}{r^2}\Big(\frac{d}{dr} - \frac{l}{r}\Big)f(r)\Big]\sum_{Q_1}(-1)^{q'+l+m}\,Y_{l+1,Q_1}(\hat{r})\begin{pmatrix} l+1 & 1 & l \\ Q_1 & -q' & -m \end{pmatrix} +$$

$$+\Big[l^{\frac{1}{2}}\,\nabla_r^2\Big(\frac{d}{dr} + \frac{l+1}{r}\Big)f(r) - (l-1)l^{3/2}\,\frac{1}{r^2}\Big(\frac{d}{dr} + \frac{l+1}{r}\Big)f(r)\sum_{Q_1}(-1)^{q'+l+m}\ \times$$

$$\times\, Y_{l-1,Q_1}(\hat{r})\begin{pmatrix} l-1 & 1 & l \\ Q_1 & -q' & -m \end{pmatrix} \tag{5.23}$$

Stąd

$$\langle lm'|\, j_K(\varkappa r)\, Y_{KQ}(\hat{r})\, \nabla^2 \nabla_{q'} |lm\rangle =$$

$$= [-(l+1)^{\frac{1}{2}} \langle S_1(-1)\rangle + (l+1)^{3/2}(l+2) \langle S_2(-1)\rangle] \sum_{Q_1} \langle (lm')(KQ)(l+1,Q_1)(lm)\rangle \times$$

$$\times \begin{pmatrix} l+1 & 1 & l \\ Q_1 & -q' & -m \end{pmatrix} +$$

$$+ [l^{\frac{1}{2}} \langle S_1(l+1)\rangle - (l-1)l^{3/2} \langle S_2(l+1)\rangle] \sum_{Q_1} \langle (lm')(KQ)(l-1,Q_1)(lm)\rangle \times$$

$$\times \begin{pmatrix} l-1 & 1 & l \\ Q_1 & -q' & -m \end{pmatrix} \qquad (5.24)$$

gdzie

$$\langle S_1(\alpha)\rangle = \int f^*(r)\, j_K(\varkappa r)\, \nabla_r^2 \left(\frac{d}{dr} + \frac{\alpha}{r}\right) f(r)\,dr$$

$$\langle S_2(\alpha)\rangle = \int f^*(r)\, \frac{1}{r^2}\, j_K(\varkappa r) \left(\frac{d}{dr} + \frac{\alpha}{r}\right) f(r)\,dr$$

$$\langle (lm')(KQ)(l+1,Q_1)(lm)\rangle = \int Y^*_{lm'}(\hat{r})\, Y_{KQ}(\hat{r})\, Y_{l-1,Q_1}(\hat{r})\, Y_{lm}(\hat{r})\,d\hat{r} \qquad (5.25)$$

Stosując wzory (5.5) i (5.11) oraz własności ortogonalności funkcji sferycznych otrzymamy

$$\langle lm'|j_K(\varkappa r)\; Y_{KQ}(\hat{r})\, \nabla^2 \nabla_{q'} |lm\rangle =$$

$$= \frac{1}{4\pi} \sum_{Q_1 K_2 Q_2} (-1)^{Q_2} (2K_2+1)(2l+1)(2K+1)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} l & K_2 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & K_2 & l \\ -m' & -Q_2 & m \end{pmatrix} \times$$

$$\{[-(l+1)^{\frac{1}{2}} \langle S_1(-1) + (l+1)^{3/2}(l+2)\;\; S_2(-1)\rangle](2l+3)^{\frac{1}{2}} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} K & l+1 & K_2 \\ Q & Q_1 & Q_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K & l+1 & K_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l+1 & 1 & l \\ Q_1 & -q' & -m \end{pmatrix} +$$

$$+ [l^{\frac{1}{2}} \langle S_1(l+1)\rangle - (l-1)l^{3/2} \langle S_2(l+1)\rangle]\,(2l-1)^{\frac{1}{2}} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} K & l-1 & K_2 \\ Q & Q_1 & Q_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K & l-1 & K_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l-1 & 1 & l \\ Q_1 & -q' & -m \end{pmatrix} \qquad (5.26)$$

Liczymy:

$$\langle lm' | j_K(\varkappa r)\, Y_{KQ}(\hat{r}) \sum_{q''} (-1)^{q''} \varkappa_{-q''} \nabla_{q''} \nabla_{q'} | lm \rangle$$

Zapiszmy

$$\nabla = \frac{\vec{r}}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \nabla_{\Omega} \tag{5.27}$$

Wtedy

$$\nabla_{q''} = \frac{r_{q''}}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \nabla_{\Omega q''}$$

gdzie

$$\nabla_{\Omega} = -i \frac{\vec{r}}{r} \times \vec{L} = \frac{1}{r} \begin{vmatrix} \hat{e}_{+1} & \hat{e}_0 & \hat{e}_{-1} \\ r_{+1} & r_0 & r_{-1} \\ L_{+1} & L_0 & L_{-1} \end{vmatrix} = \hat{e}_{+1} \frac{1}{r} (r_0 L_{-1} - r_{-1} L_0) + \hat{e}_0 \frac{1}{r} (r_{-1} L_{+1} - r_{+1} L_{-1}) + \hat{e}_{-1} \frac{1}{r} (r_{+1} L_0 - r_0 L_{+1}) \tag{5.28}$$

$\hat{e}_{+1}$, $\hat{e}_0$, $\hat{e}_{-1}$ - jednostkowe wektory sferyczne,

$\vec{L}$ - operator krętu.

Stosując wzór (5.10) otrzymujemy

$$\nabla_{q''}\nabla_{q'} \left\{ f(r) Y_{lm}(\hat{r}) \right\} = -(l+1)^{\frac{1}{2}} \frac{r_{q''}}{r} \frac{d}{dr} \left[\left(\frac{d}{dr} - \frac{l}{r} \right) f(r) \right] \sum_{Q_1} (-1)^{q+l+m}\, Y_{l+1,Q_1}(\hat{r}) \times$$

$$\times \begin{pmatrix} l+1 & 1 & l \\ Q_1 & -q & -m \end{pmatrix} + l^{\frac{1}{2}} \frac{r_{q''}}{r} \frac{d}{dr} \left[\left(\frac{d}{dr} - \frac{l}{r} \right) f(r) \right] \sum_{Q_1} (-1)^{q+l+m}\, Y_{l-1,Q_1}(\hat{r}) \begin{pmatrix} l-1 & 1 & l \\ Q_1 & -q & -m \end{pmatrix}$$

$$- (l+1)^{\frac{1}{2}} \frac{r_{q''}}{r^2} \left(\frac{d}{dr} - \frac{l}{r} \right) f(r) \sum_{Q_1} (-1)^{q+l+m}\, \nabla_{\Omega q''} Y_{l+1,Q_1}(\hat{r}) \begin{pmatrix} l+1 & 1 & l \\ Q_1 & -q & -m \end{pmatrix} +$$

$$+ l^{\frac{1}{2}} \frac{r_{q''}}{r^2} \left(\frac{d}{dr} - \frac{l}{r} \right) f(r) \sum_{Q_1} (-1)^{q+l+m}\, \nabla_{\Omega q''} Y_{l-1,Q_1}(\hat{r}) \begin{pmatrix} l-1 & 1 & l \\ Q_1 & -q & -m \end{pmatrix} \tag{5.29}$$

A więc

$$\langle lm'|j_K(\varkappa r)\,Y_{KQ}(\hat{r})\sum_{q''}(-1)^{q''}\varkappa_{-q''}\nabla_{q''}\nabla_{q'}|lm\rangle =$$

$$= \frac{4\pi}{3}\varkappa r\sum_{q'}(-1)^{q'}Y_{1,-q'}(\hat{\varkappa})\sum_{Q_1}(-1)^{q+l+m}\Big\{\langle S_3\rangle\Big[-(l+1)^{\frac{1}{2}}\begin{pmatrix} l+1 & 1 & l\\ Q_1 & -q & -m\end{pmatrix}\times$$

$$\times\langle(lm')(KQ)(1q'')(l+1,Q_1)\rangle + l^{\frac{1}{2}}\begin{pmatrix} l-1 & 1 & l\\ Q_1 & -q & -m\end{pmatrix}\langle(lm')(KQ)(1q'')(l-1,Q_1)\rangle\Big]+$$

$$+\langle S_4\rangle\Big[-(l+1)^{\frac{1}{2}}\begin{pmatrix} l+1 & 1 & l\\ Q_1 & -q & -m\end{pmatrix}\langle(lm')(KQ)(1q'')\nabla_{\Omega q''}(l+1,Q_1)\rangle+$$

$$+ l^{\frac{1}{2}}\begin{pmatrix} l-1 & 1 & l\\ Q_1 & -q & -m\end{pmatrix}\langle(lm')(KQ)(1q'')\nabla_{\Omega q''}(l-1,Q_1)\rangle\Big] \qquad (5.30)$$

$$\langle S_3\rangle = \int f^*(r)j_K(\varkappa r)\Big[\Big(\frac{d}{dr}-\frac{l}{r}\Big)f(r)\Big]dr$$

$$\langle S_4\rangle = \int f^*(r)j_K(\varkappa r)\frac{1}{r}\Big(\frac{d}{dr}-\frac{l}{r}\Big)f(r)dr$$

$$\langle(lm')(KQ)(1q'')(l-1,Q_1)\rangle = \int Y^*_{lm'}(\hat{r})\;Y_{KQ}(\hat{r})\;Y_{1q''}(\hat{r})\;Y_{l-1,Q_1}(\hat{r})\,d\hat{r}$$

$$\langle(lm')(KQ)(1q'')\nabla_{\Omega q''}(l+1,Q_1)\rangle = \int Y^*_{lm'}(\hat{r})\;Y_{KQ}(\hat{r})\;Y_{1q''}(\hat{r})\,\nabla_{\Omega q''}\,Y_{l+1,Q_1}(\hat{r})\,d\hat{r} \qquad (5.31)$$

Wyrażenie $\nabla_{\Omega q''}Y_{l+1,Q_1}(\hat{r})$ wyliczamy na podstawie wzoru (5.28) oraz wzorów

$$L_oY_{lm} = mY_{lm}$$

$$L_{+1}Y_{lm} = -\frac{1}{\sqrt{2}}\,[l(l+1)-m(m+1)]^{\frac{1}{2}}\,Y_{l,m+1} \qquad (5.32)$$

$$L_{-1}Y_{lm} = \frac{1}{\sqrt{2}}\,[l(l+1)-m(m-1)]^{\frac{1}{2}}\,Y_{l,m-1}$$

Otrzymujemy

$$\Omega_1 = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{q''} (-1)^{q''} Y_{1,-q''}(\hat{\varkappa}) \langle (lm')(KQ)(1\,q'')\nabla_{\Omega_{q''}}(l+1,Q_1)\rangle =$$

$$=\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \Big[- Y_{1,+1}(\hat{\varkappa})\langle(lm')(KQ)(1,-1)\nabla_{\Omega-1}(l+1,Q_1)\rangle + Y_{1,0}(\hat{\varkappa})\langle(lm')(KQ)(1,0)\times$$

$$\times\nabla_{\Omega_0}(l+1,Q_1)\rangle - Y_{1,-1}(\hat{\varkappa})\langle(lm')(KQ)(1,+1)\nabla_{\Omega_{+1}}(l+1,Q_1)\rangle\Big] =$$

$$= -\frac{1}{\sqrt{2}}\left[(l+1)(l+2)-Q_1(Q_1-1)\right]^{\frac{1}{2}} Y_{11}(\hat{\varkappa})\ (lm')(KQ)(1,-1)(1,0)(l+1,Q_1-1)\rangle +$$

$$+ Q_1 Y_{11}(\hat{\varkappa})\langle(lm')(KQ)(1,-1)(1,-1)(l+1,Q_1)\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}\left[(l+1)(l+2)-Q_1(Q_1+1)\right]^{\frac{1}{2}} Y_{10}(\hat{\varkappa})\,x$$

$$x\ \langle(lm')(KQ)(1,0)(1,-1)(l+1,Q_1+1)\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}\left[(l+1)(l+2)-Q_1(Q_1-1)\right]^{\frac{1}{2}} Y_{10}(\hat{\varkappa})\ x$$

$$x\ \langle(lm')(KQ)(1,0)(1,1)(l+1,Q_1-1)\rangle - Q_1 Y_{1-1}(\hat{\varkappa})\langle(lm')(KQ)(1,1)(1,1)(l+1,Q_1)\rangle +$$

$$- \frac{1}{\sqrt{2}}\left[(l+1)(l+2)-Q_1(Q_1+1)\right]^{\frac{1}{2}} Y_{1-1}(\hat{\varkappa})\langle(lm')(KQ)(1,1)(1,0)(l+1,Q_1+1)\rangle \tag{5.33}$$

Podobnie

$$\Omega_2 = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{q''} (-1)^{q''} Y_{1,-q''}(\hat{\varkappa})\langle (lm')(KQ)(1\,q'')\nabla_{\Omega_{q''}}(l-1,Q_1)\rangle =$$

$$= - \frac{1}{\sqrt{2}}\left[(l-1)l-Q_1(Q_1-1)\right]^{\frac{1}{2}} Y_{11}(\hat{\varkappa})\langle(lm')(KQ)(1,-1)(1,0)(l-1,Q_1-1)\rangle$$

$$+ Q_1 Y_{11}(\hat{\varkappa})\quad \langle(lm')(KQ)(1,-1)(1,-1)(l-1,Q_1)\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}\left([l-1)l-Q_1(Q_1+1)\right]^{\frac{1}{2}} Y_{10}(\hat{\varkappa})\,x$$

$$x\ \langle(lm')(KQ)(1,0)(1,-1)(l-1,Q_1+1)\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}\left[(l-1)l-Q_1(Q_1-1)\right]^{\frac{1}{2}} Y_{10}(\hat{\varkappa})\ x$$

$$x\ \langle(lm')(KQ)(1,0)(1,1)(l-1,Q_1-1)\rangle - Q_1 Y_{1-1}(\hat{\varkappa})\langle(lm')(KQ)(1,1)(1,1)(l-1,Q_1)\rangle +$$

$$- \frac{1}{\sqrt{2}}\left[(l+1)(l+2)-Q_1(Q_1+1)\right]^{\frac{1}{2}} Y_{1-1}(\hat{\varkappa})\langle(lm')(KQ)(1,1)(1,0)(l-1,Q_1+1)\rangle \tag{5.34}$$

gdzie

$$\langle(lm')(KQ)(1,-1)(1,0)(l+1,Q_1-1)\rangle = \int Y^*_{lm'}\, Y_{KQ}\, Y_{1-1}\, Y_{10}\, Y_{l+1,Q_1-1}\, d\hat{r} \tag{5.35}$$

Wtedy możemy napisać

$$\langle lm'|j_K(\varkappa r)\, Y_{KQ}(\hat{r}) \sum_{q''} (-1)^{q''} \varkappa_{-q''} \nabla_{q''} \nabla_{q}|lm\rangle =$$

$$= \frac{4\pi}{3} \varkappa r \sum_{Q_1} (-1)^{q+l+m} \Big\{ \sum_{q''} (-1)^{q''} Y_{1,-q''}(\hat{\varkappa}) \langle S_3 \rangle \Big[-(l+1)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} l+1 & 1 & l \\ Q_1 & -q & -m \end{pmatrix} \times$$

$$\times \langle (lm')(KQ)(1q'')(l+1,Q_1)\rangle + l^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} l-1 & 1 & l \\ Q_1 & -q & -m \end{pmatrix} \langle (lm')(KQ)(1q'')(l-1,Q_1)\rangle \Big] +$$

$$+ \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{\frac{1}{2}} \langle S_4 \rangle \Big[-(l+1)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} l+1 & 1 & l \\ Q_1 & -q & -m \end{pmatrix} \mathcal{Q}_1 + l^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} l-1 & 1 & l \\ Q_1 & -q & -m \end{pmatrix} \mathcal{Q}_2 \qquad (5.36)$$

gdzie stosując wzory (5.5) i (5.11)

$$\langle (lm')(KQ)(qq'')(K_1Q_1)\rangle = \int Y^*_{lm'}(\hat{r})\, Y_{KQ}(\hat{r})\, Y_{qq''}(\hat{r})\, Y_{K_1Q_1}(\hat{r})\, d\hat{r} =$$

$$= \sum_{K'Q'} (-1)^{Q'+m'} \frac{1}{4\pi} \left\{ (2K+1)(2q+1)(2l+1)(2K_1+1) \right\}^{\frac{1}{2}} (2K'+1) \times$$

$$\times \begin{pmatrix} K & q & K' \\ Q & q'' & Q' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K & q & K' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & K' & K_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & K' & K_1 \\ -m' & -Q' & Q_1 \end{pmatrix} \qquad (5.37)$$

oraz

$$\langle (lm')(KQ)(K''Q'')(qq'')(K_2Q_2)\rangle = \int Y^*_{lm'}(\hat{r})\, Y_{KQ}(\hat{r})\, Y_{K''Q''}(\hat{r})\, Y_{qq''}(\hat{r})\, Y_{K_2Q_2}(\hat{r})\, d\hat{r} =$$

$$= \sum_{K'Q'} \sum_{K_1Q_1} (-1)^{Q'+Q_1+Q_2} (2K'+1)(2K_1+1) \left\{ \frac{(2K+1)(2K''+1)(2q+1)(2l+1)(2K_2+1)}{4\pi} \right\}^{\frac{1}{2}} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} K & K'' & K' \\ Q & Q'' & Q' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K & K'' & K' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K' & q & K_1 \\ -Q' & q'' & Q_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K' & q & K_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & K_1 & K_2 \\ -m' & -Q_1 & Q_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & K_1 & K_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

(5.38)

PEŁNA POSTAĆ POPRAWKI RELATYWISTYCZNEJ

Na podstawie wzorów (2.7) i (2.9) otrzymujemy poprawkę relatywistyczną w postaci:

$$P = \langle J'M'|R_{1q}|JM\rangle + \langle J'M'|R_{2q}|JM\rangle$$

Jawną postać elementu macierzowego $\langle J'M'|R_{1q}|JM\rangle$ podają wzory (4.1), (4.6), (4.12) oraz (4.15), a elementu macierzowego $\langle J'M'|R_{2q}|JM\rangle$ wzory (5.17), (5.14), (5.26), (5.36). Występują w nich oprócz symboli n-j całki $\langle S_1(\alpha)\rangle$, $\langle S_2(\alpha)\rangle$(wzór(5.25)) całki $\langle S_3\rangle$, $\langle S_4\rangle$ (wzór (5.31)) oraz całki $\langle \xi j_K\rangle$, $\langle j_K\rangle$ (wzory (4.10), (5.14)).
Wzory nadają się do obliczeń numerycznych.

LITERATURA

1. Bloch F., Phys. Rev. 50, 259(36).
2. De Gennes P.G., in Magnetism III, p. 115, T. Rado, H. Suhl editors, Academic Press, 1963.
3. Halpern O., Johnson M.H., Phys. Rev. 55, 898 (1939).
4. Schwinger J., Phys. Rev. 51, 544(37).
5. Trammell G.T., Phys. Rev. 92, 1387(53).
6. Koehler W.C., Wollan E.O., Phys. Rev. 92, 1380(53).
7. Koehler W.C., Wollan E.O., Phys. Rev. 110, 37(58).
8. Odiot S., Saint-James D., J. Phys. Chem. Solids 17, 117(60).
9. Johnston D.F., Proc. Phys. Soc. 88, 37(66).
10. Johnston D.F., Rimmer D.E., J. Phys. C2.1151(69).
11. Lovesey S.W., J. Phys. C2, 470(69).
12. Lovesey S.W., Rimmer D.E., Rep. Prog. Phys. 32, 333(69).
13. Balcar E., Lovesey S.W., Phys. Lett. A31, 67(70).
14. Balcar E., Lovesey S.W., J. Phys. C3, 1292(70).
15. Warshall W., Lovesey S.W., Theory of Thermal Neutron Scattering (Oxford, U.P., London, 1970).
16. Stassis C., Deckman H.W., Phys. Rev. B, 12, 1885(75).
17. Stassis C., Deckman H.W., J. Phys. C, 9, 2241 (76).
18. Rose H.J., Brink D.M., Rev. Mod. Phys., 39, 306(67).

19. Blatt J.M., Weisskof V.F., Theoretical Nuclear Physics (Wiley, New York, 1952).
20. Baster M., Rocznik Naukowo-Dydaktyczny WSP w Krakowie. Prace Fizyczne IV. Kraków 1984.

SUMMARY

The relatyvistic correction is derived for the general formula of the cross section for magnetic scattering of thermal neutrons by paramagnetic ion, obtained by Lovesey for nonrelativistic approximation.

РЕЗЮМЕ

Цель работы автора сводится к поискам вида релятивистической поправки в формулу сечения рассеяния нейтронов на парамагнитном ионе, которую получил Lovesey.