Національна академія наук України

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP–96–11U

О.І.Чернявський, Р.Р.Левицький

ЕФЕКТИВНІ ВЗАЄМОДІЇ У ДВОКОМПОНЕНТНІЙ ЧАСТКОВО ЗБУДЖЕНІЙ СУМІШІ ГАЗІВ

ЛЬВІВ

УДК: 536.75
PACS: 51., 51.30.+i, 64.70Fx, 31.50.

Ефективні взаємодії у двокомпонентній частково збудженій суміші газів

О.І.Чернявський, Р.Р.Левицький

Анотація.Для випадку великих міжядерних відстаней у дворівневому наближенні з допомогою псевдоспінового формалізму розв'язується електронна задача для двокомпонентної суміші газів частинок, частина з яких перебуває у збудженому електронному стані. Досліджена залежність ефективних міжчастинкових взаємодій від складу та просторової конфігурації дво- та тричастинкових груп.

The effective interactions in the binary partially excited gas mixture

O.I.Chernyavskii, R.R.Levitskii

Abstract. The electronic problem in the two–level approximation with pseudospin formalism is solved by binary partially excited gas mixture for large internuclear distance. The dependence of the effective interparticle interactions on composition and the spatial configuration two– and three–particles groups is investigated.

Подається до Українського фізичного журналу
Submitted to Ukrainian Journal of Physics

1. Вступ

Важливою задачею у статистичній теорії рівноважних властивостей газових сумішей є задача про термодинамічні та структурні властивості газової суміші (атомів чи молекул) кількох сортів, у якій деякі з частинок перебувають у збуджених електронних станах (частково збуджена суміш газів, далі ЧЗСГ). Особливістю ЧЗСГ, яка розглядається є те, що час життя частинки у збудженому електронному стані ($10^{-9}c - 10^{-8}c$) значно перевищує час встановлення рівноваги за поступальними ступенями вільності ($10^{-11}c - 10^{-10}c$). Виходячи з цього, можна вивчати рівноважні властивості газової суміші при заданому (нерівноважному) стані електронної підсистеми. Іншою важливою особливістю є виникнення у системі різнозбуджених тотожних частинок резонансних ефективних взаємодій, котрі є істотно багаточастинковими і складним чином залежать від просторової конфігурації частинок.

Відомо, що коли для двох нерухомих достатньо віддалених один від одного нейтральних атомів оператор енергії їх взаємодії взяти у вигляді мультипольного ряду [1], то в межах квантово-механічної теорії збурень можна обчислити електронні терми такої системи. В адіабатичному наближенні Борна-Оппенгеймера вони є потенціальною енергією для центрів мас атомів чи ефективною міжатомною взаємодією. Застосовуючи дану схему до двох нейтральних атомів, які знаходяться в основному електронному стані, отримуємо відмінний від нуля результат лише у другому порядку теорії збурень - взаємодія Ван-дер-Ваальса. Ця взаємодія має характер притягання і її енергія пропорційна до R^{-6} (R - відстань між атомами). Якщо ж атоми тотожні і перебувають в станах з різною парністю, то вже в першому порядку теорії збурень отримуємо ненульову поправку – резонансна диполь-дипольна взаємодія (РДДВ), яка в залежності від симетрії стану має характер притягання або відштовхування і її енергія пропорційна R^{-3}. Проблемі дослідження ефективних взаємодій у частково збудженому газі (ЧЗГ) і їх впливу на його термодинамічні та структурні властивості присвячені роботи [2-7].

У роботах [8,9] було розпочато дослідження рівноважних термодинамічних і структурних властивостей ЧЗСГ. Для подальшого вивчення цих властивостей необхідно знайти ефективні міжчастинкові енергії взаємодій у дво- і тричастинкових групах ЧЗСГ, що дасть можливість дослідити температурні та концентраційні залежності другого та третього віріальних коефіцієнтів і дво- та тричастинкових внесків у парні просторові функції розподілу ЧЗСГ.

Використовуючи дворівневе наближення і застосовуючи псевдоспіновий формалізм, знайдені власні значення та власні функції гамільтоніану електронної задачі. Це дозволило знайти ефективні міжчастинкові взаємодії у дво- та тричастинкових групах ЧЗСГ як з використанням теорії збурень, так і з допомогою точної діагоналізації матриці гамільтоніану взаємодії у скінченовимірному базисі. Досліджена залежність ефективних міжчастинкових взаємодій від конфігурації та складу дво- та тричастинкових груп ЧЗСГ.

2. Псевдоспінове представлення гамільтоніану електронної підсистеми ЧЗСГ двох компонент

Гамільтоніан електронної підсистеми двокомпонентної ЧЗСГ $N^a + N^b$ частинок (N^a - кількість частинок сорту a, N^b - кількість частинок сорту b) запишемо у наступному вигляді

$$\hat{H} = \hat{H}^{aa} + \hat{H}^{bb} + \hat{H}^{ab}, \tag{2.1}$$

де

$$\hat{H}^{aa} = \sum_{n=1}^{N^a} \hat{h}_n^a + \frac{1}{2} \sum_{n,m=1}^{N^a}{}' \hat{V}_{n,m}^{aa} \tag{2.2}$$

– гамільтоніан, що описує взаємодію частинок сорту a;

$$\hat{H}^{bb} = \sum_{n=1}^{N^b} \hat{h}_n^b + \frac{1}{2} \sum_{n,m=1}^{N^b}{}' \hat{V}_{n,m}^{bb} \tag{2.3}$$

– гамільтоніан, що описує взаємодію частинок сорту b;

$$\hat{H}^{ab} = \sum_{n=1}^{N^a} \sum_{m=1}^{N^b} \hat{V}_{n,m}^{ab} \tag{2.4}$$

– гамільтоніан взаємодії частинок різних сортів; при цьому штрих біля знаку суми означає, що відсутні члени з однаковими індексами. У формулах (2.2)-(2.4) введено наступні позначення:

$$\hat{h}_n^a = \sum_{\alpha=1}^{Z^a} -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_\alpha - \sum_{\alpha=1}^{Z^a} \frac{Z^a e^2}{|\vec{r}_{n^a_\alpha}|} + \frac{1}{2}\sum_{\alpha,\gamma=1}^{Z^a}{}' \frac{e^2}{|\vec{r}_{n^a_\alpha} - \vec{r}_{n^a_\gamma}|},$$

$$\hat{h}_n^b = \sum_{\alpha=1}^{Z^b} -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_\alpha - \sum_{\alpha=1}^{Z^b} \frac{Z^b e^2}{|\vec{r}_{n^b_\alpha}|} + \frac{1}{2}\sum_{\alpha,\gamma=1}^{Z^b}{}' \frac{e^2}{|\vec{r}_{n^b_\alpha} - \vec{r}_{n^b_\gamma}|}, \tag{2.5}$$

$$\hat{V}^{aa}_{n,m} = \frac{(Z^a e)^2}{\mid \vec{R}_{n^a} - \vec{R}_{m^a} \mid} - \sum_{\beta=1}^{Z^a} \frac{Z^a e^2}{\mid \vec{R}_{n^a m^a} - \vec{r}_{m^a_\beta} \mid} -$$

$$- \sum_{\alpha=1}^{Z^a} \frac{Z^a e^2}{\mid \vec{R}_{n^a m^a} + \vec{r}_{n^a_\alpha} \mid} + \sum_{\alpha,\beta=1}^{Z^a} \frac{e^2}{\mid \vec{R}_{n^a m^a} + \vec{r}_{n^a_\alpha} - \vec{r}_{m^a_\beta} \mid},$$

$$\hat{V}^{bb}_{n,m} = \frac{(Z^b e)^2}{\mid \vec{R}_{n^b} - \vec{R}_{m^b} \mid} - \sum_{\beta=1}^{Z^b} \frac{Z^b e^2}{\mid \vec{R}_{n^b m^b} - \vec{r}_{m^b_\beta} \mid} -$$

$$- \sum_{\alpha=1}^{Z^b} \frac{Z^b e^2}{\mid \vec{R}_{n^b m^b} + \vec{r}_{n^b_\alpha} \mid} + \sum_{\alpha,\beta=1}^{Z^b} \frac{e^2}{\mid \vec{R}_{n^b m^b} + \vec{r}_{n^b_\alpha} - \vec{r}_{m^b_\beta} \mid},$$

$$\hat{V}^{ab}_{n,m} = \frac{(Z^a e)(Z^b e)}{\mid \vec{R}_{n^a} - \vec{R}_{m^b} \mid} - \sum_{\beta=1}^{Z^b} \frac{Z^a e^2}{\mid \vec{R}_{n^a m^b} + \vec{r}_{m^b_\beta} \mid} -$$

$$- \sum_{\alpha=1}^{Z^a} \frac{Z^b e^2}{\mid \vec{R}_{n^a m^b} - \vec{r}_{n^a_\alpha} \mid} + \sum_{\alpha=1}^{Z^a} \sum_{\beta=1}^{Z^b} \frac{e^2}{\mid \vec{R}_{n^a m^b} + \vec{r}_{m^b_\beta} - \vec{r}_{n^a_\alpha} \mid}, \tag{2.6}$$

m - маса електрона, Z^a, Z^b - заряди ядер сорту a і b, відповідно, $\vec{r}_{n^a_\alpha}$ - радіус-вектор α-го електрона відносно n-го ядра сорту a; $\vec{r}_{m^b_\beta}$ - радіус-вектор β-го електрона відносно m-го ядра сорту b; $\vec{R}_{n^a}, \vec{R}_{m^b}$ - радіуси-вектори n-го та m-го ядер сортів a і b, відповідно, $\vec{R}_{n^a m^a} = \vec{R}_{n^a} - \vec{R}_{m^a}$, $\vec{R}_{n^a m^b} = \vec{R}_{n^a} - \vec{R}_{m^b}$, $\vec{R}_{n^b m^b} = \vec{R}_{n^b} - \vec{R}_{m^b}$, Якщо ввести операторні заряди

$$\hat{Q}^a_n(\nabla) = e \left(Z^a - \sum_{\alpha=1}^{Z^a} \exp(\vec{r}_{n^a_\alpha} \nabla_n) \right), \tag{2.7}$$

$$\hat{Q}^b_m(\nabla) = e \left(Z^b - \sum_{\alpha=1}^{Z^b} \exp(\vec{r}_{m^b_\alpha} \nabla_m) \right), \tag{2.8}$$

то вирази (2.6) для операторів енергій взаємодії можна записати у вигляді:

$$\hat{V}^{aa}_{n,m} = \hat{Q}^a_n(\nabla) \hat{Q}^a_m(-\nabla) \frac{1}{\mid \vec{R}_{n^a} - \vec{R}_{m^a} \mid},$$

$$\hat{V}^{bb}_{n,m} = \hat{Q}^b_n(\nabla) \hat{Q}^b_m(-\nabla) \frac{1}{\mid \vec{R}_{n^b} - \vec{R}_{m^b} \mid},$$

$$\hat{V}^{ab}_{n,m} = \hat{Q}^a_n(\nabla) \hat{Q}^b_m(-\nabla) \frac{1}{\mid \vec{R}_{n^a} - \vec{R}_{m^b} \mid}. \tag{2.9}$$

Далі перейдемо до представлення чисел заповнення для гамільтоніана внутрішньої електронної підсистеми (2.1) у випадку великих міжядерних відстаней. У цьому разі з власних функцій φ_{nf} операторів (2.5) $\hat{h}^{a,b}_n \varphi_{nf} = E^{a,b}_f \varphi_{nf}$ можна побудувати повний ортонормований набір. Хвильова функція електронної підсистеми в представленні чисел заповнення є функцією всіх чисел N_{nf}, з котрих N - одиниці, а решта нулі. Позначимо цю функцію $\Psi(\ldots, N^a_{nf}, N^b_{mg}, \ldots)$. Введемо оператори знищення і народження f-го стану n-го атома частинок сорту a

$$\hat{a}_{nf} \Psi(\ldots, N^a_{nf}, N^b_{mg}, \ldots) = N^a_{nf} \Psi(\ldots, N^a_{nf} - 1, N^b_{mg}, \ldots),$$

$$\hat{a}^+_{nf} \Psi(\ldots, N^a_{nf}, N^b_{mg}, \ldots) = (1 - N^a_{nf}) \Psi(\ldots, N^a_{nf} + 1, N^b_{mg}, \ldots), \tag{2.10}$$

і оператори знищення і народження g-го стану m-го атома частинок сорту b

$$\hat{b}_{mg} \Psi(\ldots, N^a_{nf}, N^b_{mg}, \ldots) = N^b_{mg} \Psi(\ldots, N^a_{nf}, N^b_{mg} - 1, \ldots),$$

$$\hat{b}^+_{mg} \Psi(\ldots, N^a_{nf}, N^b_{mg}, \ldots) = (1 - N^b_{mg}) \Psi(\ldots, N^a_{nf}, N^b_{mg} + 1, \ldots). \tag{2.11}$$

Ці оператори задовольняють комутаційні співвідношення Паулі. В представленні чисел заповнення гамільтоніан (2.1) розглядуваної системи матиме вигляд

$$\hat{H} = \sum_{n=1}^{N^a} E^a_f \hat{a}^+_{nf} \hat{a}_{nf} + \sum_{m=1}^{N^b} E^b_g \hat{b}^+_{mg} \hat{b}_{mg} +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{n,m=1}^{N^a}{}' \sum_{ff',gg'} \langle f'_n g'_m \mid \hat{V}^{aa}_{n,m} \mid g_m f_n \rangle \hat{a}^+_{nf'} \hat{a}^+_{mg'} \hat{a}_{mg} \hat{a}_{nf} +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{n,m=1}^{N^b}{}' \sum_{ff',gg'} \langle f'_n g'_m \mid \hat{V}^{bb}_{n,m} \mid g_m f_n \rangle \hat{b}^+_{nf'} \hat{b}^+_{mg'} \hat{b}_{mg} \hat{b}_{nf} +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N^a} \sum_{m=1}^{N^b} \sum_{ff',gg'} \langle f'_n g'_m \mid \hat{V}^{ab}_{n,m} \mid g_m f_n \rangle \hat{a}^+_{nf'} \hat{b}^+_{mg'} \hat{b}_{mg} \hat{a}_{nf}. \tag{2.12}$$

Використовуючи (2.9), і враховуючи, що інтегрування по електронних координатах n-го і m-го атомів розділяються, матричні елементи, котрі входять в (2.12), запишемо у вигляді

$$\langle f'_n g'_m \mid \hat{V}_{n,m} \mid g_m f_n \rangle =$$
$$\langle f'_n \mid \hat{Q}_n(\nabla) \mid f_n \rangle \langle g'_m \mid \hat{Q}_m(-\nabla) \mid g_m \rangle \times \frac{1}{\mid \vec{R}_n - \vec{R}_m \mid}. \quad (2.13)$$

У дворівневому наближенні вважається, що такі матричні елементи відмінні від нуля лише при умові, що $f, g = \{0, 1\}$. Надалі, під станами $\mid 0_n\rangle, \mid 1_n\rangle$ будемо розуміти основний та збуджений стан атома, відповідно. Введемо оператори

$$\hat{S}^x_n = \frac{1}{2}(\hat{a}^+_{n1}\hat{a}_{n0} + \hat{a}^+_{n0}\hat{a}_{n1}),\ \hat{S}^y_n = \frac{1}{2i}(\hat{a}^+_{n1}\hat{a}_{n0} - \hat{a}^+_{n0}\hat{a}_{n1}),$$
$$\hat{S}^z_n = \frac{1}{2}(\hat{a}^+_{n1}\hat{a}_{n1} - \hat{a}^+_{n0}\hat{a}_{n0}); \quad (2.14)$$

$$\hat{\Sigma}^x_m = \frac{1}{2}(\hat{b}^+_{m1}\hat{b}_{m0} + \hat{b}^+_{m0}\hat{b}_{m1}),\ \hat{\Sigma}^y_m = \frac{1}{2i}(\hat{b}^+_{m1}\hat{b}_{m0} - \hat{b}^+_{m0}\hat{b}_{m1}),$$
$$\hat{\Sigma}^z_m = \frac{1}{2}(\hat{b}^+_{m1}\hat{b}_{m1} - \hat{b}^+_{m0}\hat{b}_{m0}), \quad (2.15)$$

які задовольняють відомі спінові комутаційні співвідношення $\left[\hat{S}^i_n, \hat{S}^j_m\right] = i\delta_{nm}\hat{S}^k_m,\ \left[\hat{\Sigma}^i_n, \hat{\Sigma}^j_m\right] = i\delta_{nm}\hat{\Sigma}^k_m,\ i, j, k = x, y, z$ і діють на основний та збуджений стани атома наступним чином:

$$\hat{S}^x_n \mid 0_n\rangle = \frac{1}{2} \mid 1_n\rangle,\ \hat{S}^x_n \mid 1_n\rangle = \frac{1}{2} \mid 0_n\rangle,$$
$$\hat{S}^z_n \mid 0_n\rangle = -\frac{1}{2} \mid 0_n\rangle,\ \hat{S}^z_n \mid 1_n\rangle = \frac{1}{2} \mid 1_n\rangle.$$

$$\hat{\Sigma}^x_n \mid 0_n\rangle = \frac{1}{2} \mid 1_n\rangle,\ \hat{\Sigma}^x_n \mid 1_n\rangle = \frac{1}{2} \mid 0_n\rangle,$$
$$\hat{\Sigma}^z_n \mid 0_n\rangle = -\frac{1}{2} \mid 0_n\rangle,\ \hat{\Sigma}^z_n \mid 1_n\rangle = \frac{1}{2} \mid 1_n\rangle.$$

Гамільтоніан (2.12) у дворівневому наближенні у термінах псевдоспінових операторів матиме вигляд:

$$\hat{H} = A_a + A_b + A_{ab} +$$
$$+ \sum_{n=1}^{N^a} \left[(B^x_{n^a} + B^x_{n^a}{}')\hat{S}^x_{n^a} + (B^z_{n^a} + B^z_{n^a}{}')\hat{S}^z_{n^a}\right] +$$

$$+ \sum_{m=1}^{N^b} \left[(B^x_{m^b} + B^x_{m^b}{}')\hat{\Sigma}^x_{m^b} + (B^z_{m^b} + B^z_{m^b}{}')\hat{\Sigma}^z_{m^b}\right] +$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{n,m=1}^{N^a}{}' (C^{xx}_{nm}\hat{S}^x_{n^a}\hat{S}^x_{m^a} + C^{xz}_{nm}\hat{S}^x_{n^a}\hat{S}^z_{m^a} + C^{zz}_{nm}\hat{S}^z_{n^a}\hat{S}^z_{m^a}) +$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{n,m=1}^{N^b}{}' (D^{xx}_{nm}\hat{\Sigma}^x_{n^b}\hat{\Sigma}^x_{m^b} + D^{xz}_{nm}\hat{\Sigma}^x_{n^b}\hat{\Sigma}^z_{m^b} + D^{zz}_{nm}\hat{\Sigma}^z_{n^b}\hat{\Sigma}^z_{m^b}) +$$
$$+\sum_{n=1}^{N^a}\sum_{m=1}^{N^b} (K^{xx}_{nm}\hat{S}^x_{n^a}\hat{\Sigma}^x_{m^b} + K^{xz}_{nm}\hat{S}^x_{n^a}\hat{\Sigma}^z_{m^b} +$$
$$+K^{zx}_{nm}\hat{S}^z_{n^a}\hat{\Sigma}^x_{m^b} + K^{zz}_{nm}\hat{S}^z_{n^a}\hat{\Sigma}^z_{m^b}), \quad (2.16)$$

де коефіцієнти $A, B^\alpha_n, C^{\alpha\beta}_{nm}, D^{\alpha\beta}_{nm}, K^{\alpha\beta}_{nm}$ виражаються через матричні елементи операторів енергій міжчастинкових взаємодій. Наприклад,

$$A_a = \frac{N^a}{2}(E^a_0 + E^a_1) +$$
$$+\frac{1}{8}\sum_{n,m=1}^{N^a}{}' (\langle 0,0 \mid \hat{V}^{aa}_{n,m} \mid 0,0\rangle + \langle 1,0 \mid \hat{V}^{aa}_{n,m} \mid 0,1\rangle +$$
$$+\langle 0,1 \mid \hat{V}^{aa}_{n,m} \mid 1,0\rangle + \langle 1,1 \mid \hat{V}^{aa}_{n,m} \mid 1,1\rangle),$$

$$A_{ab} = \frac{1}{4}\sum_{n=1}^{N^a}\sum_{m=1}^{N^b} (\langle 0,0 \mid \hat{V}^{ab}_{n,m} \mid 0,0\rangle + \langle 1,0 \mid \hat{V}^{ab}_{n,m} \mid 0,1\rangle +$$
$$\langle 0,1 \mid \hat{V}^{ab}_{n,m} \mid 1,0\rangle + \langle 1,1 \mid \hat{V}^{ab}_{n,m} \mid 1,1\rangle),$$

$$B^x_{n^a} = \sum_{m=1}^{N^a}{}' (\langle 1,0 \mid \hat{V}^{aa}_{n,m} \mid 0,0\rangle + \langle 1,1 \mid \hat{V}^{aa}_{n,m} \mid 1,0\rangle),$$

$$B^z_{n^a} = (E^a_1 - E^a_0) +$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{m=1}^{N^a}{}' (\langle 1,1 \mid \hat{V}^{aa}_{n,m} \mid 1,1\rangle - \langle 0,0 \mid \hat{V}^{aa}_{n,m} \mid 0,0\rangle +$$
$$+\langle 1,0 \mid \hat{V}^{aa}_{n,m} \mid 0,1\rangle - \langle 0,1 \mid \hat{V}^{aa}_{n,m} \mid 1,0\rangle),$$

$$C^{xx}_{nm} = 4\langle 1,0 \mid \hat{V}^{aa}_{n,m} \mid 1,0\rangle,$$

$$D^{zz}_{nm} = \langle 0,0 \mid \hat{V}^{bb}_{n,m} \mid 0,0\rangle + \langle 1,1 \mid \hat{V}^{bb}_{n,m} \mid 1,1\rangle - \\ -\langle 1,0 \mid \hat{V}^{bb}_{n,m} \mid 0,1\rangle - \langle 0,1 \mid \hat{V}^{bb}_{n,m} \mid 1,0\rangle,$$

$$K^{xz}_{nm} = 2(\langle 1,1 \mid \hat{V}^{ab}_{n,m} \mid 1,0\rangle - \langle 1,0 \mid \hat{V}^{ab}_{n,m} \mid 0,0\rangle),$$

$$K^{zx}_{nm} = 2(\langle 1,1 \mid \hat{V}^{ab}_{n,m} \mid 0,1\rangle - \langle 0,1 \mid \hat{V}^{ab}_{n,m} \mid 0,0\rangle). \qquad (2.17)$$

Якщо для операторних зарядів (2.7), (2.8) обмежитися дипольним наближенням, то:

$$\langle f'_n g'_m \mid \hat{V}_{n,m} \mid g_m f_n\rangle = -\langle f'_n \mid e\sum_{\alpha=1}^{Z} \vec{r}_{n_\alpha} \mid f_n\rangle \nabla_n \times \\ \times\langle g'_m \mid e\sum_{\alpha=1}^{Z} \vec{r}_{m_\alpha} \mid g_m\rangle \nabla_m \frac{1}{\mid \vec{R}_n - \vec{R}_m \mid},$$

і дворівневе наближення означає, що електричний дипольний момент відсутній у всіх станах, крім основного та збудженого і дозволений електричний дипольний перехід лише між цими станами. Надалі для простоти, крім цього, покладатимемо, що

$$\langle 0_n \mid \hat{Q}_n(\nabla) \mid 0_n\rangle = \langle 1_n \mid \hat{Q}_n(\nabla) \mid 1_n\rangle = 0, \\ \langle 1_n \mid \hat{Q}_n(\nabla) \mid 0_n\rangle \neq 0. \qquad (2.18)$$

Враховуючи (2.18), можна значно спростити гамільтоніан розглядуваної системи (2.16).

3. Власні функції та власні значення гамільтоніану двокомпонентної ЧЗСГ. Теорія збурень

Задачу про власні функції та власні значення гамільтоніану двокомпоентної ЧЗСГ можна розв'язати застосовуючи теорію збурень. В роботах [4-6] така задача розв'язана для випадку однокомпонентного частково збудженого газу, який можна розглядати як один із частинних випадків двокомпонентної ЧЗСГ. Тому розглянемо застосування методу теорії збурень для розв'язку електронної задачі для груп частинок ЧЗСГ, котрі містять частинки двох сортів.

Розглянемо спочатку випадок двочастинкової двосортної групи ($N^a = 1, N^b = 1$). У даному випадку вихідний гамільтоніан (2.16) запишемо у вигляді *незбурена частина + мала поправка*.

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{h} \qquad (3.1)$$

де

$$\hat{H}_0 = \frac{E^a_0 + E^a_1}{2} + (E^a_1 - E^a_0)\hat{S}^z_{1^a} + \frac{E^b_0 + E^b_1}{2} + (E^b_1 - E^b_0)\hat{\Sigma}^z_{1^b},$$
$$\hat{h} = a + b^x_a \hat{S}^x_{1^a} + b^z_a \hat{S}^z_{1^a} + b^x_b \hat{\Sigma}^x_{1^b} + b^z_b \hat{\Sigma}^z_{1^b} + \\ +K^{xx}_{11}\hat{S}^x_{1^a}\hat{\Sigma}^x_{1^b} + K^{xz}_{11}\hat{S}^x_{1^a}\hat{\Sigma}^z_{1^b} + K^{zx}_{11}\hat{S}^z_{1^a}\hat{\Sigma}^x_{1^b} + K^{zz}_{11}\hat{S}^z_{1^a}\hat{\Sigma}^z_{1^b}, \qquad (3.2)$$

а також,

$$a = A_a + A_b + A_{ab} + \left(\frac{E^a_0 + E^a_1}{2} + \frac{E^b_0 + E^b_1}{2}\right),$$
$$b^x_a = {B'}^x_{1^a},\, b^x_b = {B'}^x_{1^b},\, b^z_a = {B'}^z_{1^a},\, b^z_b = {B'}^z_{1^b}.$$

Поправку до енергії взаємодії за теорією збурень шукатимемо у вигляді:

$$E_\eta(\mathbf{R}_{1^a},...,\mathbf{R}_{N^a},\mathbf{R}_{1^b},...,\mathbf{R}_{N^b}) - N^a_0 E^a_0 - N^a_1 E^a_1 - \\ N^b_0 E^b_0 - N^b_1 E^b_1 = {}^{(1)}E_\eta(\mathbf{R}_{1^a},...,\mathbf{R}_{N^a},\mathbf{R}_{1^b},...,\mathbf{R}_{N^b}) + \\ {}^{(2)}E_\eta(\mathbf{R}_{1^a},...,\mathbf{R}_{N^a},\mathbf{R}_{1^b},....,\mathbf{R}_{N^b}) + ... \qquad (3.3)$$

Згідно [10] поправка n-го порядку до власних значень $\varepsilon^{(0)}_\eta$ та власних функції $\Psi^{(0)}_\eta$, відповідно, визначаються наступним чином:

$$\varepsilon^{(n)}_\eta = \langle \Psi^{(n)}_\eta \mid \hat{h} \mid \Psi^{(n-1)}_\eta\rangle, \qquad (3.4)$$

$$\Psi^{(n)}_\eta = \sum_{j(=0)} \frac{\sum_\alpha \mid \Psi^{(n)}_{j,\alpha}\rangle\langle\Psi^{(n)}_{j,\alpha} \mid}{\varepsilon^{(n)}_\eta - \varepsilon^{(n)}_j} \times \\ \times\Big[(\hat{h} - \varepsilon^{(1)}_\eta) \mid \Psi^{(n-1)}_\eta\rangle - \varepsilon^{(2)}_\eta \mid \Psi^{(n-2)}_\eta\rangle - ... - \varepsilon^{(n-1)}_\eta \mid \Psi^{(1)}_\eta\rangle\Big] \qquad (3.5)$$

Використовуючи співвідношення (3.2), (3.4), (3.5), і беручи до уваги дію операторів $\hat{S}^x$, $\hat{S}^z$ та $\hat{\Sigma}^x$, $\hat{\Sigma}^z$ знаходимо власну функцію та власне значення в довільному порядку теорії збурень. Зокрема, з точністю до другого порядку теорії збурень отримаємо:

1) для терму $E^a_0 + E^b_0$ –

$$E^{inter}_{10,10}(R_{1^a}, R_{1^b}) = a - \frac{1}{2}b^x_a - \frac{1}{2}b^x_b + \frac{1}{4}K^{zz}_{11} + \\ + \frac{(\frac{1}{2}b^x_b - \frac{1}{4}K^{zx}_{11})^2}{E^b_0 - E^b_1} + \frac{(\frac{1}{2}b^x_a - \frac{1}{4}K^{xz}_{11})^2}{E^a_0 - E^a_1} + \frac{(\frac{1}{4}K^{xx}_{11})^2}{E^a_0 - E^a_1 + E^b_0 - E^b_1} \qquad (3.6)$$

з відповідною хвильовою функцією, знайденою з точністю до першого порядку теорії збурень

$$\Psi_0^{ab}=\Psi_0^{(0)}+\frac{b_b^x-\frac{1}{2}K_{11}^{zx}}{2(E_0^b-E_1^b)}\Psi_1^{(0)}+\frac{b_a^x-\frac{1}{2}K_{11}^{xz}}{2(E_0^a-E_1^a)}\Psi_2^{(0)}+ +\frac{\frac{1}{4}K_{11}^{xx}}{E_0^a-E_1^a+E_0^b-E_1^b}\Psi_3^{(0)}, \tag{3.7}$$

2) для терму $E_0^a+E_1^b$ –

$$E_{10,01}^{inter}(R_{1^a},R_{1^b})=-a-\frac{1}{2}b_a^z+\frac{1}{2}b_b^z-\frac{1}{4}K_{11}^{zz}+ +\frac{(\frac{1}{2}b_b^x-\frac{1}{4}K_{11}^{zx})^2}{E_1^b-E_0^b}+\frac{(\frac{1}{2}b_a^x+\frac{1}{4}K_{11}^{xz})^2}{E_0^a-E_1^a}+\frac{(\frac{1}{4}K_{11}^{xx})^2}{E_0^a-E_1^a+E_1^b-E_0^b} \tag{3.8}$$

і

$$\Psi_1^{ab}=\Psi_1^{(0)}+\frac{b_b^x-\frac{1}{2}K_{11}^{zx}}{2(E_1^b-E_0^b)}\Psi_0^{(0)}+\frac{b_a^x+\frac{1}{2}K_{11}^{xz}}{2(E_0^a-E_1^a)}\Psi_3^{(0)}+ +\frac{\frac{1}{4}K_{11}^{xx}}{E_0^a-E_1^a+E_1^b-E_0^b}\Psi_2^{(0)}, \tag{3.9}$$

3) для терму $E_1^a+E_0^b$ –

$$E_{01,10}^{inter}(R_{1^a},R_{1^b})=a+\frac{1}{2}b_a^z-\frac{1}{2}b_b^z-\frac{1}{4}K_{11}^{zz}+ +\frac{(\frac{1}{2}b_a^x-\frac{1}{4}K_{11}^{zx})^2}{E_1^a-E_0^a}+\frac{(\frac{1}{2}b_b^x+\frac{1}{4}K_{11}^{xz})^2}{E_0^b-E_1^b}+\frac{(\frac{1}{4}K_{11}^{xx})^2}{E_1^a-E_0^a+E_0^b-E_1^b} \tag{3.10}$$

і

$$\Psi_2^{ab}=\Psi_2^{(0)}+\frac{b_a^x-\frac{1}{2}K_{11}^{xz}}{2(E_1^a-E_0^a)}\Psi_0^{(0)}+\frac{b_b^x+\frac{1}{2}K_{11}^{zx}}{2(E_0^b-E_1^b)}\Psi_3^{(0)}+ +\frac{\frac{1}{4}K_{11}^{xx}}{E_1^a-E_0^a+E_0^b-E_1^b}\Psi_1^{(0)}, \tag{3.11}$$

4) для терму $E_1^a+E_1^b$ –

$$E_{01,01}^{inter}(R_{1^a},R_{1^b})=a+\frac{1}{2}b_a^z+\frac{1}{2}b_b^z+\frac{1}{4}K_{11}^{zz}+ +\frac{(\frac{1}{2}b_b^x+\frac{1}{4}K_{11}^{zx})^2}{E_1^b-E_0^b}+\frac{(\frac{1}{2}b_a^x+\frac{1}{4}K_{11}^{xz})^2}{E_1^a-E_0^a}+\frac{(\frac{1}{4}K_{11}^{xx})^2}{E_1^a-E_0^a+E_1^b-E_0^b} \tag{3.12}$$

і

$$\Psi_3^{ab}=\Psi_3^{(0)}+\frac{b_a^x+\frac{1}{2}K_{11}^{xz}}{2(E_1^a-E_0^a)}\Psi_1^{(0)}+\frac{b_b^x+\frac{1}{2}K_{11}^{zx}}{2(E_1^b-E_0^b)}\Psi_2^{(0)}+ +\frac{\frac{1}{4}K_{11}^{xx}}{E_1^a-E_0^a+E_1^b-E_0^b}\Psi_0^{(0)}. \tag{3.13}$$

В якості базисних тут взято наступні функції:

$$\Psi_0^{(0)}=\mid 0_{1^a}\rangle\mid 0_{1^b}\rangle,\quad \Psi_1^{(0)}=\mid 0_{1^a}\rangle\mid 1_{1^b}\rangle, \quad \Psi_2^{(0)}=\mid 1_{1^a}\rangle\mid 0_{1^b}\rangle,\quad \Psi_3^{(0)}=\mid 1_{1^a}\rangle\mid 1_{1^b}\rangle. \tag{3.14}$$

Для двочастинкових груп двокомпонентної ЧЗСГ, що містять частинки одного сорту отримуємо результати, які відповідають [5,6], тому запишемо лише деякі кінцеві вирази з точністю до другого порядку теорії збурень. Зокрема, для групи $N^a=2$, $N^b=0$ маємо:
1) для терму $2E_0^a$ –

$$E_{20,00}^{inter}(R_{1^a},R_{2^a})=a-b_a^z+\frac{1}{4}C_{12}^{zz}+\frac{(\frac{1}{4}C_{12}^{xx})^2}{2(E_0^a-E_1^a)}+\frac{(b_a^x-\frac{1}{4}C_{12}^{xz})^2}{2(E_0^a-E_1^a)}, \tag{3.15}$$

з відповідною хвильовою функцією, знайденою з точністю до першого порядку теорії збурень

$$\Psi_0^{aa}=\Psi_0^{(0)}+\frac{b_a^x-\frac{1}{4}C_{12}^{xz}}{2(E_0^a-E_1^a)}(\Psi_{11}^{(0)}+\Psi_{12}^{(0)})+\frac{\frac{1}{4}C_{12}^{xx}}{2(E_0^a-E_1^a)}\Psi_2^{(0)}, \tag{3.16}$$

2) для терму $2E_1^a$ –

$$E_{02,00}^{inter}(R_{1^a},R_{2^a})=a+b_a^z+\frac{1}{4}C_{12}^{zz}+\frac{(\frac{1}{4}C_{12}^{xx})^2}{2(E_1^a-E_0^a)}+\frac{(b_a^x+\frac{1}{4}C_{12}^{xz})^2}{2(E_1^a-E_0^a)}, \tag{3.17}$$

і

$$\Psi_2^{aa}=\Psi_2^{(0)}+\frac{b_a^x+\frac{1}{4}C_{12}^{xz}}{2(E_1^a-E_0^a)}(\Psi_{11}^{(0)}+\Psi_{12}^{(0)})+\frac{\frac{1}{4}C_{12}^{xx}}{2(E_1^a-E_0^a)}\Psi_0^{(0)}, \tag{3.18}$$

3) для двократно виродженого терму $E_0^a+E_1^a$ –

$${}^1E_{11,00}^{inter}(R_{1^a},R_{2^a})=a-\frac{1}{4}C_{12}^{zz}-\frac{1}{4}C_{12}^{xx} \tag{3.19}$$

$${}^2E_{11,00}^{inter}(R_{1^a},R_{2^a})=a-\frac{1}{4}C_{12}^{zz}+\frac{1}{4}C_{12}^{xx}+\frac{2b_a^x(\frac{1}{4}C_{12}^{xz})}{E_0^a-E_1^a} \tag{3.20}$$

з відповідними хвильовими функціями, знайденими з точністю до першого порядку теорії збурень

$$\Psi_{11}^{aa} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{11}^{(0)} - \Psi_{12}^{(0)}), \tag{3.21}$$

$$\Psi_{12}^{aa} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{11}^{(0)} + \Psi_{12}^{(0)}) + \frac{\frac{1}{\sqrt{2}}(b_a^x - \frac{1}{4}C_{12}^{xz})}{(E_1^a - E_0^a)}\Psi_0^{(0)} + \frac{\frac{1}{\sqrt{2}}(b_a^x + \frac{1}{4}C_{12}^{xz})}{(E_0^a - E_1^a)}\Psi_2^{(0)}. \tag{3.22}$$

В якості базисних тут взято наступні функції:

$$\begin{aligned} \Psi_0^{(0)} &= \mid 0_{1^a}\rangle \mid 0_{2^a}\rangle, \quad \Psi_{11}^{(0)} = \mid 0_{1^a}\rangle \mid 1_{2^a}\rangle, \\ \Psi_2^{(0)} &= \mid 1_{1^a}\rangle \mid 1_{2^a}\rangle, \quad \Psi_{12}^{(0)} = \mid 1_{1^a}\rangle \mid 0_{2^a}\rangle. \end{aligned} \tag{3.23}$$

Для групи $N^a = 0$, $N^b = 2$ отримуємо подібні результати.

Перейдемо до розгляду тричастинкових груп ЧЗСГ. Існує чотири таких групи. Детально задачу про знаходження власних функцій та власних значень гамільтоніану взаємодії методом теорії збурень розглянемо для двокомпонентних тричастинкових груп ЧЗСГ ($N^a = 2$, $N^b = 1$ та $N^a = 1$, $N^b = 2$). Для кожної з цих двох груп існує шість різних термів: чотири невироджених та два двократно вироджених. Гамільтоніан (2.16) для випадку групи $N^a = 2$, $N^b = 1$ набуває такого вигляду (враховано наближення (2.18)):

$$\hat{H} = (E_0^a + E_1^a) + \frac{1}{2}(E_0^b + E_1^b) + (E_1^a - E_0^a)\hat{S}_{1^a}^z + (E_1^a - E_0^a)\hat{S}_{2^a}^z + (E_1^b - E_0^b)\hat{\Sigma}_{1^b}^z + C_{12}^{xx}\hat{S}_{1^a}^x\hat{S}_{2^a}^x + K_{11}^{xx}\hat{S}_{1^a}^x\hat{\Sigma}_{1^b}^x + K_{21}^{xx}\hat{S}_{2^a}^x\hat{\Sigma}_{1^b}^x. \tag{3.24}$$

В даному випадку (3.2) матиме вигляд

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= (E_0^a + E_1^a) + \frac{E_0^b + E_1^b}{2} + (E_1^a - E_0^a)\sum_{n=1}^{2}\hat{S}_{n^a}^z + (E_1^b - E_0^b)\hat{\Sigma}_{1^b}^z, \\ \hat{h} &= C_{12}^{xx}\hat{S}_{1^a}^x\hat{S}_{2^a}^x + K_{11}^{xx}\hat{S}_{1^a}^x\hat{\Sigma}_{1^b}^x + K_{21}^{xx}\hat{S}_{2^a}^x\hat{\Sigma}_{1^b}^x. \end{aligned}$$

Власні функції та власні значення незбуреної задачі для даної тричастинкової групи мають вигляд:

$$\begin{aligned} \Psi_0^{(0)} &= \mid 0_{1^a}\rangle \mid 0_{2^a}\rangle \mid 0_{1^b}\rangle, & \varepsilon_0^{(0)} &= 2E_0^a + E_0^b, \\ \Psi_1^{(0)} &= \mid 0_{1^a}\rangle \mid 0_{2^a}\rangle \mid 1_{1^b}\rangle, & \varepsilon_1^{(0)} &= 2E_0^a + E_1^b, \\ \Psi_{21}^{(0)} &= \mid 1_{1^a}\rangle \mid 0_{2^a}\rangle \mid 0_{1^b}\rangle, & \varepsilon_2^{(0)} &= E_0^a + E_1^a + E_0^b, \\ \Psi_{22}^{(0)} &= \mid 0_{1^a}\rangle \mid 1_{2^a}\rangle \mid 0_{1^b}\rangle, & & \\ \Psi_{31}^{(0)} &= \mid 1_{1^a}\rangle \mid 0_{2^a}\rangle \mid 1_{1^b}\rangle, & \varepsilon_3^{(0)} &= E_0^a + E_1^a + E_1^b, \\ \Psi_{32}^{(0)} &= \mid 0_{1^a}\rangle \mid 1_{2^a}\rangle \mid 1_{1^b}\rangle, & & \\ \Psi_4^{(0)} &= \mid 1_{1^a}\rangle \mid 1_{2^a}\rangle \mid 0_{1^b}\rangle, & \varepsilon_4^{(0)} &= 2E_1^a + E_0^b, \\ \Psi_5^{(0)} &= \mid 1_{1^a}\rangle \mid 1_{2^a}\rangle \mid 1_{1^b}\rangle, & \varepsilon_5^{(0)} &= 2E_1^a + E_1^b. \end{aligned} \tag{3.25}$$

Використовуючи (3.4), (3.5), з точністю до другого порядку теорії збурень знаходимо, що:
1) для терму $2E_0^a + E_0^b$ –

$$E_{20,10}^{inter}(R_{1^a}, R_{2^a}, R_{1^b}) = \frac{(\frac{1}{4}K_{11}^{xx})^2 + (\frac{1}{4}K_{21}^{xx})^2}{(E_0^a - E_1^a) + (E_0^b - E_1^b)} + \frac{(\frac{1}{4}C_{12}^{xx})^2}{2(E_0^a - E_1^a)}, \tag{3.26}$$

з відповідною хвильовою функцією, знайденою з точністю до першого порядку теорії збурень

$$\Psi_0^{ab} = \Psi_0^{(0)} + \frac{\left(\frac{1}{4}K_{11}^{xx}\Psi_{31}^{(0)} + \frac{1}{4}K_{21}^{xx}\Psi_{32}^{(0)}\right)}{(E_0^a - E_1^a) + (E_0^b - E_1^b)} + \frac{\frac{1}{4}C_{12}^{xx}}{2(E_0^a - E_1^a)}\Psi_4^{(0)}, \tag{3.27}$$

2) для терму $2E_0^a + E_1^b$ –

$$E_{20,01}^{inter}(R_{1^a}, R_{2^a}, R_{1^b}) = \frac{(\frac{1}{4}K_{11}^{xx})^2 + (\frac{1}{4}K_{21}^{xx})^2}{(E_0^a - E_1^a) - (E_0^b - E_1^b)} + \frac{(\frac{1}{4}C_{12}^{xx})^2}{2(E_0^a - E_1^a)}, \tag{3.28}$$

і

$$\Psi_1^{ab} = \Psi_1^{(0)} + \frac{\left(\frac{1}{4}K_{11}^{xx}\Psi_{21}^{(0)} + \frac{1}{4}K_{21}^{xx}\Psi_{22}^{(0)}\right)}{(E_0^a - E_1^a) - (E_0^b - E_1^b)} + \frac{\frac{1}{4}C_{12}^{xx}}{2(E_0^a - E_1^a)}\Psi_5^{(0)}, \tag{3.29}$$

3) для терму $2E_1^a + E_0^b$ –

$$E_{02,10}^{inter}(R_{1^a},R_{2^a},R_{1^b}) = \frac{(\frac{1}{4}K_{21}^{xx})^2+(\frac{1}{4}K_{11}^{xx})^2}{(E_1^a-E_0^a)+(E_0^b-E_1^b)}+\frac{(\frac{1}{4}C_{12}^{xx})^2}{2(E_1^a-E_0^a)}, \quad (3.30)$$

і

$$\Psi_4^{ab} = \Psi_4^{(0)} + \frac{\left(\frac{1}{4}K_{21}^{xx}\Psi_{31}^{(0)} + \frac{1}{4}K_{11}^{xx}\Psi_{32}^{(0)}\right)}{(E_1^a - E_0^a) + (E_0^b - E_1^b)} + \frac{\frac{1}{4}C_{12}^{xx}}{2(E_1^a - E_0^a)}\Psi_0^{(0)}, \quad (3.31)$$

4) для терму $2E_1^a + E_1^b$ –

$$E_{02,01}^{inter}(R_{1^a},R_{2^a},R_{1^b}) = \frac{(\frac{1}{4}K_{21}^{xx})^2+(\frac{1}{4}K_{11}^{xx})^2}{(E_1^a-E_0^a)-(E_0^b-E_1^b)}+\frac{(\frac{1}{4}C_{12}^{xx})^2}{2(E_1^a-E_0^a)}, \quad (3.32)$$

і

$$\Psi_5^{ab} = \Psi_5^{(0)} + \frac{\left(\frac{1}{4}K_{21}^{xx}\Psi_{21}^{(0)} + \frac{1}{4}K_{11}^{xx}\Psi_{22}^{(0)}\right)}{(E_1^a - E_0^a) - (E_0^b - E_1^b)} + \frac{\frac{1}{4}C_{12}^{xx}}{2(E_1^a - E_0^a)}\Psi_1^{(0)}, \quad (3.33)$$

Для двократно вироджених термів отримаємо наступне:
1) для терму $E_0^a + E_1^a + E_0^b$ –

$$^1E_{11,10}^{inter}(R_{1^a},R_{2^a},R_{1^b}) = -\frac{1}{4}C_{12}^{xx}+\frac{(\frac{1}{4}K_{11}^{xx}-\frac{1}{4}K_{21}^{xx})^2}{2(E_1^a-E_0^a+E_0^b-E_1^b)} + \frac{(\frac{1}{4}K_{21}^{xx} - \frac{1}{4}K_{11}^{xx})^2}{2(E_0^a - E_1^a + E_0^b - E_1^b)}, \quad (3.34)$$

$$^2E_{11,10}^{inter}(R_{1^a},R_{2^a},R_{1^b}) = \frac{1}{4}C_{12}^{xx} + \frac{(E_0^b-E_1^b)}{(E_0^b-E_1^b)^2-(E_0^a-E_1^a)^2} \times \left(\frac{1}{4}K_{11}^{xx}+\frac{1}{4}K_{21}^{xx}\right)^2, \quad (3.35)$$

з відповідними хвильовими функціями, знайденими з точністю до першого порядку теорії збурень

$$\Psi_{21}^{ab} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{21}^{(0)} - \Psi_{22}^{(0)}) + \frac{\frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{1}{4}K_{11}^{xx} - \frac{1}{4}K_{21}^{xx})}{(E_1^a - E_0^a + E_0^b - E_1^b)}\Psi_1^{(0)} + \frac{\frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{1}{4}K_{21}^{xx} - \frac{1}{4}K_{11}^{xx})}{(E_0^a - E_1^a + E_0^b - E_1^b)}\Psi_5^{(0)}, \quad (3.36)$$

$$\Psi_{22}^{ab} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{21}^{(0)} + \Psi_{22}^{(0)}) + \frac{\frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{1}{4}K_{11}^{xx} + \frac{1}{4}K_{21}^{xx})}{(E_1^a - E_0^a + E_0^b - E_1^b)}\Psi_1^{(0)} + \frac{\frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{1}{4}K_{21}^{xx} + \frac{1}{4}K_{11}^{xx})}{(E_0^a - E_1^a + E_0^b - E_1^b)}\Psi_5^{(0)}; \quad (3.37)$$

2) для терму $E_0^a + E_1^a + E_1^b$ –

$$^1E_{11,01}^{inter}(R_{1^a},R_{2^a},R_{1^b}) = -\frac{1}{4}C_{12}^{xx} + \frac{(\frac{1}{4}K_{11}^{xx} - \frac{1}{4}K_{21}^{xx})^2}{2(E_1^a - E_0^a + E_1^b - E_0^b)} + \frac{(\frac{1}{4}K_{21}^{xx} - \frac{1}{4}K_{11}^{xx})^2}{2(E_0^a - E_1^a + E_1^b - E_0^b)}, \quad (3.38)$$

$$^2E_{11,01}^{inter}(R_{1^a},R_{2^a},R_{1^b}) = \frac{1}{4}C_{12}^{xx} + \frac{(E_1^b - E_0^b)}{(E_1^b - E_0^b)^2 - (E_1^a - E_0^a)^2} \times \left(\frac{1}{4}K_{11}^{xx} + \frac{1}{4}K_{21}^{xx}\right)^2, \quad (3.39)$$

і

$$\Psi_{31}^{ab} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{31}^{(0)} - \Psi_{32}^{(0)}) + \frac{\frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{1}{4}K_{11}^{xx} - \frac{1}{4}K_{21}^{xx})}{(E_1^a - E_0^a + E_1^b - E_0^b)}\Psi_0^{(0)} + \frac{\frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{1}{4}K_{21}^{xx} - \frac{1}{4}K_{11}^{xx})}{(E_0^a - E_1^a + E_1^b - E_0^b)}\Psi_4^{(0)}, \quad (3.40)$$

$$\Psi_{32}^{ab} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{31}^{(0)} + \Psi_{32}^{(0)}) + \frac{\frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{1}{4}K_{11}^{xx} + \frac{1}{4}K_{21}^{xx})}{(E_1^a - E_0^a + E_1^b - E_0^b)}\Psi_0^{(0)} + \frac{\frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{1}{4}K_{21}^{xx} + \frac{1}{4}K_{11}^{xx})}{(E_0^a - E_1^a + E_1^b - E_0^b)}\Psi_4^{(0)}. \quad (3.41)$$

Для тричастинкової групи $N^a = 1$, $N^b = 2$ гамільтоніан взаємодії має вигляд

$$\hat{H} = (E_0^b+E_1^b)+\frac{1}{2}(E_0^a+E_1^a)+(E_1^a-E_0^a)\hat{S}_{1^a}^z+(E_1^b-E_0^b) \times (\hat{\Sigma}_{1^b}^z+\hat{\Sigma}_{2^b}^z)+D_{12}^{xx}\hat{\Sigma}_{1^b}^x\hat{\Sigma}_{2^b}^x+K_{11}^{xx}\hat{S}_{1^a}^x\hat{\Sigma}_{1^b}^x+K_{12}^{xx}\hat{S}_{1^a}^x\hat{\Sigma}_{2^b}^x, \quad (3.42)$$

а власні функції та власні значення незбуреної задачі для даної тричастинкової групи:

$$
\begin{aligned}
\Psi_0^{(0)} &= \mid 0_{1^a}\rangle \mid 0_{1^b}\rangle \mid 0_{2^b}\rangle, \qquad \varepsilon_0^{(0)} = E_0^a + 2E_0^b,\\
\Psi_1^{(0)} &= \mid 1_{1^a}\rangle \mid 0_{1^b}\rangle \mid 0_{2^b}\rangle, \qquad \varepsilon_1^{(0)} = E_1^a + 2E_0^b,\\
\Psi_{21}^{(0)} &= \mid 0_{1^a}\rangle \mid 1_{1^b}\rangle \mid 0_{2^b}\rangle, \quad \varepsilon_2^{(0)} = E_0^a + E_0^b + E_1^b,\\
\Psi_{22}^{(0)} &= \mid 0_{1^a}\rangle \mid 0_{1^b}\rangle \mid 1_{2^b}\rangle,\\
\Psi_{31}^{(0)} &= \mid 1_{1^a}\rangle \mid 1_{1^b}\rangle \mid 0_{2^b}\rangle, \quad \varepsilon_3^{(0)} = E_1^a + E_0^b + E_1^b,\\
\Psi_{32}^{(0)} &= \mid 1_{1^a}\rangle \mid 0_{1^b}\rangle \mid 1_{2^b}\rangle,\\
\Psi_4^{(0)} &= \mid 0_{1^a}\rangle \mid 1_{1^b}\rangle \mid 1_{2^b}\rangle, \qquad \varepsilon_4^{(0)} = E_0^a + 2E_1^b,\\
\Psi_5^{(0)} &= \mid 1_{1^a}\rangle \mid 1_{1^b}\rangle \mid 1_{2^b}\rangle, \qquad \varepsilon_5^{(0)} = E_1^a + 2E_1^b.
\end{aligned}
\tag{3.43}
$$

Ефективні енергії міжчастинкових взаємодій, знайдені з точністю до другого порядку теорії збурень і відповідні їм хвильові функції, знайдені з точністю до першого порядку теорії збурень мають вигляд:

1) для терму $E_0^a + 2E_0^b$ –

$$
E_{10,20}^{inter}(R_{1^a}, R_{1^b}, R_{2^b}) = \frac{(\frac14 K_{11}^{xx})^2 + (\frac14 K_{12}^{xx})^2}{(E_0^a - E_1^a) + (E_0^b - E_1^b)} + \frac{(\frac14 D_{12}^{xx})^2}{2(E_0^b - E_1^b)}, \tag{3.44}
$$

і

$$
\Psi_0^{ba} = \Psi_0^{(0)} + \frac{\left(\frac14 K_{11}^{xx}\Psi_{31}^{(0)} + \frac14 K_{12}^{xx}\Psi_{32}^{(0)}\right)}{(E_0^a - E_1^a) + (E_0^b - E_1^b)} + \frac{\frac14 D_{12}^{xx}}{2(E_0^b - E_1^b)}\Psi_4^{(0)}, \tag{3.45}
$$

2) для терму $E_1^a + 2E_0^b$ –

$$
E_{01,20}^{inter}(R_{1^a}, R_{1^b}, R_{2^b}) = \frac{(\frac14 K_{11}^{xx})^2 + (\frac14 K_{12}^{xx})^2}{(E_1^a - E_0^a) + (E_0^b - E_1^b)} + \frac{(\frac14 D_{12}^{xx})^2}{2(E_0^b - E_1^b)}, \tag{3.46}
$$

і

$$
\Psi_1^{ba} = \Psi_1^{(0)} + \frac{\left(\frac14 K_{11}^{xx}\Psi_{21}^{(0)} + \frac14 K_{12}^{xx}\Psi_{22}^{(0)}\right)}{(E_1^a - E_0^a) + (E_0^b - E_1^b)} + \frac{\frac14 D_{12}^{xx}}{2(E_0^b - E_1^b)}\Psi_5^{(0)}, \tag{3.47}
$$

3) для терму $E_0^a + 2E_1^b$ –

$$
E_{10,02}^{inter}(R_{1^a}, R_{1^b}, R_{2^b}) = \frac{(\frac14 K_{12}^{xx})^2 + (\frac14 K_{11}^{xx})^2}{(E_0^a - E_1^a) + (E_1^b - E_0^b)} + \frac{(\frac14 D_{12}^{xx})^2}{2(E_1^b - E_0^b)}, \tag{3.48}
$$

і

$$
\Psi_4^{ba} = \Psi_4^{(0)} + \frac{\left(\frac14 K_{12}^{xx}\Psi_{31}^{(0)} + \frac14 K_{11}^{xx}\Psi_{32}^{(0)}\right)}{(E_0^a - E_1^a) + (E_1^b - E_0^b)} + \frac{\frac14 D_{12}^{xx}}{2(E_1^b - E_0^b)}\Psi_0^{(0)}, \tag{3.49}
$$

4) для терму $E_1^a + 2E_1^b$ –

$$
E_{01,02}^{inter}(R_{1^a}, R_{1^b}, R_{2^b}) = \frac{(\frac14 K_{12}^{xx})^2 + (\frac14 K_{11}^{xx})^2}{(E_1^a - E_0^a) + (E_1^b - E_0^b)} + \frac{(\frac14 D_{12}^{xx})^2}{2(E_1^b - E_0^b)}, \tag{3.50}
$$

і

$$
\Psi_5^{ba} = \Psi_5^{(0)} + \frac{\left(\frac14 K_{12}^{xx}\Psi_{21}^{(0)} + \frac14 K_{11}^{xx}\Psi_{22}^{(0)}\right)}{(E_1^a - E_0^a) + (E_1^b - E_0^b)} + \frac{\frac14 D_{12}^{xx}}{2(E_1^b - E_0^b)}\Psi_1^{(0)}, \tag{3.51}
$$

Для двократно вироджених термів отримаємо наступне:

1) для терму $E_0^a + E_0^b + E_1^b$ –

$$
\begin{aligned}
{}^1E_{10,11}^{inter}(R_{1^a}, R_{1^b}, R_{2^b}) = -\frac{1}{4}D_{12}^{xx} + \frac{(\frac14 K_{11}^{xx} - \frac14 K_{12}^{xx})^2}{2(E_0^a - E_1^a + E_1^b - E_0^b)} +\\
\frac{(\frac14 K_{12}^{xx} - \frac14 K_{11}^{xx})^2}{2(E_0^a - E_1^a + E_0^b - E_1^b)},
\end{aligned}
\tag{3.52}
$$

$$
\begin{aligned}
{}^2E_{10,11}^{inter}(R_{1^a}, R_{1^b}, R_{2^b}) = \frac{1}{4}D_{12}^{xx} + \frac{(E_0^a - E_1^a)}{(E_0^a - E_1^a)^2 - (E_0^b - E_1^b)^2} \times\\
\times \left(\frac{1}{4}K_{11}^{xx} + \frac{1}{4}K_{12}^{xx}\right)^2,
\end{aligned}
\tag{3.53}
$$

і

$$
\begin{aligned}
\Psi_{21}^{ba} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{21}^{(0)} - \Psi_{22}^{(0)}) + \frac{\frac{1}{\sqrt2}(\frac14 K_{11}^{xx} - \frac14 K_{12}^{xx})}{(E_0^a - E_1^a + E_1^b - E_0^b)}\Psi_1^{(0)} +\\
\frac{\frac{1}{\sqrt2}(\frac14 K_{12}^{xx} - \frac14 K_{11}^{xx})}{(E_0^a - E_1^a + E_0^b - E_1^b)}\Psi_5^{(0)},
\end{aligned}
\tag{3.54}
$$

$$
\begin{aligned}
\Psi_{22}^{ba} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{21}^{(0)} + \Psi_{22}^{(0)}) + \frac{\frac{1}{\sqrt2}(\frac14 K_{11}^{xx} + \frac14 K_{12}^{xx})}{(E_0^a - E_1^a + E_1^b - E_0^b)}\Psi_1^{(0)} +\\
\frac{\frac{1}{\sqrt2}(\frac14 K_{12}^{xx} + \frac14 K_{11}^{xx})}{(E_0^a - E_1^a + E_0^b - E_1^b)}\Psi_5^{(0)};
\end{aligned}
\tag{3.55}
$$

2) для терму $E_1^a + E_0^b + E_1^b$ –

$$^1E^{inter}_{01,11}(R_{1^a},R_{1^b},R_{2^b}) = -\frac{1}{4}D^{xx}_{12} + \frac{(\frac{1}{4}K^{xx}_{11} - \frac{1}{4}K^{xx}_{12})^2}{2(E_1^a - E_0^a + E_1^b - E_0^b)} + \frac{(\frac{1}{4}K^{xx}_{12} - \frac{1}{4}K^{xx}_{11})^2}{2(E_1^a - E_0^a + E_0^b - E_1^b)}, \tag{3.56}$$

$$^2E^{inter}_{01,11}(R_{1^a},R_{1^b},R_{2^b}) = \frac{1}{4}D^{xx}_{12} + \frac{(E_1^a - E_0^a)}{(E_1^a - E_0^a)^2 - (E_1^b - E_0^b)^2} \times \times \left(\frac{1}{4}K^{xx}_{11} + \frac{1}{4}K^{xx}_{12}\right)^2, \tag{3.57}$$

і

$$\Psi^{ba}_{31} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi^{(0)}_{31} - \Psi^{(0)}_{32}) + \frac{\frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{1}{4}K^{xx}_{11} - \frac{1}{4}K^{xx}_{12})}{(E_1^a - E_0^a + E_1^b - E_0^b)}\Psi^{(0)}_0 + \frac{\frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{1}{4}K^{xx}_{12} - \frac{1}{4}K^{xx}_{11})}{(E_1^a - E_0^a + E_0^b - E_1^b)}\Psi^{(0)}_4, \tag{3.58}$$

$$\Psi^{ba}_{32} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi^{(0)}_{31} + \Psi^{(0)}_{32}) + \frac{\frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{1}{4}K^{xx}_{11} + \frac{1}{4}K^{xx}_{12})}{(E_1^a - E_0^a + E_1^b - E_0^b)}\Psi^{(0)}_0 + \frac{\frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{1}{4}K^{xx}_{12} + \frac{1}{4}K^{xx}_{11})}{(E_1^a - E_0^a + E_0^b - E_1^b)}\Psi^{(0)}_4. \tag{3.59}$$

Отримані у цьому розділі формули визначають власні функції та власні значення гамільтоніану взаємодії двокомпонентної ЧЗСГ з точністю до другого порядку теорії збурень.

4. Ефективні взаємодії у дво- та тричастинкових групах двокомпонентної ЧЗСГ. Точний розв'язок

Знайти власні функції та власні значення гамільтоніану (2.16) електронної задачі можна точно, без використання теорії збурень. Для цього, як і в попередньому розділі, за базисні вибиремо $2^{N^a+N^b}$ функцій типу

$$\begin{aligned}
&| 1\rangle =| 0_{1^a}\rangle \, | 0_{2^a}\rangle \dots | 0_{N^a}\rangle \, | 0_{1^b}\rangle \dots | 0_{N^b}\rangle, \\
&| 2\rangle =| 1_{1^a}\rangle \, | 0_{2^a}\rangle \dots | 0_{N^a}\rangle \, | 0_{1^b}\rangle \dots | 0_{N^b}\rangle, \\
&| 3\rangle =| 0_{1^a}\rangle \, | 1_{2^a}\rangle \dots | 0_{N^a}\rangle \, | 0_{1^b}\rangle \dots | 0_{N^b}\rangle, \\
&\vdots \\
&| 2^{N^a+N^b}\rangle =| 1_{1^a}\rangle \dots | 1_{N^a}\rangle \, | 1_{1^b}\rangle \dots | 1_{N^b}\rangle,
\end{aligned} \tag{4.1}$$

котрі збудовані з власних функцій операторів $\hat{h}^a_n$, $\hat{h}^b_n$. За цими базисними функціями розкладемо шукану власну функцію гамільтоніану (2.16)

$$\Psi_n(1^a,\dots,N^a,1^b,\dots,N^b) = \sum_{m=1}^{2^{N^a+N^b}} U_{nm} \mid m\rangle. \tag{4.2}$$

Докладно розглянемо випадок двосортних дво- та тричастинкових груп, а для односортних подамо лише кінцеві результати, оскільки вони відтворюють результати, що були отримані раніше.

Наприклад, у випадку двочастинкової групи, що містить частинки двох сортів ($N^a = 1$, $N^b = 1$), вихідний гамільтоніан має вигляд (3.1), (3.2). В якості базисних вибиремо функції

$$\begin{aligned}
&| 1\rangle =| 0_{1^a}\rangle \, | 0_{1^b}\rangle, \quad | 2\rangle =| 1_{1^a}\rangle \, | 0_{1^b}\rangle, \\
&| 3\rangle =| 0_{1^a}\rangle \, | 1_{1^b}\rangle, \quad | 4\rangle =| 1_{1^a}\rangle \, | 1_{1^b}\rangle.
\end{aligned} \tag{4.3}$$

Розкладаючи по (4.3) згідно з (4.2) власну функцію цього гамільтоніану, отримаємо таку систему рівнянь:

$$\sum_{m=1}^{N^a+N^b} (\langle k \mid \hat{H} \mid m\rangle - \varepsilon_n\delta_{km})U_{nm} = 0, \ k = 1,\dots,2^{N^a+N^b}. \tag{4.4}$$

З умови існування нетривіального розв'язку (4.4)

$$det \parallel \langle k \mid \hat{H} \mid m\rangle - \varepsilon_n\delta_{km} \parallel = 0 \tag{4.5}$$

можна визначити власні значення ε, а потім згідно з (4.4) власні функції. Матричні елементи $\langle k \mid \hat{H} \mid m\rangle$ можна легко визначити, беручи до уваги дію операторів $\hat{S}^x_n$, $\hat{S}^z_n$ та $\hat{\Sigma}^x_n$, $\hat{\Sigma}^z_n$. Враховуючи (4.3), отримаємо сукупність двох квадратних рівнянь, розв'язки котрих є власними значеннями гамільтоніану електронної задачі. Використовуючи їх, знаходимо ефективні взаємодії в розглядуваних групах. Отже,

$$\varepsilon_1(1^a,1^b) = \frac{E_0^a + E_1^a}{2} + \frac{E_0^b + E_1^b}{2} - \sqrt{\left(\frac{E_1^a - E_0^a}{2} + \frac{E_1^b - E_0^b}{2}\right)^2 + \frac{1}{16}(K^{xx}_{1^a1^b})^2}, \tag{4.6}$$

$$\varepsilon_2(1^a,1^b) = \frac{E_0^a+E_1^a}{2} + \frac{E_0^b+E_1^b}{2} - \sqrt{\left(\frac{E_1^a-E_0^a}{2} - \frac{E_1^b-E_0^b}{2}\right)^2 + \frac{1}{16}(K^{xx}_{1^a1^b})^2}, \tag{4.7}$$

$$\varepsilon_3(1^a,1^b) = \frac{E_0^a+E_1^a}{2} + \frac{E_0^b+E_1^b}{2} + \sqrt{\left(\frac{E_1^a-E_0^a}{2} - \frac{E_1^b-E_0^b}{2}\right)^2 + \frac{1}{16}(K^{xx}_{1^a1^b})^2}, \tag{4.8}$$

$$\varepsilon_4(1^a,1^b) = \frac{E_0^a+E_1^a}{2} + \frac{E_0^b+E_1^b}{2} + \tag{4.9}$$

$$\sqrt{\left(\frac{E_1^a-E_0^a}{2} + \frac{E_1^b-E_0^b}{2}\right)^2 + \frac{1}{16}(K^{xx}_{1^a1^b})^2}, \tag{4.10}$$

В дипольному наближенні $K^{xx}_{1^a1^b} = 4(p_a p_b/R^3_{n^a m^b}) \times \Phi_{ab}(\Omega_{p_a},\Omega_{p_b})$, де p_a, p_b- величини матричних елементів електричного дипольного переходу, а $\Phi_{ab}(\Omega_{p_n},\Omega_{p_m})$ - функція орієнтації дипольних моментів переходу n-ої сорту a та m-ої частинок сорту b. В подальшому для спрощення обчислень вважатимемо, що $\Phi_{ab}(\Omega_{p_n},\Omega_{p_m}) = 1$.

Відповідні двочастинкові ефективні взаємодії мають вигляд:

$$E^{inter}_{10,10}(R_{1^a},R_{1^b}) = \left(\frac{E_1^a-E_0^a}{2} + \frac{E_1^b-E_0^b}{2}\right) \times$$

$$\times \left(1 - \sqrt{1 + \left(\frac{1}{4}K^{xx}_{1^a1^b}\right)^2 \Big/ \left(\frac{E_1^a-E_0^a}{2} + \frac{E_1^b-E_0^b}{2}\right)^2}\right),$$

$$E^{inter}_{10,01}(R_{1^a},R_{1^b}) = \left(\frac{E_1^a-E_0^a}{2} - \frac{E_1^b-E_0^b}{2}\right) \times$$

$$\times \left(1 - \sqrt{1 + \left(\frac{1}{4}K^{xx}_{1^a1^b}\right)^2 \Big/ \left(\frac{E_1^a-E_0^a}{2} - \frac{E_1^b-E_0^b}{2}\right)^2}\right),$$

$$E^{inter}_{10,01}(R_{1^a},R_{1^b}) = -\left(\frac{E_1^a-E_0^a}{2} - \frac{E_1^b-E_0^b}{2}\right) \times$$

$$\times \left(1 - \sqrt{1 + \left(\frac{1}{4}K^{xx}_{1^a1^b}\right)^2 \Big/ \left(\frac{E_1^a-E_0^a}{2} - \frac{E_1^b-E_0^b}{2}\right)^2}\right),$$

$$E^{inter}_{10,10}(R_{1^a},R_{1^b}) = -\left(\frac{E_1^a-E_0^a}{2} + \frac{E_1^b-E_0^b}{2}\right) \times$$

$$\times \left(1 - \sqrt{1 + \left(\frac{1}{4}K^{xx}_{1^a1^b}\right)^2 \Big/ \left(\frac{E_1^a-E_0^a}{2} + \frac{E_1^b-E_0^b}{2}\right)^2}\right), \tag{4.11}$$

Як видно з формул (4.11) у двочастинкових двосортних групах різнозбуджених частинок резонансні диполь-дипольні взаємодії не виникають, на відміну від односортних груп [5].

З двох можливих видів тричастинкових груп двокомпонентної ЧЗСГ ($N^a = 2$, $N^b = 1$ та $N^a = 1$, $N^b = 2$) розглянемо спочатку першу. Гамільтоніан такої системи має вигляд (3.24). З (4.1) в якості базисних вибиремо такий набір функцій:

$$\begin{aligned}
&\mid 1\rangle = \mid 0_{1^a}\rangle \mid 0_{2^a}\rangle \mid 0_{1^b}\rangle, \quad \mid 2\rangle = \mid 1_{1^a}\rangle \mid 0_{2^a}\rangle \mid 0_{1^b}\rangle,\\
&\mid 3\rangle = \mid 0_{1^a}\rangle \mid 1_{2^a}\rangle \mid 0_{1^b}\rangle, \quad \mid 4\rangle = \mid 0_{1^a}\rangle \mid 0_{2^a}\rangle \mid 1_{1^b}\rangle,\\
&\mid 5\rangle = \mid 1_{1^a}\rangle \mid 1_{2^a}\rangle \mid 0_{1^b}\rangle, \quad \mid 6\rangle = \mid 1_{1^a}\rangle \mid 0_{2^a}\rangle \mid 1_{1^b}\rangle,\\
&\mid 7\rangle = \mid 0_{1^a}\rangle \mid 1_{2^a}\rangle \mid 1_{1^b}\rangle, \quad \mid 8\rangle = \mid 1_{1^a}\rangle \mid 1_{2^a}\rangle \mid 1_{1^b}\rangle.
\end{aligned} \tag{4.12}$$

Система рівнянь (4.4) для даних базисних функцій розпадається на дві системи чотирьох рівнянь, з яких, враховуючи умову нетривіального розв'язку

$$\det \begin{Vmatrix} H_{88}-\varepsilon & \frac14 K^{xx}_{21} & \frac14 K^{xx}_{11} & \frac14 C^{xx}_{12} \\ \frac14 K^{xx}_{21} & H_{22}-\varepsilon & \frac14 C^{xx}_{12} & \frac14 K^{xx}_{11} \\ \frac14 K^{xx}_{11} & \frac14 C^{xx}_{12} & H_{33}-\varepsilon & \frac14 K^{xx}_{21} \\ \frac14 C^{xx}_{12} & \frac14 K^{xx}_{11} & \frac14 K^{xx}_{21} & H_{44}-\varepsilon \end{Vmatrix} = 0,$$

$$\det \begin{Vmatrix} H_{55}-\varepsilon & \frac{1}{4}K_{21}^{xx} & \frac{1}{4}K_{11}^{xx} & \frac{1}{4}C_{12}^{xx} \\ \frac{1}{4}K_{21}^{xx} & H_{66}-\varepsilon & \frac{1}{4}C_{12}^{xx} & \frac{1}{4}K_{11}^{xx} \\ \frac{1}{4}K_{11}^{xx} & \frac{1}{4}C_{12}^{xx} & H_{77}-\varepsilon & \frac{1}{4}K_{21}^{xx} \\ \frac{1}{4}C_{12}^{xx} & \frac{1}{4}K_{11}^{xx} & \frac{1}{4}K_{21}^{xx} & H_{11}-\varepsilon \end{Vmatrix} = 0,$$

отримуємо власні значення гамільтоніану (3.24). Ці власні значення визначають всі вісім можливих ефективних взаємодій, що виникають в розглядуваній тричастинковій групі двокомпонентної ЧЗСГ.

Для тричастинкових груп двокомпонентної ЧЗСГ виду $N^a = 1,\ N^b = 2$ в якості базисних вибиремо такі вісім функцій:

$$\begin{aligned} &|\,1\rangle =|\,0_{1^a}\rangle\,|\,0_{1^b}\rangle\,|\,0_{2^b}\rangle, \quad |\,2\rangle =|\,1_{1^a}\rangle\,|\,0_{1^b}\rangle\,|\,0_{2^b}\rangle, \\ &|\,3\rangle =|\,0_{1^a}\rangle\,|\,1_{1^b}\rangle\,|\,0_{2^b}\rangle, \quad |\,4\rangle =|\,0_{1^a}\rangle\,|\,0_{1^b}\rangle\,|\,1_{2^b}\rangle, \\ &|\,5\rangle =|\,1_{1^a}\rangle\,|\,1_{1^b}\rangle\,|\,0_{2^b}\rangle, \quad |\,6\rangle =|\,1_{1^a}\rangle\,|\,0_{1^b}\rangle\,|\,1_{2^b}\rangle, \\ &|\,7\rangle =|\,0_{1^a}\rangle\,|\,1_{1^b}\rangle\,|\,1_{2^b}\rangle, \quad |\,8\rangle =|\,1_{1^a}\rangle\,|\,1_{1^b}\rangle\,|\,1_{2^b}\rangle. \end{aligned} \tag{4.13}$$

Гамільтоніан взаємодії має вигляд (3.42). Власні значення для цього гамільтоніану є розв'язками двох систем чотирьох рівнянь, умовою нетривіального розв'язку котрих є:

$$\det \begin{Vmatrix} H_{88}-\varepsilon & \frac{1}{4}D_{12}^{xx} & \frac{1}{4}K_{12}^{xx} & \frac{1}{4}K_{11}^{xx} \\ \frac{1}{4}D_{12}^{xx} & H_{22}-\varepsilon & \frac{1}{4}K_{11}^{xx} & \frac{1}{4}K_{12}^{xx} \\ \frac{1}{4}K_{12}^{xx} & \frac{1}{4}K_{11}^{xx} & H_{33}-\varepsilon_3 & \frac{1}{4}D_{12}^{xx} \\ \frac{1}{4}K_{11}^{xx} & \frac{1}{4}K_{12}^{xx} & \frac{1}{4}D_{12}^{xx} & H_{44}-\varepsilon \end{Vmatrix} = 0,$$

$$\det \begin{Vmatrix} H_{55}-\varepsilon & \frac{1}{4}D_{12}^{xx} & \frac{1}{4}K_{12}^{xx} & \frac{1}{4}K_{11}^{xx} \\ \frac{1}{4}D_{12}^{xx} & H_{66}-\varepsilon & \frac{1}{4}K_{11}^{xx} & \frac{1}{4}K_{12}^{xx} \\ \frac{1}{4}K_{12}^{xx} & \frac{1}{4}K_{11}^{xx} & H_{77}-\varepsilon & \frac{1}{4}D_{12}^{xx} \\ \frac{1}{4}K_{11}^{xx} & \frac{1}{4}K_{12}^{xx} & \frac{1}{4}D_{12}^{xx} & H_{11}-\varepsilon \end{Vmatrix} = 0. \tag{4.14}$$

Ці власні значення визначають вісім можливих ефективних взаємодій, що виникають у тричастинковій групі $N^a = 1,\ N^b = 2$.

Розв'язок задачі про знаходження власних значень та власних функцій гамільтоніану взаємодії для дво- та тричастинкових груп, що складаються з частинок одного сорту відповідає результатам, отриманим у [4-6]. Тому подамо для цих випадків лише окремі кінцеві результати.

Зокрема, для двочастинкових груп ЧЗСГ, що складаються лише з частинок сорту a отримуємо такі результати для ефективних міжчастинкових взаємодій:

$$E_{20,00}^{inter}(R_{1^a},R_{2^a}) \equiv \varepsilon_1(1^a,2^a) - 2E_0^a = (E_1^a - E_0^a)\left(1 - \sqrt{1 + \left(\frac{1}{4}C_{21}^{xx}\right)^2 / (E_1^a - E_0^a)^2}\right), \tag{4.15}$$

$${}^1E_{11,00}^{inter}(R_{1^a},R_{2^a}) \equiv \varepsilon_2(1^a,2^a) - E_0^a - E_1^a = \frac{1}{4}C_{21}^{xx}, \tag{4.16}$$

$${}^2E_{11,00}^{inter}(R_{1^a},R_{2^a}) \equiv \varepsilon_3(1^a,2^a) - E_0^a - E_1^a = -\frac{1}{4}C_{21}^{xx}, \tag{4.17}$$

$$E_{02,00}^{inter}(R_{1^a},R_{2^a}) \equiv \varepsilon_4(1^a,2^a) - 2E_1^a = (E_1^a - E_0^a)\left(1 + \sqrt{1 + \left(\frac{1}{4}C_{21}^{xx}\right)^2 / (E_1^a - E_0^a)^2}\right). \tag{4.18}$$

В дипольному наближенні для операторного заряду $C_{12}^{xx} = 4(p_a^2/R_{nm}^3) \times \Phi_a(\Omega_{p_n},\Omega_{p_m})$, де p_a - величина матричного елементу електричного дипольного переходу, а $\Phi_a(\Omega_{p_n},\Omega_{p_m})$ - функція орієнтації дипольних моментів переходу n-ої та m-ої частинок сорту a. В подальшому для спрощення обчислень вважатимемо, що $\Phi_a(\Omega_{p_n},\Omega_{p_m}) = 1$.

У випадку групи трьох частинок сорту a система рівнянь (4.5) перетвориться на сукупність двох систем четвертого порядку з умовою нетривіального розв'язку

$$\det\begin{Vmatrix} H_{11}-\varepsilon & \frac{1}{4}C_{23}^{xx} & \frac{1}{4}C_{13}^{xx} & \frac{1}{4}C_{12}^{xx} \\ \frac{1}{4}C_{23}^{xx} & H_{22}-\varepsilon & \frac{1}{4}C_{12}^{xx} & \frac{1}{4}C_{13}^{xx} \\ \frac{1}{4}C_{13}^{xx} & \frac{1}{4}C_{12}^{xx} & H_{33}-\varepsilon & \frac{1}{4}C_{23}^{xx} \\ \frac{1}{4}C_{12}^{xx} & \frac{1}{4}C_{13}^{xx} & \frac{1}{4}C_{23}^{xx} & H_{44}-\varepsilon \end{Vmatrix} = 0,$$

$$\det\begin{Vmatrix} H_{55}-\varepsilon & \frac{1}{4}C_{23}^{xx} & \frac{1}{4}C_{13}^{xx} & \frac{1}{4}C_{12}^{xx} \\ \frac{1}{4}C_{23}^{xx} & H_{66}-\varepsilon & \frac{1}{4}C_{12}^{xx} & \frac{1}{4}C_{13}^{xx} \\ \frac{1}{4}C_{13}^{xx} & \frac{1}{4}C_{12}^{xx} & H_{77}-\varepsilon & \frac{1}{4}C_{23}^{xx} \\ \frac{1}{4}C_{12}^{xx} & \frac{1}{4}C_{13}^{xx} & \frac{1}{4}C_{23}^{xx} & H_{88}-\varepsilon \end{Vmatrix} = 0 \qquad (4.19)$$

Розв'язки цих двох рівнянь є власними значеннями гамільтоніану електронної задачі, використовуючи котрі, можна знайти ефективні взаємодії у групах трьох частинок сорту a.

Подібні результати отримуємо і для дво- та тричастинкових груп, що складаються лише з частинок сорту b.

5. Обговорення одержаних результатів

Перейдемо до обговорення результатів дослідження ефективних міжчастинкових взаємодій у групах двокомпонентної частково збудженої суміші газів. Зупинимось спочатку на результатах для двочастинкових груп ЧЗСГ. Як було сказано вище, для односортних двочастинкових груп результати досліджень відповідають отриманим у [5]. Вони свідчать про те, що в таких групах резонансні диполь–дипольні взаємодії виникають лише у групах різнозбуджених частинок, наприклад, $N_0^a = 1$ і $N_1^a = 1$ або $N_0^b = 1$ і $N_1^b = 1$ (треті члени у (3.19) та (3.20) і формули (4.16), (4.17)). Ці взаємодії виникають уже в першому порядку теорії збурень. Якщо ж розглянути випадок $N^a = 1$, $N^b = 1$, то видно, що РДДВ у таких групах відсутні, навіть у випадку, коли частинки різних сортів знаходяться у різних електронних станах (3.6), (3.8), (3.10), (3.12) і (4.11). Цей факт можна пояснити тим, що РДДВ виникають у групах тотожних різнозбуджених частинок, а оскільки ми маємо не тотожні частинки різних сортів, то як і слід було очікувати, РДДВ в таких двочастинкових групах не виникають.

Перейдемо до результатів аналітичного та числового дослідження ефективних міжчастинкових взаємодій у тричастинкових групах розглядуваної ЧЗСГ. Введемо одиниці довжини σ_a та σ_b (радіуси частинок обох сортів) та одиниці енергії $p_a^2/(2\sigma_a)^3$, $p_b^2/(2\sigma_b)^3$ та $p_a p_b/(\sigma_a+\sigma_b)^3$. Оскільки ми використовуємо дворівневе наближення, то параметри, що характерезують атом підбиралися [11] таким чином, щоб вони як найточніше відповідали реальним атомам. Зокрема, параметри для частинок сорту a приблизно описують атом ртуті, а параметри для частинок сорту b – атом цезію. Це пов'язано із тим, що існують експериментальні роботи про дослідження резонансно опромінених парів ртуті та цезію [12,13]. Вважалося також, що тричастинкові групи володіють симетрією рівностороннього трикутника для односортних груп та симетрією рівнобедреного трикутника для двосортних груп. На рис.1–6 кут θ – кут при основі рівнобедреного (рівностороннього) трикутника. Коли одна із частинок віддаляється на безмежність, то $\theta \to \pi/2$.

Для тричастинкових односортних груп ми отримуємо результати, що відповідають [5,6]. Нагадаємо лише, що РДДВ у таких групах мають неадитивний та багаточастинковий характер. Числові розрахунки показують, що при віддаленні однієї із частинок на безмежність РДДВ переходить у енергію взаємодії ван–дер–Ваальса двох незбуджених (збуджених) частинок (рис.1,2).

Коли у групі трьох частинок сорту a одну поміняти на частинку сорту b, то характер ефективних міжчастинкових взаємодій міняється. Резонансні диполь–дипольні взаємодії виникають лише між частинками сорту a (є два двократно вироджених таких терми $N_0^a + N_1^a + N_0^b$ та $N_0^a + N_1^a + N_1^b$) (3.34), (3.35), (3.38), (3.39). Присутність же збудженої чи незбудженої частинки сорту b не викликає появи РДДВ. Між різносортними частинками існують лише дисперсні взаємодії (ван–дер–Ваальсові взаємодії), тобто відсутні поправки до ефективної міжчастинкової енергії взаємодії у першому порядку теорії збурень типу C_{12}^{xx} та D_{12}^{xx}. На рис.3 зображено результати числового дослідження ефективних міжчастинкових взаємодій у групах типу $N^a = 2, N^b = 1$ з однією збудженою частинкою, коли на безмежність віддаляється одна із частинок сорту a. Видно, що коли частинки сорту a знаходяться поряд (мале значення кута θ), РДДВ дають значний внесок у міжчастинкові взаємодії (суцільні криві). Коли ж відстань між частинками сорту a прямує до нескінченості, то ефективні взаємодії мають характер взаємодій ван–дер–Ваальса. Для термів, у яких частинки одного сорту знаходяться в однаковому електронному стані, ефективні міжчастинкові взаємодії не містять внесків від РДДВ. На рис.4. зображені ефективні міжчастинкові взаємодії, що виникають у розглядуваних групах, коли на безмежність віддаляється частинка сорту b. Якісно отримуємо такі ж результати, як і на рис.3. Знову ж таки РДДВ проявляються у групах, що містять односортні частинки у різнозбуджених електронних станах. Кількісно результати відрізняються, оскільки в даному випадку інша відстань між частинками одного та різних сортів.

На рис.5,6 зображені ефективні міжчастинкові взаємодії у тричастинкових групах типу $N^a = 1, N^b = 2$ з однією збудженою частинкою, коли віддаляються не безмежність частинки сорту a та b, відповідно. Характер цих взаємодій такий же, як і в попередніх групах. Особливістю є те, що (рис.5) при малих відстанях між частинками сорту b взаємодії мають характер притягання (суцільні криві) та характер відштовхування (пунктирні криві). Це пов'язано із величинами параметрів для атомів Hg та Cs, котрі використовуються для розрахунків. Зокрема, у (3.53) другий член при малих відстанях між частинками сорту b від'ємний і більший за модулем від першого. Це може мати вплив на рівноважні термодинамічні та структурні властивості двокомпонентної ЧЗСГ.

Аналогічні до вищевказаних отримуємо результати для термів груп, що містять дві збуджені частинки.

Підсумовуючи, можна зазначити, що резонансні диполь–дипольні взаємодії дають значний внесок у ефективні міжчастинкові взаємодії, а отже і на рівноважні властивості частково збуджених систем. Суттєво, що виникають РДДВ лише між різнозбудженими частинками одного сорту і не виникають між різнозбудженими частинками різних сортів.

Автори висловлюють подяку ст.н.сп. ІФКС НАН України О. Держку за допомогу при виконанні даної роботи.

Література

[1] Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: Издательство иностранной литературы, 1961, 932 с.

[2] Мальнев В. Н., Пекар С. И. Межмолекулярное взаимодействие и уравнение состояния высоковозбужденного газа. // ЖЭТФ, 1966, т.51, N 6, с.1811–1820.

[3] Мальнев В. Н., Пекар С. И. К теории межмолекулярного взаимодействия и уравнения состояния возбужденного газа. // ЖЭТФ, 1970, т.58, N 3, с.1113-1118.

[4] Юхновский И. Р., Кадобянский Р. Н. Эффективные взаимодействия в группах нейтральных атомов, часть из которых возбуждена. Киев, 1974, 31 с. (Препринт/АН УССР, ИТФ; ИТФ-74-147Р).

[5] Юхновский И. Р., Левицкий Р. Р., Держко О. В. К статистической теории частично возбужденных систем. Псевдоспиновый формализм для электронной задачи. Киев, 1984, 45 с. (Препринт/АН УССР, ИТФ;ИТФ-83-161Р).

[6] Юхновский И. Р., Кадобянский Р. Н., Левицкий Р. Р., Держко О. В. Эффективные взаимодействия в группах тождественных частиц, часть из которых возбуждена. //УФЖ, 1989, т.34, N 2, с.300-307.

[7] Derzhko O., Levitskii R., Chernyavskii O. Equilibrium properties of the gas of atoms of which a part is excited within cluster expansion method. //Condensed Matter Physics, 1995, N.6, p.34–48.

[8] Юхновський І. Р., Держко О. В., Чернявський О. І., Левицький Р. Р. Рівноважні властивості двокомпонентної суміші газів, що містить частинки у збуджених електронних станах, у методі групових розвинень. І. Термодинамічні властивості. Київ, 1991, 48 с. (Препринт/АН УРСР, ІТФ; ІТФ-90-83У).

[9] Юхновський І. Р., Держко О. В., Чернявський О. І., Левицький Р. Р. Рівноважні властивості двокомпонентної суміші газів, що містить частинки у збуджених електронних станах, у методі групових розвинень. ІІ. Структурні властивості. Львів, 1993, 41 с. (Препринт/АН України, ІФКС; ІФКС-93-18У).

[10] Мессиа А. Квантовая механика. т.2. М.: "Наука", 1968, 384 с.

[11] Аллен К. У. Астрофизические величины. М.: Мир, 1977, 448 с.

[12] Martens J. A. E. Inaugural-Dissertation zur Erlangung der Doktorwurde eingereicht beim Fachberreich Physikalishe Chemie der Philipps– Universitat Marburg /Lahn. Marburg/ Lahn, 1987. 92 s.

[13] Cha G.–S. Inaugural-Dissertation zur Erlangung der Doktorwurde eingereicht beim Fachberreich Physikalishe Chemie der Philipps–Universitat Marburg. Marburg, 1992. 74 s.

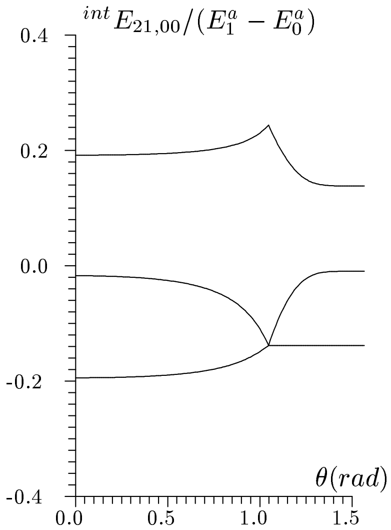

Рис. 1: Ефективні взаємодії у тричастинковій односортній групі, що містить одну частинку у збудженому стані [4]. Просторова конфігурація – рівносторонній трикутник.

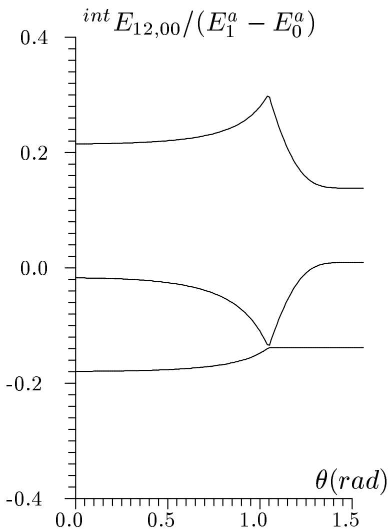

Рис. 2: Ефективні взаємодії у тричастинковій односортній групі, що містить дві частинки у збудженому стані [4]. Просторова конфігурація – рівносторонній трикутник.

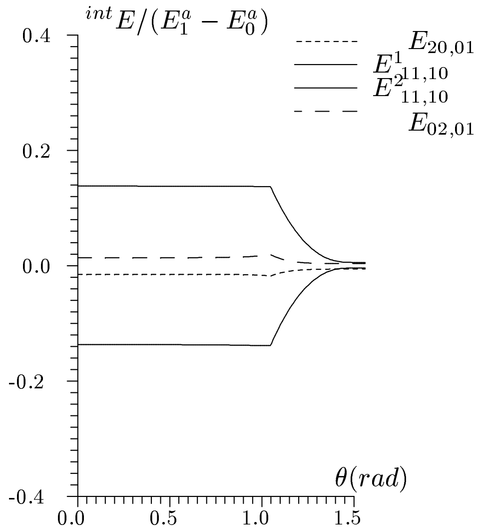

Рис. 3: Ефективні взаємодії у тричастинковій групі $N^a = 2$, $N^b = 1$, що містить одну збуджену частинку. Просторова конфігурація – рівнобедрений трикутник, віддаляється частинка сорту a.

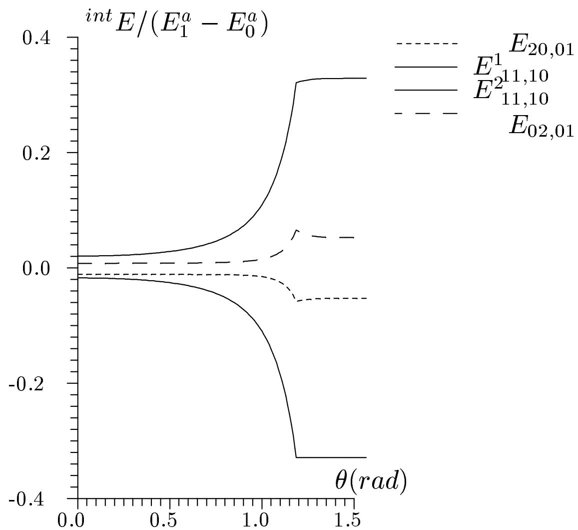

Рис. 4: Ефективні взаємодії у тричастинковій групі $N^a = 2$, $N^b = 1$, що містить одну збуджену частинку. Просторова конфігурація – рівнобедрений трикутник, віддаляється частинка сорту b.

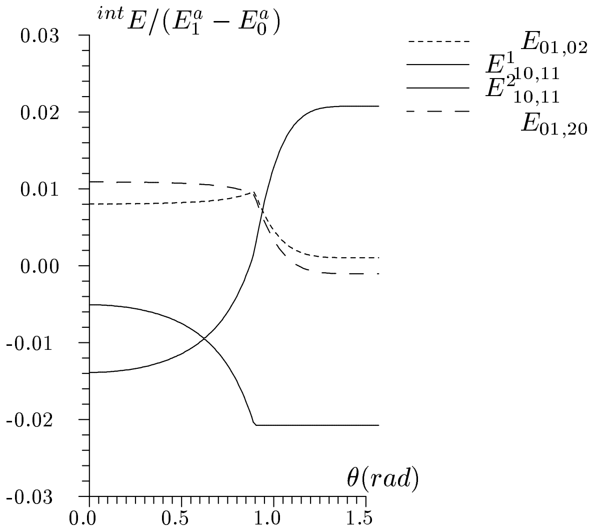

Рис. 5: Ефективні взаємодії у тричастинковій групі $N^a = 1$, $N^b = 2$, що містить одну збуджену частинку. Просторова конфігурація – рівнобедрений трикутник, віддаляється частинка сорту a.

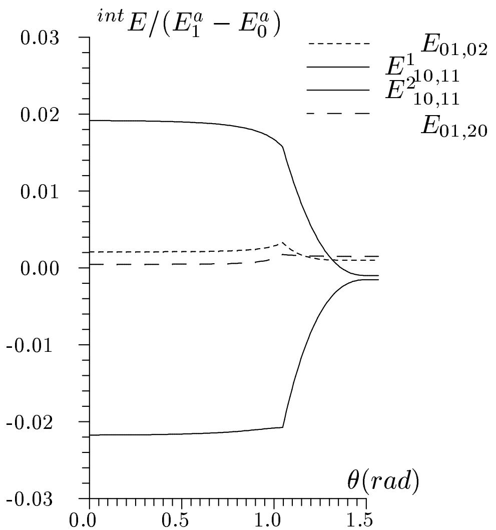

Рис. 6: Ефективні взаємодії у тричастинковій групі $N^a = 1$, $N^b = 2$, що містить одну збуджену частинку. Просторова конфігурація – рівнобедрений трикутник, віддаляється частинка сорту b.

Олег Іванович Чернявський
Роман Романович Левицький

Ефективні взаємодії у двокомпонентній частково збудженій суміші газів

Роботу отримано 2 липня 1996 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу теорії модельних спінових систем

Виготовлено при ІФКС НАН України