

Politechnika Gdańska  
Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej  
Katedra Fizyki Atomowej, Molekularnej i Optycznej  
Zespół Fizyki Atomowej

Rozprawa doktorska

# **Jednoelektronowy atom Diraca w słabym polu magnetycznym**

Patrycja Stefańska

Promotor: prof. dr hab. Radosław Szmytkowski

Gdańsk, luty 2014



*Pragnę serdecznie podziękować  
Profesorowi Radosławowi Szmytkowskiemu  
za szeroko rozumianą pomoc i opiekę naukową,  
za wiele cennych rad i wskazówek dotyczących  
przygotowania tej rozprawy, za wyrozumiałość,  
cierpliwość i udzielone mi wsparcie  
w okresie kilku ostatnich lat.*



# Spis treści

<b>1</b>	<b>Wstęp</b>	<b>7</b>
1.1	Rys historyczny . . . . .	7
1.2	Cel i struktura rozprawy . . . . .	10
<b>2</b>	<b>Atom w polu magnetycznym</b>	<b>12</b>
2.1	Wprowadzenie . . . . .	12
2.2	Zaburzone zagadnienie Diraca–Coulomba . . . . .	12
2.3	Gęstość ładunku oraz gęstość prądu . . . . .	17
<b>3</b>	<b>Baza Sturm–Diraca–Coulomba</b>	<b>19</b>
3.1	Wprowadzenie . . . . .	19
3.2	Podstawowe pojęcia . . . . .	19
3.3	Funkcje Sturm–Diraca–Coulomba . . . . .	20
3.4	Uogólniona funkcja Greena . . . . .	24
<b>4</b>	<b>Magnetyczny moment dipolowy</b>	<b>26</b>
4.1	Wprowadzenie . . . . .	26
4.2	Definicja . . . . .	26
4.3	Indukowany magnetyczny moment dipolowy . . . . .	26
4.4	Magnetyzowalność . . . . .	29
<b>5</b>	<b>Elektryczny moment kwadrupolowy</b>	<b>42</b>
5.1	Wprowadzenie . . . . .	42
5.2	Elektryczne momenty multipolowe . . . . .	42
5.3	Indukowany kwadrupol elektryczny . . . . .	44
5.4	Podatność krzyżowa $\alpha_{M1 \rightarrow E2}$ . . . . .	59
<b>6</b>	<b>Ekranowanie magnetyczne jądra atomu</b>	<b>61</b>
6.1	Wprowadzenie . . . . .	61
6.2	Stała ekranowania magnetycznego . . . . .	64
<b>7</b>	<b>Wyniki obliczeń numerycznych</b>	<b>83</b>
7.1	Wprowadzenie . . . . .	83
7.2	Magnetyzowalność . . . . .	83
7.3	Podatność krzyżowa $\alpha_{M1 \rightarrow E2}$ . . . . .	103
7.4	Stała ekranowania magnetycznego . . . . .	108
<b>8</b>	<b>Podsumowanie</b>	<b>113</b>
	<b>Uzupełnienia</b>	<b>115</b>
<b>A</b>	<b>Układ współrzędnych, harmoniki i spinory sferyczne</b>	<b>115</b>
A.1	Sferyczny układ współrzędnych, baza cykliczna . . . . .	115
A.2	Harmoniki sferyczne . . . . .	116
A.3	Spinory sferyczne . . . . .	117
<b>B</b>	<b>Całki kątowe</b>	<b>121</b>
<b>C</b>	<b>Całki radialne</b>	<b>123</b>
C.1	Kilka typów całek radialnych . . . . .	123
C.2	Uproszczenie dla zaburzenia dipolowego . . . . .	128

D Uogólnione wielomiany Laguerre'a	131
E Uogólniona funkcja hipergeometryczna	134
F Obliczenie podwójnej sumy występującej w równaniach (4.91), (5.86) oraz (6.88)	137
Bibliografia	139

# 1 Wstęp

## 1.1 Rys historyczny

Oddziaływanie atomów i cząsteczek z polem magnetycznym jest niewątpliwie jednym z ważniejszych zagadnień fizyki atomowej. Opis teoretyczny tych zjawisk, które zachodzą w skali atomowej, wymaga zastosowania formalizmu współczesnej mechaniki kwantowej. Powstanie tego nurtu w fizyce, nazywanego przez Alberta Einsteina “najbardziej udaną teorią naszych czasów”, datuje się na styczeń 1926 roku, kiedy to Erwin Schrödinger opublikował prace [1–3], w których wprowadził on słynne równanie falowe. Jak każdy postulat stanowiący podstawę nowej teorii, równanie Schrödingera stało się obiektem zainteresowań i analiz ówczesnych fizyków teoretyków, w wyniku których bardzo szybko wskazano na jego braki i niedociągnięcia. Przede wszystkim zwrócono uwagę na to, iż nie uwzględnia ono spinu<sup>1</sup> cząstki, a odpowiednie poprawki zaproponował w 1927 roku Wolfgang Pauli. Pierwsza z nich polegała na dodaniu do hamiltonianu dodatkowego składnika, opisującego energię potencjalną oddziaływania magnetycznego spinowego momentu dipolowego z polem magnetycznym, proporcjonalną do natężenia tego pola, druga zaś polegała na przedstawieniu funkcji falowej w postaci dwuskładnikowej. W ten sposób Pauli zmodyfikował równanie Schrödingera na przypadek cząstki o spinie 1/2.

Inne przekształcenie równania Schrödingera, polegające na uwzględnieniu w nim efektów relatywistycznych, zaproponowali niezależnie od siebie, w latach 1926–1927, Klein, Gordon oraz Fock, formułując równanie zwane najczęściej *równaniem Kleina–Gordona*. Jednak ich teoria nie zakładała istnienia spinu elektronu. Połączenie zalet równania Pauliego oraz równania Kleina–Gordona znalazło swoje odzwierciedlenie w teorii podanej w 1928 roku przez Paula Diraca [7]. Zaproponowany przez niego formalizm miał charakter czysto relatywistyczny, a spin elektronu pojawił się w sposób naturalny.

Sformułowanie równania Diraca było jednym z największych postępów w rozwoju fizyki teoretycznej. Umożliwiło ono poprawne relatywistyczne wyjaśnienie spinu elektronu, a w konsekwencji struktury subtelnej widma atomu wodoru. Największą niespodzianką, jaką niesło za sobą równanie Diraca, było pojawienie się w jego rozwiązaniu cząstki o ujemnej energii. Oznaczało to, iż powinna istnieć inna cząstka o własnościach identycznych z elektronem, różniąca się od niego tylko ładunkiem elektrycznym. W ten sposób równanie Diraca przewidywało istnienie antymaterii, potwierdzone eksperymentalnie w późniejszych latach<sup>2</sup>.

W oparciu o równanie Diraca niezwykle szybko znaleziono rozwiązanie zagadnienia własnego elektronu w potencjale coulombowskim (atom wodoru); jeszcze w roku 1928 podali je Gordon [10] i Darwin [11]. Obliczenia relatywistyczne dla atomu jednoelektronowego były również przedmiotem badań przeprowadzonych w ramach w niniejszej pracy, przy czym rozważany w rozprawie atom umieszczony był dodatkowo w zewnętrznym polu magnetycznym; skupiono się tutaj na opisie jego własności elektromagnetycznych, wykorzystując do tego funkcje gęstości ładunku elektrycznego oraz gęstości prądu elektrycznego [12]. W rozwinięciach multipolowych potencjałów tych rozkładów pojawiają się elektryczne i magnetyczne momenty multipolowe [13–19], analizie których – na przykładzie atomu z elektronem Diraca – została poświęcona znaczna część tej rozprawy.

Wspomniane rozkłady funkcji gęstości ładunku i prądu elektrycznego ulegają modyfikacji pod wpływem działania zewnętrznego zaburzenia w postaci słabych pól elektromagnetycznych. Zmiany te polegają przede wszystkim na indukowaniu się w układzie dodatkowych momentów multipolowych, które w pierwszym przybliżeniu są proporcjonalne do natężenia przyłożonego pola; współ-

<sup>1</sup>Istnienie spinu zasugerowali w 1925 roku Uhlenbeck i Goudsmit [4, 5], opierając się o wyniki eksperymentu przeprowadzonego w 1922 roku przez Sterna i Gerlacha [6], w którym zaobserwowano rozdzielenie wiązki atomów srebra na dwie pod wpływem pola magnetycznego.

<sup>2</sup>Już w 1932 roku zostało potwierdzone istnienie w przyrodzie pozytonu, czyli antyelektronu – cząstki o przeciwnym do elektronu ładunku i o tej samej masie spoczynkowej. Dokonał tego Carl D. Anderson [8, 9], badając składniki promieniowania kosmicznego. Później odkryto inne, mniej podstawowe antycząstki: antyproton (1955 r.) i antyneutron (1956 r.). Na dzień dzisiejszy znamy nawet układy złożone z materii i antymaterii (pozytonium=elektron+pozyton) albo z samej antymaterii (atomy antywodoru lub antydeuteru).

czynniki proporcjonalności można wyrazić za pomocą odpowiednich podatności elektromagnetycznych [20–24]. W przypadku, gdy czynnikiem zaburzającym stan atomu jest pole magnetyczne, mogą wystąpić, na przykład, takie sytuacje: pierwsza, kiedy w atomie powstanie dodatkowy moment *magnetyczny*, który wyrazić można poprzez podatność magnetyczną (magnetyzowalność) atomu; druga możliwość polega na indukowaniu się w atomie dodatkowego momentu *elektrycznego* – mamy wówczas do czynienia z podatnością krzyżową typu pole magnetyczne → moment elektryczny<sup>3</sup> ( $\alpha_{M\lambda \rightarrow EL}$ ) atomu.

Wyróżniona wyżej magnetyzowalność jest – obok statycznej polaryzowalności atomowej – wielkością najczęściej wykorzystywaną do opisu właściwości elektromagnetycznych atomów i cząstek [25, 26]. Pierwsze obliczenia analityczne tego parametru atomowego dla najprostszego układu, jakim jest atom wodoropodobny, zostały przeprowadzone na gruncie teorii nierelatywistycznych już w początkowych dniach istnienia mechaniki kwantowej, a ich rezultaty można znaleźć np. w książce Van Vlecka [20], w całości poświęconej analizie właściwości elektromagnetycznych wybranych atomów. Odpowiednie obliczenia dla atomu z elektronem Diraca rozpoczęto dopiero w połowie lat 70-tych XX wieku. W roku 1974 – niezależnie od siebie i w nieco inny sposób – Granovsky i Nechet [27] oraz Manakov, Rapoport i Zapryagaev [28] znaleźli ściśle analityczne wyrażenie dla magnetyzowalności relatywistycznego atomu wodoropodobnego znajdującego się w stanie podstawowym. Obie metody oparte były na rachunku zaburzeń połączonym z techniką funkcji Greena, a uzyskane wyniki wyrażały się przez uogólnione funkcje hipergeometryczne z jednostkowym argumentem. Różnice w obu podejściach dotyczyły rodzaju i postaci użytej funkcji Greena. Pierwsza z tych grup wykorzystwała reprezentację całkową radialnych składowych funkcji Greena–Diraca–Coulomba pierwszego rzędu, druga zaś w obliczeniach zastosowała rozwinięcie Sturmowskie funkcji Greena–Diraca–Coulomba rzędu drugiego, zaproponowane przez siebie [29, 30] na początku lat 70-tych. Następnie Manakov i Zapryagaev wykorzystali tę samą metodę do uogólnienia wyniku dla podatności magnetycznej stanu podstawowego atomu na stany o zerowej radialnej liczbie kwantowej [31]. Swoje rozważania na ten temat zaprezentowali również w artykule przeglądowym [32], a także w książce [33], napisanej wspólnie z Pał’chikovem, poświęconej teoretycznemu opisowi właściwości atomów jedno- i dwuelektronowych. Przedstawienie zaproponowanej przez nich techniki obliczeniowej, a także rezultat obliczeń dla magnetyzowalności relatywistycznego atomu wodoropodobnego wykonanych tym sposobem, znaleźć można również w książce Labzovskiego i współpracowników [34] (rozdziały 5 i 6), wydanej w 1993 roku.

Atom wodoropodobny jest układem elektrycznym, w którym ładunek ujemny w postaci elektronu krąży wokół dodatnio naładowanego jądra. Modyfikacje rozkładu gęstości prądu elektrycznego w takim układzie, wywołane zaburzeniem w postaci słabego pola magnetycznego, są w naturalny sposób sprzężone ze zmianami zachodzącymi w rozkładzie gęstości ładunku elektrycznego tego układu. W związku z tym, w atomie jednoelektronowym zaburzonym zewnętrznym polem magnetycznym będą indukować się dodatkowe elektryczne momenty multipolowe. W przypadku, kiedy atom znajduje się w stanie podstawowym, jednorodne pole magnetyczne o indukcji  $\mathcal{B}$  powinno wyindukować w nim elektryczny moment kwadrupolowy  $Q_2$ . Występowanie tego efektu zostało zasugerowane już w 1956 roku przez Coulsona i Stephena [35]. Wykorzystując rachunek zaburzeń, pokazali oni również, że czynnikiem wiodącym w rozwinięciu  $Q_2(\mathcal{B})$  jest człon *kwadratowy* względem pola, przy czym należy zaznaczyć, iż w swoich rozważaniach *nie* uwzględnili oni efektów relatywistycznych. Na kolejne prace dotyczące podjętego przez nich tematu trzeba było czekać ponad 30 lat. Dopiero pod koniec lat 80-tych XX wieku ukazała się praca Turbinera [36], potwierdzająca wyniki otrzymane przez Coulsona i Stephena. Autor tej publikacji otrzymał takie samo wyrażenie na  $Q_2^{(2)}$ , jak to uzyskane przez jego poprzedników, znalazł ponadto kolejny nieznikający człon w badanym rozwinięciu, a mianowicie wyraz  $Q_2^{(4)} \propto \mathcal{B}^4$ . Na początku tego stulecia Turbiner wspólnie z Potekhinem [37] ponownie wyznaczył zależność  $Q_2(\mathcal{B})$  dla szerokiego zakresu wartości  $\mathcal{B}$ . Obliczenia zostały wykonane przez nich na dwa różne sposoby. Pierwsza metoda prezentowała podejście wariacyjne, przy czym

<sup>3</sup>W przyjętej tutaj notacji  $\lambda$  określa multipolowość pola zaburzającego, zaś  $L$  oznacza rząd indukowanego przez nie momentu multipolowego.



wybrana przez nich funkcja próbna była znacznie bardziej wyszukana niż ta użyta w pracy [36], druga zaś oparta była o rozwinięcie zaburzonej funkcji falowej w bazie orbitali Landaua.

Niestety, trzy omówione wyżej prace są jedynymi, w których wyznaczono wyrażenie dla elektrycznego momentu kwadrupolowego indukowanego przez zewnętrzne pole magnetyczne w stanie podstawowym *nierelatywistycznego* atomu wodoropodobnego. Obliczenia tej wielkości dla atomu z elektronem Diraca zostały przeprowadzone po raz pierwszy dopiero w 2012 roku przez autorkę tej rozprawy wspólnie z R. Szymtkowskim. Uzyskane przez nich wyniki zostały zawarte w pracy [38], która – jak do tej pory – jest jedyną publikacją traktującą ten problem w sposób relatywistyczny. W pracy tej pokazano, że jeśli w rachunkach za punkt wyjścia obierze się równanie Diraca, a nie równanie Schrödingera, wówczas członem wiodącym w rozwinięciu  $Q_2(\mathcal{B})$  jest wyraz *liniowy* względem pola. Wyrażenie na  $Q_2^{(1)}$ , otrzymane w tej publikacji za pomocą rozwinięcia sturmowskiego funkcji Greena–Diraca–Coulomba [39], w granicy nierelatywistycznej zbiega do zera, co potwierdza wyniki wcześniejszych obliczeń tej wielkości, omówionych w poprzednim akapicie.

Jeśli atom lub cząsteczkę umieści się w zewnętrznym polu magnetycznym, to elektrony krążące wokół ich jąder zaczną oddziaływać z polem zaburzającym. W ten sposób powstanie w układzie dodatkowe pole magnetyczne [40, 41], skierowane przeciwnie do pola przyłożonego. W związku z tym, zmaleje wartość pola magnetycznego “efektywnie” odczuwanego przez jądro. Zjawisko takie nosi nazwę *ekranowania magnetycznego* jądra atomowego. Wywołane w ten sposób zmiany zachodzące w miejscu położenia jądra można w zupełności scharakteryzować poprzez podanie tzw. stałej ekranowania jądra atomu. Wielkość ta, zależna oczywiście od gęstości elektronowej wokół jądra, jest w bezpośredni sposób związana z tzw. przesunięciem chemicznym, za pomocą którego określone jest położenie sygnału w widmie NMR (Nuclear Magnetic Resonance). Znając częstotliwość absorpcji promieniowania jąder tzw. substancji wzorcowej wykorzystywanej w technice NMR oraz mierząc położenie sygnału w widmie, można wyznaczyć częstotliwość absorpcji jąder chemicznych w substancji badanej. Wartości te określa się zazwyczaj poprzez podanie wspomnianego wyżej przesunięcia chemicznego. Zakresy wartości przesunięć chemicznych odpowiadające absorpcji przez jądra znajdujące się w otoczeniu określonych grup chemicznych są stabelaryzowane. Porównanie zarejestrowanych przesunięć chemicznych z wartościami tablicowymi umożliwi zatem identyfikację struktury chemicznej badanego związku.

Z powyższych rozważań wynika, iż znajomość stałej ekranowania magnetycznego dla danego typu jąder magnetycznych jest niezbędna w spektroskopii magnetycznego rezonansu jądrowego – jednej z najczęściej stosowanych obecnie technik spektroskopowych w chemii i medycynie. Skoro znane są (wyznaczone doświadczalnie) wartości tej stałej (poprzez stabilizowane wartości przesunięcia chemicznego) dla większych cząsteczek i atomów wieloelektronowych, niezwykle cenna byłaby teoria zjawiska ekranowania magnetycznego, pozwalająca zweryfikować stabilizowane już wartości oraz – co istotniejsze – umożliwiającą obliczenie tej wielkości dla nowych atomów i cząsteczek, które do tej pory nie mogły zostać zidentyfikowane przez widmo NMR. Wyznaczenie wartości stałej ekranowania dla układów wieloatomowych wymaga zastosowania obliczeń numerycznych, które z kolei wykonuje się, bazując na analitycznych rozważaniach teoretycznych. Warto byłoby więc dysponować takimi technikami obliczeniowymi, które przede wszystkim dają dobre wyniki dla najprostszych atomów i posiadają potencjał do zastosowania ich w bardziej skomplikowanych sytuacjach.

Pierwsze próby wyprowadzenia ściśle analitycznego wyrażenia dla stałej ekranowania magnetycznego jądra relatywistycznego atomu jednoelektronowego, który bez wątpienia jest najprostszym, wręcz modelowym układem fizycznym, zostały rozpoczęte na początku lat 70-tych XX wieku przez Zapryagaeva, Manakova i Rapoporta [42]. Wielkość ta została przez nich wyznaczona za pomocą rozwinięcia sturmowskiego funkcji Greena–Diraca–Coulomba drugiego rzędu [29, 30]. Efekty ich obliczeń znaleźć można również w późniejszych artykułach [32, 33], opublikowanych na początku lat 80-tych. W 1999 roku niemal równocześnie Moore [43] oraz Pyper i Zhang [44] przedstawili alternatywne sposoby obliczania stałej ekranowania magnetycznego jednoelektronowego atomu relatywistycznego, będącego w stanie podstawowym. Rachunki zaprezentowane w obu tych pracach, mimo iż przeprowadzone zostały różnymi technikami obliczeniowymi, oparte były o ogólną ideę zapropono-

nowaną już w połowie XX wieku przez Ramseya [45], mówiącą o tym, iż całkowitą stałą ekranowania magnetycznego atomu można przedstawić w postaci sumy dwóch składników: diamagnetycznego i paramagnetycznego. Wyniki uzyskane przez Moore’a oraz Pypera i Zhanga potwierdziły słusność formuły na stałą ekranowania atomu Diraca znajdującego się w stanie podstawowym, podaną w pracy [42]. Rezultat uzyskany przez Zapryagaeva, Manakova i Rapoporta przeszedł pozytywną weryfikację również dziesięć lat później, kiedy to Ivanov, Karshenboim i Lee [46] znaleźli wyrażenie opisujące tę wielkość dla stanów typu  $s$  relatywistycznego atomu wodoropodobnego. W późniejszych latach powstały prace [47–49], w których stałą ekranowania magnetycznego wyznaczono za pomocą techniki sturmowskiego rozwinięcia funkcji Greena–Diraca–Coulomba [39]. W publikacjach [48] (stanowiącej uzupełnienie rachunków, których wyniki zostały zaprezentowane przez Chenga, Xiao i Liu w pracy [47]) oraz [49], napisanych przez autorkę tej rozprawy wspólnie z R. Szymtkowskim, uzyskano zamkniętą postać wyrażenia dla stałej ekranowania magnetycznego stanu podstawowego jednoelektronowego atomu Diraca, tożsamą ze wszystkimi wcześniejszymi rezultatami zawartymi w pracach [32, 33, 42–44, 46].

## 1.2 Cel i struktura rozprawy

Wszystkie cytowane wyżej publikacje, zawierające ściśle analityczne obliczenia dla wielkości charakteryzujących własności elektromagnetyczne jednoelektronowego atomu Diraca, dotyczyły tylko wybranych stanów atomu. W szczególności skupiono się na stanie podstawowym układu; niekiedy rozpatrywano jedynie pewną klasę stanów, jak na przykład stany typu  $s$  dla stałej ekranowania magnetycznego, czy stany z zerową radialną liczbą kwantową w przypadku magnetyzowalności. Poza kilkoma pracami zawierającymi wyniki *numerycznych* obliczeń tych dwóch parametrów dla wybranych stanów atomu, z których wyróżnić należy pozycje [50, 51], autorce rozprawy nie jest znana żadna praca, w której jakakolwiek z omawianych powyżej wielkości została wyznaczona *stricte analitycznie* dla *dowolnego* stanu wzbudzonego atomu.

Zapewne nieobecność w literaturze publikacji zawierających tak ogólne wyrażenie dla rozważanych tutaj parametrów atomowych związany jest z brakiem prostej metody analitycznej, która umożliwiłaby przeprowadzenie odpowiednich rachunków. Do obliczeń takich wielkości (dla pewnej konkretnej klasy stanów atomu) jak np. magnetyzowalność, stała ekranowania magnetycznego, czy podatności krzyżowe, zazwyczaj wykorzystuje się rachunek zaburzeń połączony z techniką funkcji Greena. Otrzymanie ścisłych wyników uzależnione jest od zastosowania odpowiedniej postaci funkcji Greena. Pierwsze próby skonstruowania jej w takiej formie, która umożliwiałaby otrzymywanie relatywistycznych wyrażeń opisujących właściwości atomów jednoelektronowych, zostały przeprowadzone na początku lat 70-tych ubiegłego wieku przez Granovsky’ego i Necheta [27] oraz Manakova i Rapoportą [29, 30], o czym była mowa w pierwszej części wstępu tej rozprawy. Warto jednak w tym miejscu przypomnieć, że metoda opracowana przez drugą z wymienionych grup, wykorzystująca rozwinięcie sturmowskie funkcji Greena–Diraca–Coulomba drugiego rzędu, znalazła szersze zastosowanie w obliczeniach relatywistycznej fizyki atomowej niż sposób zaproponowany przez tych pierwszych. Znalazło to odzwierciedlenie w kolejnych próbach rozwinięcia uogólnionej funkcji Greena w bazie funkcji Sturm–Diraca–Coulomba. W 1988 roku tego zadania podjęli się Drake i Goldman [52], a trzy lata później zagadnieniem tym zajął się Grant [53]. W obu tych podejściach – w odróżnieniu od pomysłu Manakova i Rapoportą – zaproponowano rozwinięcie sturmowskie uogólnionej funkcji Greena–Diraca–Coulomba rzędu *pierwszego*. Mimo pojedynczych przypadków, w jakich te dwa rozwinięcia znalazły zastosowanie, w 1997 roku Szymtkowski [39] wykazał, że użyte przez nich funkcje *nie* stanowią bazy Sturm–Diraca–Coulomba. Następnie wyprowadził on postacie radialnych sturmianów, zaproponował rozwinięcie uogólnionej radialnej funkcji Greena–Diraca–Coulomba pierwszego rzędu w bazie tych funkcji, a także wykorzystał opisane przez siebie narzędzie obliczeniowe do wyznaczenia statycznej polaryzowalności dipolowej jednoelektronowego atomu Diraca [39]. Stosowalność podanej przez niego metody została potwierdzona już w 2002 roku w pracy [54], zawierającej wyprowadzenie ścisłego analitycznego wyrażenia dla magnetyzowalności

atomu wodoropodobnego, tożsamego z wcześniejszymi wynikami innych autorów. Od tego momentu powstał szereg prac teoretycznych, w których rozwinięcie to wykorzystano do analizy różnorodnych właściwości elektromagnetycznych atomu z elektronem Diraca w stanie podstawowym; są to m.in.: statyczna i dynamiczna polaryzowalność dipolowa [39, 55, 56], indukowany magnetyczny moment anapolowy [57], stałe ekranowania elektrycznego i magnetycznego [47–49], kwadrupolowy moment elektryczny indukowany w atomie przez zewnętrzne pole magnetyczne [38] oraz starkowsko indukowany magnetyczny moment kwadrupolowy [58]. Cztery ostatnie ze wspomnianego cyklu prac, czyli pozycje [38, 48, 49, 58], zostały opublikowane wspólnie z R. Szmytkowskim przez autorkę tej rozprawy.

Liczba publikacji, w których głównym narzędziem obliczeniowym było rozwinięcie funkcji Greena zaproponowane w pracy [39], świadczy o szerokim zakresie zastosowań tej metody w relatywistycznej fizyce atomowej i sugeruje możliwość wykorzystania jej w bardziej skomplikowanych zagadnieniach, jak na przykład do wyznaczenia wspomnianych wcześniej wybranych parametrów atomowych charakteryzujących *dowolny* stan wzbudzony jednoelektronowego atomu Diraca. Właśnie tego typu obliczenia stanowiły tematykę rozważań podjętych w ramach niniejszej pracy.

W rozprawie przeprowadzono analizę dwóch momentów elektromagnetycznych (magnetyczny dipol i elektryczny kwadrupol), indukowanych w dowolnym stanie energetycznym jednoelektronowego atomu Diraca przez zewnętrzne stałe, słabe, jednorodne pole magnetyczne. Wynikiem tej analizy było znalezienie wyrażeń dla magnetyzowalności oraz podatności krzyżowej typu magnetyczny dipol → elektryczny kwadrupol ( $\alpha_{M1 \rightarrow E2}$ ). Ponadto, scharakteryzowano zmiany pola magnetycznego w miejscu położenia jądra, wywołane tym zaburzeniem, poprzez wyznaczenie stałej ekranowania magnetycznego atomu. Głównym celem rozprawy było wykonanie analitycznych obliczeń wyżej wymienionych trzech wielkości fizycznych dla *dowolnego* dyskretnego stanu energetycznego atomu, z systematycznym wykorzystaniem techniki rozwinięcia sturmowskiego uogólnionej radialnej funkcji Greena–Diraca–Coulomba [39].

Układ pracy jest następujący. W rozdziale drugim przedstawiono rozpatrywany układ fizyczny, czyli atom wodoropodobny. W oparciu o równanie Diraca, posługując się stacjonarnym rachunkiem zaburzeń pierwszego rzędu, połączonym z techniką funkcji Greena, wyznaczono poprawkę pierwszego rzędu do funkcji falowej stanu atomu umieszczonego w stałym, jednorodnym, słabym, polu magnetycznym; obliczono również poprawki rzędu pierwszego i drugiego do energii stanu tego atomu. Zdefiniowano także, z dokładnością do wyrazów pierwszego rzędu ze względu na zaburzenie, gęstość indukowanego w atomie ładunku elektrycznego oraz gęstość indukowanego prądu elektrycznego. Rozdział trzeci zawiera opis bazy Sturm–Diraca–Coulomba oraz rozwinięcie w szereg uogólnionej radialnej funkcji Greena dla zagadnienia Diraca–Coulomba, z wykorzystaniem radialnych Sturmianów. Zasadniczą część rozprawy stanowią rozdziały czwarty, piąty i szósty, poświęcone szczegółowej analizie wybranych wielkości fizycznych atomu, obrazujących jego odpowiedź na zewnętrzne pole magnetyczne. W rozdziale czwartym jest to indukowany magnetyczny moment dipolowy, na podstawie analizy którego uzyskano analityczne wyrażenie opisujące dipolową podatność magnetyczną (magnetyzowalność). Rozdział piąty rozpoczyna analiza elektrycznych momentów multipolowych, w efekcie której wykazano, iż zewnętrzne pole magnetyczne, z dokładnością do wyrazów pierwszego rzędu, może indukować w atomie tylko i wyłącznie parzystopolowe momenty elektryczne. W dalszej części omawianego rozdziału przedyskutowano najniższy z nieznikających momentów, czyli indukowany kwadrupol elektryczny. Rezultatem tej dyskusji było otrzymanie wyrażenia opisującego podatność krzyżową typu magnetyczny dipol → elektryczny kwadrupol ( $\alpha_{M1 \rightarrow E2}$ ) dla dowolnego stanu wzbudzonego atomu. Wyprowadzenie definicji stałej ekranowania magnetycznego jądra atomu oraz wykonanie ścisłych analitycznych obliczeń tej wielkości zostały zawarte w rozdziale szóstym. W rozdziale siódmym zaprezentowano wyniki obliczeń numerycznych przeprowadzonych dla wszystkich trzech wielkości fizycznych omówionych w niniejszej pracy. Podsumowanie zasadniczych wyników rozprawy stanowi treść rozdziału ósmego. Pracę kończy sześć uzupełnień oraz wykaz cytowanej literatury.

## 2 Atom w polu magnetycznym

### 2.1 Wprowadzenie

Jednoelektronowy atom Diraca, czyli relatywistyczny atom wodoropodobny, to układ fizyczny, którego analizie została poświęcona niniejsza praca. Przykładem takiego układu jest atom wodoru H oraz zbiór jonów wodoropodobnych:  $\text{He}^+$ ,  $\text{Li}^{2+}$ ,  $\text{Be}^{3+}$ , ... Cechą charakterystyczną takiego atomu jest prostota jego budowy: składa się on tylko z jednego elektronu o ładunku  $-e$  oraz dodatnio naładowanego jądra o ładunku  $+Ze$ , o którym dodatkowo zakładamy, iż jest ono nieruchome, punktowe i bezspinowe; odnośnie liczby atomowej będziemy przyjmowali, iż  $Z \leq 137$ .

Zewnętrzne pole magnetyczne, w którym zostanie umieszczony opisany wyżej relatywistyczny atom wodoropodobny, scharakteryzowane jest za pomocą wektora indukcji  $\mathbf{B}$ . W dalszym ciągu, odnośnie tego pola będziemy dodatkowo zakładali, że jest ono słabe, jednorodne przestrzennie oraz statyczne.

Celem niniejszej rozprawy jest analityczne obliczenie wielkości, które w sposób ilościowy pozwolą nam opisać wpływ zewnętrznego pola magnetycznego na atom. Aby tego dokonać, w pierwszej kolejności musimy rozwiązać równanie Diraca dla atomu wodoropodobnego umieszczonego w zewnętrznym polu magnetycznym.

### 2.2 Zaburzone zagadnienie Diraca–Coulomba

Zagadnienie własne dla energii stanów związanych jednoelektronowego atomu relatywistycznego z nieruchomym, punktowym, bezspinowym jądrem o ładunku  $+Ze$  oraz z elektronem o masie  $m_e$  i ładunku  $-e$ , umieszczonego w jednorodnym polu magnetycznym, jest opisywane za pomocą równania Diraca

$$\left[ -i\hbar\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} + ec\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) + \beta m_e c^2 - \frac{Ze^2}{(4\pi\epsilon_0)r} - E \right] \Psi(\mathbf{r}) = 0, \quad (2.1)$$

uzupełnionego o następujące warunki brzegowe:

$$r\Psi(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0, \quad r\Psi(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0. \quad (2.2)$$

Potencjał wektorowy dla jednorodnego, stałego pola magnetycznego  $\mathbf{B}$ , w cechowaniu symetrycznym ma postać

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r}. \quad (2.3)$$

Po uwzględnieniu wyrażenia (2.3) w równaniu (2.1) i skorzystaniu z własności iloczynów mieszanych wektorów [17, 18], zagadnienie własne opisujące układ fizyczny przedstawiony w podrozdziale 2.1 sprowadza się do postaci

$$\left[ -i\hbar\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} + \frac{1}{2}ec\mathbf{B} \cdot (\mathbf{r} \times \boldsymbol{\alpha}) + \beta m_e c^2 - \frac{Ze^2}{(4\pi\epsilon_0)r} - E \right] \Psi(\mathbf{r}) = 0, \quad (2.4)$$

z warunkami brzegowymi

$$r\Psi(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0, \quad r\Psi(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0. \quad (2.5)$$

Występujący w powyższym równaniu symbol  $\Psi(\mathbf{r})$  oznacza czteroskładnikową funkcję falową elektronu<sup>4</sup>,  $E$  określa jego energię, zaś  $\boldsymbol{\alpha}$  oraz  $\beta$  to standardowe macierze Diraca zdefiniowane w następujący sposób [59]:

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \quad (2.6)$$

<sup>4</sup>Czasami w literaturze funkcja  $\Psi(\mathbf{r})$  jest nazywana *bispinorem Diraca*.

gdzie  $I$  oraz  $0$  to odpowiednio macierz jednostkowa i zerowa o wymiarach  $2 \times 2$ , natomiast  $\boldsymbol{\sigma}$  jest wektorem zbudowanym z macierzy Pauliego, określonym za pomocą wzoru (A.43). W oparciu o poczynione wcześniej założenie, iż zewnętrzne pole magnetyczne jest słabe<sup>5</sup>, potencjał oddziaływania elektronu z polem

$$V^{(1)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}ec\mathcal{B} \cdot (\mathbf{r} \times \boldsymbol{\alpha}) \quad (2.7)$$

będziemy traktować jako małe zaburzenie hamiltonianu Diraca–Coulomba. Konsekwencją takiego podejścia jest możliwość znalezienia przybliżonego rozwiązania zagadnienia (2.4)–(2.5) przy użyciu formalizmu rachunku zaburzeń.

Zastosowanie rachunku zaburzeń wymaga w pierwszym kroku rozwiązania zagadnienia niezaburzonego. W naszym przypadku jest to równanie Diraca–Coulomba

$$\left[ -i\hbar\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta m_e c^2 - \frac{Ze^2}{(4\pi\epsilon_0)r} - E^{(0)} \right] \Psi^{(0)}(\mathbf{r}) = 0, \quad (2.8)$$

które wspólnie z warunkami brzegowymi

$$r\Psi^{(0)}(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0, \quad r\Psi^{(0)}(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0 \quad (2.9)$$

opisuje atom izolowany. Stan atomu w nieobecności zewnętrznego pola magnetycznego określają funkcja falowa elektronu  $\Psi^{(0)}(r)$  oraz jego energia  $E^{(0)}$ , która wynosi [60–67]:

$$E^{(0)} \equiv E_{n\kappa}^{(0)} = m_e c^2 \frac{n + \gamma_\kappa}{N_{n\kappa}}, \quad (2.10)$$

przy czym  $n$  oznacza radialną liczbę kwantową, natomiast  $N_{n\kappa}$  to tzw. *pozorna główna liczba kwantowa* zdefiniowana w następujący sposób:

$$N_{n\kappa} = \sqrt{(n + \gamma_\kappa)^2 + \zeta^2} = \sqrt{n^2 + 2n\gamma_\kappa + \kappa^2}, \quad (2.11)$$

gdzie

$$\zeta = \alpha Z \quad (2.12)$$

oraz

$$\gamma_\kappa = \sqrt{\kappa^2 - (\alpha Z)^2}, \quad (2.13)$$

przy czym

$$\alpha = \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)c\hbar} \quad (2.14)$$

oznacza stałą struktury subtelnej Sommerfelda (nie mylić z macierzą Diraca  $\boldsymbol{\alpha}$ !), zaś liczba kwantowa  $\kappa$  przyjmuje wartości ze zbioru  $\{\pm 1, \pm 2, \dots\}$  i została szerzej omówiona w uzupełnieniu A.3.

Funkcje własne zagadnienia Diraca–Coulomba (2.8)–(2.9), należące do wartości własnej  $E^{(0)}$ , wybieramy w postaci

$$\Psi^{(0)}(\mathbf{r}) \equiv \Psi_{n\kappa\mu}^{(0)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_{n\kappa}^{(0)}(r)\Omega_{\kappa\mu}(\mathbf{n}_r) \\ iQ_{n\kappa}^{(0)}(r)\Omega_{-\kappa\mu}(\mathbf{n}_r) \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

<sup>5</sup>W niniejszej rozprawie przymiotnikiem *słabe* określamy pole, dla którego wartość indukcji magnetycznej jest znacznie mniejsza niż atomowa jednostka indukcji magnetycznej  $B_0 \simeq 6.26$  T, zdefiniowana wzorem (5.99).

Obecne w powyższej definicji funkcje  $\Omega_{\kappa\mu}(\mathbf{n}_r)$  to spinory sferyczne, omówione w uzupełnieniu A.3. Funkcje radialne spełniają poniższy warunek normalizacyjny:

$$\int_0^\infty dr \left\{ [P_{n\kappa}^{(0)}(r)]^2 + [Q_{n\kappa}^{(0)}(r)]^2 \right\} = 1, \quad (2.16)$$

a ich jawne postacie są następujące [60–65]:

$$\begin{aligned} P_{n\kappa}^{(0)}(r) = & \sqrt{\frac{Z}{2a_0} \frac{(1 + \epsilon_{n\kappa})(n + 2\gamma_\kappa)n!}{N_{n\kappa}^2(N_{n\kappa} - \kappa)\Gamma(n + 2\gamma_\kappa)}} \left( \frac{2Zr}{a_0 N_{n\kappa}} \right)^{\gamma_\kappa} e^{-Zr/a_0 N_{n\kappa}} \\ & \times \left[ L_{n-1}^{(2\gamma_\kappa)} \left( \frac{2Zr}{a_0 N_{n\kappa}} \right) + \frac{\kappa - N_{n\kappa}}{n + 2\gamma_\kappa} L_n^{(2\gamma_\kappa)} \left( \frac{2Zr}{a_0 N_{n\kappa}} \right) \right], \end{aligned} \quad (2.17)$$

$$\begin{aligned} Q_{n\kappa}^{(0)}(r) = & \sqrt{\frac{Z}{2a_0} \frac{(1 - \epsilon_{n\kappa})(n + 2\gamma_\kappa)n!}{N_{n\kappa}^2(N_{n\kappa} - \kappa)\Gamma(n + 2\gamma_\kappa)}} \left( \frac{2Zr}{a_0 N_{n\kappa}} \right)^{\gamma_\kappa} e^{-Zr/a_0 N_{n\kappa}} \\ & \times \left[ L_{n-1}^{(2\gamma_\kappa)} \left( \frac{2Zr}{a_0 N_{n\kappa}} \right) - \frac{\kappa - N_{n\kappa}}{n + 2\gamma_\kappa} L_n^{(2\gamma_\kappa)} \left( \frac{2Zr}{a_0 N_{n\kappa}} \right) \right], \end{aligned} \quad (2.18)$$

przy czym  $\Gamma(z)$  oznacza funkcję gamma Eulera,  $L_n^{(\alpha)}(x)$  to uogólniony wielomian Laguerre'a, którego definicji i własnościom zostało poświęcone uzupełnienie D,  $a_0$  to promień Bohra, dany wyrażeniem

$$a_0 = (4\pi\epsilon_0) \frac{\hbar^2}{m_e e^2}, \quad (2.19)$$

natomiast

$$\epsilon_{n\kappa} = \frac{E_{n\kappa}^{(0)}}{m_e c^2} = \frac{n + \gamma_\kappa}{N_{n\kappa}}. \quad (2.20)$$

Przejdziemy teraz do rozwiązania zagadnienia zaburzonego, zadanego równaniem (2.4) oraz warunkami (2.5). Wykorzystamy do tego formalizm rachunku zaburzeń [6, 68, 69] pierwszego rzędu, zgodnie z którym będziemy postulować następującą przybliżoną postać rozwiązań:

$$\Psi(\mathbf{r}) \simeq \Psi^{(0)}(\mathbf{r}) + \Psi^{(1)}(\mathbf{r}) \quad (2.21)$$

oraz

$$E \simeq E^{(0)} + E^{(1)}. \quad (2.22)$$

Funkcja  $\Psi^{(0)}(\mathbf{r})$  jest unormowana do jedności w sensie

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r} \Psi^{(0)\dagger}(\mathbf{r}) \Psi^{(0)}(\mathbf{r}) = 1. \quad (2.23)$$

Odnosnie poprawek  $\Psi^{(1)}(\mathbf{r})$  oraz  $E^{(1)}$  zakładamy, iż są one małymi wielkościami pierwszego rzędu względem modułu zaburzającego pola  $\mathcal{B} = |\mathcal{B}|$ ; spełniają one następujące niejednorodne równanie różniczkowe:

$$\left[ -i\hbar\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} + \beta m_e c^2 - \frac{Ze^2}{(4\pi\epsilon_0)r} - E^{(0)} \right] \Psi^{(1)}(\mathbf{r}) = - \left[ \frac{1}{2} ec \mathcal{B} \cdot (\mathbf{r} \times \boldsymbol{\alpha}) - E^{(1)} \right] \Psi^{(0)}(\mathbf{r}), \quad (2.24)$$

uzupełnione o warunki brzegowe

$$r\Psi^{(1)}(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0, \quad r\Psi^{(1)}(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0. \quad (2.25)$$

Poniższy warunek ortogonalności między pierwszą poprawką do funkcji falowej a funkcją niezaburzoną:

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r} \Psi^{(0)\dagger}(\mathbf{r})\Psi^{(1)}(\mathbf{r}) = 0 \quad (2.26)$$

implikuje unormowanie funkcji (2.21) do jedności. Warunek ten gwarantuje także jednoznaczność szukanej funkcji  $\Psi^{(1)}(\mathbf{r})$ .

Po określeniu wymogów, jakie powinny spełniać rozwiązania zagadnienia (2.24)–(2.25) przejdziemy teraz do ich obliczenia. W tym celu wykorzystamy metodę funkcji Greena, zgodnie z którą mamy:

$$\Psi^{(1)}(\mathbf{r}) = - \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}' \bar{G}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \left[ \frac{1}{2} ec \mathcal{B} \cdot (\mathbf{r}' \times \boldsymbol{\alpha}) - E^{(1)} \right] \Psi^{(0)}(\mathbf{r}'), \quad (2.27)$$

gdzie  $\bar{G}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv \bar{G}^{(0)}(E_{n\kappa}^{(0)}, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$  to uogólniona funkcja Greena<sup>6</sup> dla zagadnienia Diraca–Coulomba, przy energii  $E_{n\kappa}^{(0)}$  danej wzorem (2.10). Spełnia ona następujące niejednorodne równanie różniczkowe (dla ustalonego  $\mathbf{r}'$ ):

$$\left[ -i\hbar\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta m_e c^2 - \frac{Ze^2}{(4\pi\epsilon_0)r} - E_{n\kappa}^{(0)} \right] \bar{G}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \mathcal{I} \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \sum_{\substack{\kappa'\mu \\ (|\kappa'|=|\kappa|)}} \Psi_{n\kappa'\mu}^{(0)}(\mathbf{r}) \Psi_{n\kappa'\mu}^{(0)\dagger}(\mathbf{r}'), \quad (2.28)$$

uzupełnione o warunki brzegowe

$$r\bar{G}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0, \quad r\bar{G}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0. \quad (2.29)$$

W równaniu (2.28) pojawiły się dwa nowe symbole:  $\mathcal{I}$  to macierz jednostkowa o wymiarach  $4 \times 4$ , zaś  $\delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  oznacza trójwymiarową funkcję delta Diraca.

Podamy teraz dwa istotne fakty dotyczące omawianej uogólnionej funkcji Greena:

- jest hermitowska w sensie

$$\bar{G}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \bar{G}^{(0)\dagger}(\mathbf{r}', \mathbf{r}), \quad (2.30)$$

- spełnia następujący warunek ortogonalności:

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r} \Psi_{n\kappa'\mu}^{(0)\dagger}(\mathbf{r}) \bar{G}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 0 \quad \text{dla } \kappa' = \pm\kappa. \quad (2.31)$$

Wykorzystanie wyżej wymienionych własności funkcji  $\bar{G}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  w równaniu (2.27) pozwala przepisać wzór na zaburzoną funkcję falową w postaci

$$\Psi^{(1)}(\mathbf{r}) \equiv \Psi_{n\kappa\mu}^{(1)}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2} ec \mathcal{B} \cdot \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}' \bar{G}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') (\mathbf{r}' \times \boldsymbol{\alpha}) \Psi_{n\kappa\mu}^{(0)}(\mathbf{r}'). \quad (2.32)$$

Zbudujmy macierz zaburzenia  $V_{n\kappa\mu, n\kappa'\mu'}^{(1)}$ :

$$V_{n\kappa\mu, n\kappa'\mu'}^{(1)} = \frac{1}{2} ec \mathcal{B} \cdot \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r} \Psi_{n\kappa\mu}^{(0)\dagger}(\mathbf{r}) (\mathbf{r} \times \boldsymbol{\alpha}) \Psi_{n\kappa'\mu'}^{(0)}(\mathbf{r}). \quad (2.33)$$

<sup>6</sup>Dla przejrzystości prezentowanych w rozprawie wzorów, rezygnujemy z wypisywania  $E_{n\kappa}^{(0)}$  jako argumentu uogólnionej funkcji Greena, pamiętając oczywiście, iż taka zależność ma miejsce.

Aby wyznaczyć elementy tej macierzy, w pierwszej kolejności poczynimy założenie, które będzie obowiązywało przy omawianiu wszystkich zagadnień w niniejszej rozprawie. Mianowicie, przyjmujemy, iż zewnętrzne pole magnetyczne jest skierowane wzdłuż osi  $z$  kartezjańskiego układu współrzędnych. Wykorzystując to założenie, jak również postać niezaburzonej funkcji falowej (2.15), występującą w powyższym wzorze całkę po  $\mathbb{R}^3$  zapiszemy we współrzędnych sferycznych:

$$V_{n\kappa\mu, n\kappa'\mu'}^{(1)} = \frac{i}{2} ec\mathcal{B} \left[ \int_0^\infty dr r P_{n\kappa}^{(0)}(r) Q_{n\kappa'}^{(0)}(r) \oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r \Omega_{\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}_r) \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa'\mu'}(\mathbf{n}_r) - \int_0^\infty dr r Q_{n\kappa}^{(0)}(r) P_{n\kappa'}^{(0)}(r) \oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r \Omega_{-\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}_r) \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa'\mu'}(\mathbf{n}_r) \right]. \quad (2.34)$$

W kolejnym kroku zastosujemy własność (B.5), skorzystamy relacji rekurencyjnej (A.37), po czym dokonamy całkowania po zmiennych kątowych, wykorzystując przy tym własność ortonormalności dla spinorów sferycznych (A.34). Uwzględniając następnie fakt, iż dla stanów zdegenerowanych zachodzi równość  $|\kappa| = |\kappa'|$ , otrzymujemy

$$V_{n\kappa\mu, n\kappa'\mu'}^{(1)} = V_{n\kappa\mu, n\kappa\mu}^{(1)} \delta_{\kappa\kappa'} \delta_{\mu\mu'}, \quad (2.35)$$

gdzie

$$V_{n\kappa\mu, n\kappa\mu}^{(1)} = \frac{4\kappa\mu}{4\kappa^2 - 1} ec\alpha_0 \mathcal{B} \int_0^\infty dr r P_{n\kappa}^{(0)}(r) Q_{n\kappa}^{(0)}(r). \quad (2.36)$$

Z zależności (2.33) oraz (2.35) wynika, iż funkcje  $\Psi_{n\kappa\mu}^{(0)}$  są *dopasowane* do zaburzenia [69], skąd – w oparciu o wzór (2.24) i standardowe procedury rachunku zaburzeń – otrzymujemy natychmiast, iż pierwsza poprawka do energii wyraża się poprzez wartości własne (2.36) macierzy zaburzenia (2.33), tj.:

$$E^{(1)} \equiv E_{n\kappa\mu}^{(1)} = V_{n\kappa\mu, n\kappa\mu}^{(1)}. \quad (2.37)$$

Wykorzystując wartość całki radialnej obecnej we wzorze (2.36), danej wzorem (C.26), na podstawie powyższej zależności możemy napisać, że pierwsza poprawka do energii stanu niezaburzonego atomu, wynikająca z umieszczenia go w zewnętrznym jednorodnym, słabym polu magnetycznym  $\mathcal{B}$ , wynosi

$$E_{n\kappa\mu}^{(1)} = \frac{2\kappa\mu}{4\kappa^2 - 1} \frac{2\kappa(n + \gamma_\kappa) - N_{n\kappa}}{N_{n\kappa}} \mu_B \mathcal{B} \quad (2.38)$$

(por. wzór (1) w [70]), gdzie  $\mu_B = e\hbar/2m_e$  to magneton Bohra.

Gdyby do rozwiązania zagadnienia (2.4)–(2.5) zastosować rachunek zaburzeń drugiego rzędu, czyli gdyby założyć, że jego rozwiązania są postaci:

$$\Psi(\mathbf{r}) \simeq \Psi^{(0)}(\mathbf{r}) + \Psi^{(1)}(\mathbf{r}) + \Psi^{(2)}(\mathbf{r}) \quad (2.39)$$

oraz

$$E \simeq E^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)}, \quad (2.40)$$

uwzględniając jednocześnie fakt, iż słabe, jednorodne pole magnetyczne już w pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń usuwa degenerację stanów, można wówczas zapisać, iż poprawka drugiego rzędu do energii atomu wynosi

$$E^{(2)} \equiv E_{n\kappa\mu}^{(2)} = \frac{ec}{2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r} \Psi_{n\kappa\mu}^{(0)\dagger}(\mathbf{r}) \mathcal{B} \cdot (\mathbf{r} \times \boldsymbol{\alpha}) \Psi_{n\kappa\mu}^{(1)}(\mathbf{r}). \quad (2.41)$$



Powyższe wyrażenie otrzymuje się w standardowy sposób, przy dodatkowym założeniu, że druga poprawka do funkcji falowej jest ortogonalna do funkcji niezaburzonej, tj.:

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r} \Psi^{(0)\dagger}(\mathbf{r})\Psi^{(2)}(\mathbf{r}) = 0, \quad (2.42)$$

który gwarantuje nam jednoznaczność funkcji  $\Psi^{(2)}(\mathbf{r})$ . Wstawiając do równania (2.41) wyrażenie (2.32), otrzymujemy:

$$E_{n\kappa\mu}^{(2)} = -\frac{e^2 c^2}{4} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}' \left[ \mathcal{B} \cdot (\mathbf{r} \times \boldsymbol{\alpha}) \Psi_{n\kappa\mu}^{(0)}(\mathbf{r}) \right]^\dagger \bar{G}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \left[ \mathcal{B} \cdot (\mathbf{r}' \times \boldsymbol{\alpha}) \Psi_{n\kappa\mu}^{(0)}(\mathbf{r}') \right]. \quad (2.43)$$

Po uwzględnieniu założenia odnośnie kierunku przyłożonego pola, tj.  $\mathcal{B} = \mathcal{B}\mathbf{n}_z$ , wyrażenie na drugą poprawkę do energii atomu przyjmuje postać

$$E_{n\kappa\mu}^{(2)} = -\frac{e^2 c^2 \mathcal{B}^2}{4} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}' \left[ \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\alpha}) \Psi_{n\kappa\mu}^{(0)}(\mathbf{r}) \right]^\dagger r \bar{G}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') r' \left[ \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}_{r'} \times \boldsymbol{\alpha}) \Psi_{n\kappa\mu}^{(0)}(\mathbf{r}') \right]. \quad (2.44)$$

Wybiegając nieco w przyszłość, tzn. biorąc pod uwagę wzory (4.17), (4.24) oraz (4.25), a także następujące po nich uwagi, powyższy wynik można zapisać za pomocą następującej zależności [54, 71, 72]:

$$E_{n\kappa\mu}^{(2)} = -\frac{1}{2} \left( \frac{\mu_0}{4\pi} \right)^{-1} \chi \mathcal{B}^2, \quad (2.45)$$

gdzie  $\chi$  oznacza podatność magnetyczną jednoelektronowego atomu Diraca, której wartość została wyznaczona w podrozdziale 4.4; dana jest ona wyrażeniem (4.98).

### 2.3 Gęstość ładunku oraz gęstość prądu

Umieszczenie atomu w zewnętrznym polu magnetycznym powoduje m.in. zmiany w rozkładach gęstości ładunku elektrycznego oraz prądu elektrycznego w układzie. Do opisu modyfikacji tych dwóch wielkości fizycznych, które w teorii Diraca zdefiniowane są odpowiednio wzorami<sup>7</sup>

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{-e\Psi^\dagger(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r})}{\int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}' \Psi^\dagger(\mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}')} \quad (2.46)$$

oraz

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{-ec\Psi^\dagger(\mathbf{r})\boldsymbol{\alpha}\Psi(\mathbf{r})}{\int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}' \Psi^\dagger(\mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}')}, \quad (2.47)$$

zostanie zastosowany rachunek zaburzeń, przy czym w rozprawie ograniczymy się tylko do wyrażień pierwszego rzędu względem zaburzenia. Wykorzystując zatem przybliżoną postać funkcji falowej (2.21), uwzględniając jednocześnie warunki (2.23) oraz (2.26), możemy napisać

$$\rho(\mathbf{r}) \simeq \rho^{(0)}(\mathbf{r}) + \rho^{(1)}(\mathbf{r}) \quad (2.48)$$

oraz

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) \simeq \mathbf{j}^{(0)}(\mathbf{r}) + \mathbf{j}^{(1)}(\mathbf{r}), \quad (2.49)$$

gdzie

$$\rho^{(0)}(\mathbf{r}) = -e\Psi^{(0)\dagger}(\mathbf{r})\Psi^{(0)}(\mathbf{r}) \quad (2.50)$$

<sup>7</sup>Dla przejrzystości, od tego momentu w rozprawie rezygnujemy z indeksowania funkcji falowych liczbami kwantowymi  $n$ ,  $\kappa$  oraz  $\mu$ .

$$\mathbf{j}^{(0)}(\mathbf{r}) = -ec\Psi^{(0)\dagger}(\mathbf{r})\boldsymbol{\alpha}\Psi^{(0)}(\mathbf{r}) \quad (2.51)$$

oznaczają odpowiednio gęstość ładunku oraz gęstość prądu w atomie izolowanym, zaś  $\rho^{(1)}(\mathbf{r})$  oraz  $\mathbf{j}^{(1)}(\mathbf{r})$  to odpowiednie wielkości indukowane w atomie pod wpływem zaburzenia. Wynoszą one

$$\rho^{(1)}(\mathbf{r}) = -e \left[ \Psi^{(0)\dagger}(\mathbf{r})\Psi^{(1)}(\mathbf{r}) + \Psi^{(1)\dagger}(\mathbf{r})\Psi^{(0)}(\mathbf{r}) \right] = -2e\text{Re} \left[ \Psi^{(0)\dagger}(\mathbf{r})\Psi^{(1)}(\mathbf{r}) \right] \quad (2.52)$$

oraz

$$\mathbf{j}^{(1)}(\mathbf{r}) = -ec \left[ \Psi^{(0)\dagger}(\mathbf{r})\boldsymbol{\alpha}\Psi^{(1)}(\mathbf{r}) + \Psi^{(1)\dagger}(\mathbf{r})\boldsymbol{\alpha}\Psi^{(0)}(\mathbf{r}) \right] = -2ec\text{Re} \left[ \Psi^{(0)\dagger}(\mathbf{r})\boldsymbol{\alpha}\Psi^{(1)}(\mathbf{r}) \right]. \quad (2.53)$$

Dwa powyższe wzory, wspólnie z wyrażeniem na pierwszą poprawkę do funkcji falowej (2.32), stanowią punkt wyjścia do obliczeń wykonywanych w ramach niniejszej rozprawy, mających na celu wyprowadzenie analitycznych wyrażeń na wielkości indukowane w jednoelektronowym atomie Diraca umieszczonym w zewnętrznym słabym polu magnetycznym.

## 3 Baza Sturma–Diraca–Coulomba

### 3.1 Wprowadzenie

Bazy funkcyjne są narzędziem matematycznym wykorzystywanym do obliczeń w wielu dziedzinach nauki, przede wszystkim w fizyce i chemii kwantowej. W zależności od rodzaju i własności funkcji, które się na nie składają, zakres ich zastosowań może być bardzo szeroki. Z punktu widzenia niniejszej rozprawy najbardziej interesują nas bazy funkcyjne, mające zastosowanie w fizyce atomowej. Przykładem takiej bazy, niezwykle użytecznej w nierelatywistycznej fizyce atomowej, jest zbiór funkcji Sturma–Coulomba, często nazywany po prostu *sturmianami*. Pierwsze zastosowania tych funkcji datuje się na lata 20-te XX wieku, kiedy to Hylleraas wykorzystał je do wyznaczania poziomów energetycznych w atomie helu [73, 74]. Funkcje Sturma–Coulomba używane były także do opisu poziomów energetycznych innych atomów dwuelektronowych [75, 76]; ponadto znalazły zastosowanie przy badaniu efektu Ramana [77], do wyznaczania polaryzowalności dynamicznej atomu wodoru w stanie podstawowym [78, 79], a także w teorii rozpraszania [80, 81]. W artykule [80] dodatkowo została zaprezentowana cała gama własności tychże funkcji. Były one również wykorzystywane przy konstrukcji rozwinięcia w szereg coulombowskiej funkcji Greena [82–84] oraz w wielu innych zagadnieniach.

Coraz liczniejsze zastosowania nierelatywistycznych sturmianów spowodowały, że zaczęto szukać ich relatywistycznych odpowiedników, w nadziei, iż będą one równie użyteczne. Próbę skonstruowania i wykorzystania bazy Sturma–Diraca–Coulomba jako pierwsi podjęli m. in. Manakov i Rapoport w pracach [28–30], opierając się na zagadnieniu Sturma–Liouville’a, wynikającym z równania Diraca–Coulomba drugiego rzędu. W latach późniejszych Drake i Goldman [52], Grant [53] oraz Quiney [85] zaproponowali inne podejście do tego problemu, wykorzystując sprzężone równania Sturma–Liouville’a rzędu pierwszego. Jednak w pracy [39] Szmytkowski wykazał, iż wykorzystane przez nich funkcje *nie tworzą* bazy Sturma–Diraca–Coulomba, po czym przedstawił własną konstrukcję tej bazy funkcyjnej oraz jej zastosowanie do rozwinięcia w szereg funkcji Greena–Diraca–Coulomba.

Do tej pory rozwinięcie sturmowskie uogólnionej radialnej funkcji Greena, zaproponowane w pracy [39], znalazło zastosowanie w obliczeniach różnorodnych własności elektromagnetycznych jednoelektronowego atomu Diraca, jak na przykład: statyczna i dynamiczna polaryzowalność dipolowa [39, 55, 56], indukowany magnetyczny moment anapolowy [57], stałe ekranowania elektrycznego i magnetycznego [48, 49], kwadrupolowy moment elektryczny indukowany w atomie przez zewnętrzne pole magnetyczne [38] oraz starkowsko indukowany magnetyczny moment kwadrupolowy [58].

W oparciu o wspomnianą publikację [39], a także o prace [56, 86–88], w niniejszym rozdziale przedstawimy i krótko scharakteryzujemy bazę funkcji Sturma–Diraca–Coulomba. Na koniec zaprezentujemy jej zastosowanie do rozwinięcia uogólnionej funkcji Greena–Diraca–Coulomba, które będzie systematycznie wykorzystywane w dalszych obliczeniach w tej pracy.

### 3.2 Podstawowe pojęcia

Jednym z operatorów komutujących z hamiltonianem Diraca w polu sił centralnych jest operator całkowitego momentu pędu, zdefiniowany następująco:

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}, \quad (3.1)$$

przy czym

$$\mathbf{L} = -i\hbar \mathbf{r} \times \nabla, \quad (3.2)$$

jest operatorem orbitalnego momentu pędu, zaś

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\Sigma} \quad (3.3)$$

to operator spinu.

Zdefiniujmy operator wektorowy  $\mathbf{\Lambda}$  (tzw. *niemianowany moment pędu*)

$$\mathbf{\Lambda} = -i\mathbf{r} \times \nabla = \frac{1}{\hbar}\mathbf{L} \quad (3.4)$$

oraz operator  $\mathcal{K}$  o postaci

$$\mathcal{K} = -\beta(\mathbf{\Sigma} \cdot \mathbf{\Lambda} + \mathcal{I}), \quad (3.5)$$

gdzie  $\beta$  to macierz Diraca (2.6),  $\mathbf{\Sigma}$  jest zadana poniższym wzorem:

$$\mathbf{\Sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

zaś  $\mathcal{I}$  jest macierzą jednostkową o wymiarze  $4 \times 4$ . Dzieliąc obustronnie przez  $\hbar$  równanie (3.1), w oparciu o zależności (3.3)–(3.4) otrzymujemy zmodyfikowaną postać operatora całkowitego momentu pędu:

$$\mathbf{J} = \mathbf{\Lambda} + \frac{1}{2}\mathbf{\Sigma} = \frac{1}{\hbar}\mathbf{J}, \quad (3.7)$$

którego  $z$ -owa składowa ma postać

$$J_z = \Lambda_z + \frac{1}{2}\Sigma_z. \quad (3.8)$$

### 3.3 Funkcje Sturma–Diraca–Coulomba

Funkcje Sturma–Diraca–Coulomba

$$\Phi_{n\kappa m}(\mathcal{E}, \mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \Phi_{n\kappa m}^U(\mathcal{E}, \mathbf{r}) \\ \Phi_{n\kappa m}^L(\mathcal{E}, \mathbf{r}) \end{pmatrix} = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} S_{n\kappa}(2\lambda r)\Omega_{\kappa m}(\mathbf{n}_r) \\ iT_{n\kappa}(2\lambda r)\Omega_{-\kappa m}(\mathbf{n}_r) \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

definiuje się jako jednoczesne funkcje własne operatorów  $\mathcal{K}$  oraz  $J_z$ , dla wartości własnych odpowiednio  $\kappa$  oraz  $m$ , będące zarazem nietrywialnymi rozwiązaniami następującego zagadnienia własnego:

$$\left[ -i\hbar\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta m_e c^2 - \mathcal{E}\mathcal{I} - \mathcal{M}_{n\kappa} \frac{Ze^2}{(4\pi\epsilon_0)r} \right] \Phi_{n\kappa m}(\mathcal{E}, \mathbf{r}) = 0, \quad (3.10)$$

$$r\Phi_{n\kappa m}(\mathcal{E}, \mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0, \quad r\Phi_{n\kappa m}(\mathcal{E}, \mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0. \quad (3.11)$$

W powyższym zagadnieniu  $\mathcal{E}$  oznacza parametr rzeczywisty, spełniający warunek

$$-m_e c^2 < \mathcal{E} < +m_e c^2, \quad (3.12)$$

zaś  $\mathcal{M}_{n\kappa}$  to macierz o wymiarach  $4 \times 4$ , zdefiniowana następująco:

$$\mathcal{M}_{n\kappa} = \begin{pmatrix} \mu_{n\kappa} I & 0 \\ 0 & \mu_{n\kappa}^{-1} I \end{pmatrix}, \quad (3.13)$$

gdzie  $\mu_{n\kappa}$  jest wartością własną zagadnienia (3.10)–(3.11).

Funkcje  $S_{n\kappa}(2\lambda r)$  oraz  $T_{n\kappa}(2\lambda r)$ , występujące odpowiednio w górnej  $\Phi_{n\kappa m}^U(\mathcal{E}, \mathbf{r})$  i dolnej

$\Phi_{n\kappa m}^L(\mathcal{E}, \mathbf{r})$  składowej funkcji  $\Phi_{n\kappa m}(\mathcal{E}, \mathbf{r})$ , to radialne funkcje Sturm–Diraca–Coulomba, w których – dla wygody późniejszych obliczeń – tradycyjną zmienną radialną  $r$  przeskalowano do postaci  $2\lambda r$ , przy czym

$$\lambda = \frac{\sqrt{(m_e c^2 - \mathcal{E})(m_e c^2 + \mathcal{E})}}{c\hbar}. \quad (3.14)$$

Do wyznaczenia jawnej postaci funkcji Sturm–Diraca–Coulomba (3.9) niezbędna jest znajomość funkcji radialnych  $S_{n\kappa}(2\lambda r)$  oraz  $T_{n\kappa}(2\lambda r)$ . Aby znaleźć wyrażenia opisujące radialne sturmiany, w zagadnieniu (3.10)–(3.11) dokonamy separacji części radialnej i kątowej. Wykorzystując jawne postacie macierzy  $\alpha$ ,  $\beta$  oraz  $\mathcal{M}_{n\kappa}$ , czyli wzory (2.6) i (3.13), uwzględniając także definicję stałej struktury subtelnej Sommerfelda (2.14), równanie (3.10) zapiszemy w postaci układu równań:

$$\begin{pmatrix} m_e c^2 - \mathcal{E} - \mu_{n\kappa} c\hbar \frac{\alpha Z}{r} & -i\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla} \\ -i\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla} & -m_e c^2 - \mathcal{E} - \mu_{n\kappa}^{-1} c\hbar \frac{\alpha Z}{r} \end{pmatrix} \Phi_{n\kappa m}(\mathcal{E}, \mathbf{r}) = 0. \quad (3.15)$$

Przedstawienie funkcji Sturm–Diraca–Coulomba w postaci dwuskładnikowej (3.9), tj. za pomocą jej górnej i dolnej składowej, pozwala przepisać powyższy układ równań w następującej formie:

$$\begin{cases} \left( m_e c^2 - \mathcal{E} - \mu_{n\kappa} c\hbar \frac{\alpha Z}{r} \right) \Phi_{n\kappa m}^U(\mathcal{E}, \mathbf{r}) - i\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla} \Phi_{n\kappa m}^L(\mathcal{E}, \mathbf{r}) = 0 \\ -i\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla} \Phi_{n\kappa m}^U(\mathcal{E}, \mathbf{r}) + \left( -m_e c^2 - \mathcal{E} - \mu_{n\kappa}^{-1} c\hbar \frac{\alpha Z}{r} \right) \Phi_{n\kappa m}^L(\mathcal{E}, \mathbf{r}) = 0. \end{cases} \quad (3.16)$$

Ponieważ – zgodnie z definicją (3.9) – funkcje  $\Phi_{n\kappa m}^U(\mathcal{E}, \mathbf{r})$  oraz  $\Phi_{n\kappa m}^L(\mathcal{E}, \mathbf{r})$  wyrażają się za pomocą funkcji radialnych oraz odpowiednich spinorów sferycznych, w powyższym układzie równań zastosujemy własność (A.42) dla spinorów sferycznych. Następnie, pierwsze z uzyskanych w ten sposób równań przemnożymy lewostronnie przez  $\Omega_{\kappa m}^\dagger(\mathbf{n}_r)$ , zaś drugie równanie również lewostronnie przez  $\Omega_{-\kappa m}^\dagger(\mathbf{n}_r)$ . Scałkowanie obu otrzymanych równości po pełnym kącie bryłowym, przy jednoczesnym wykorzystaniu własności ortonormalności spinorów sferycznych (A.34), doprowadza nas do wniosku, iż radialne funkcje Sturm–Diraca–Coulomba są nietrywialnymi rozwiązaniami następującego zagadnienia Sturm–Liouville’a:

$$\begin{pmatrix} \frac{m_e c^2 - \mathcal{E}}{c\hbar} - \mu_{n\kappa} \frac{\alpha Z}{r} & -\frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r} \\ \frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r} & -\frac{m_e c^2 + \mathcal{E}}{c\hbar} - \mu_{n\kappa}^{-1} \frac{\alpha Z}{r} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{n\kappa}(2\lambda r) \\ T_{n\kappa}(2\lambda r) \end{pmatrix} = 0 \quad (0 \leq r < \infty) \quad (3.17)$$

z warunkami brzegowymi

$$S_{n\kappa}(2\lambda r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0, \quad T_{n\kappa}(2\lambda r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0, \quad (3.18)$$

$$S_{n\kappa}(2\lambda r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0, \quad T_{n\kappa}(2\lambda r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0. \quad (3.19)$$

Jeżeli zmienną niezależną poddamy transformacji

$$x = 2\lambda r, \quad (3.20)$$

po czym wykorzystamy wzory (3.14) i (2.12), a także wprowadzimy parametr  $\varepsilon$  dany formułą

$$\varepsilon = \sqrt{\frac{m_e c^2 - \mathcal{E}}{m_e c^2 + \mathcal{E}}}, \quad (3.21)$$

to wówczas możliwe będzie przepisanie zagadnienia (3.17)–(3.19) w postaci układu

$$\begin{pmatrix} \frac{\varepsilon}{2} - \mu_{n\kappa} \frac{\zeta}{x} & -\frac{d}{dx} + \frac{\kappa}{x} \\ \frac{d}{dx} + \frac{\kappa}{x} & -\frac{\varepsilon^{-1}}{2} - \mu_{n\kappa}^{-1} \frac{\zeta}{x} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{n\kappa}(x) \\ T_{n\kappa}(x) \end{pmatrix} = 0 \quad (0 \leq x < \infty) \quad (3.22)$$

oraz

$$S_{n\kappa}(x) \xrightarrow{x \rightarrow 0} 0, \quad T_{n\kappa}(x) \xrightarrow{x \rightarrow 0} 0, \quad (3.23)$$

$$S_{n\kappa}(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0, \quad T_{n\kappa}(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0. \quad (3.24)$$

Aby znaleźć jawne postacie radialnych funkcji Sturma–Diraca–Coulomba, należy rozwiązać układ równań (3.22)–(3.24). Szczegóły rozwiązania tego zagadnienia zostały zawarte w pracy [39], zatem w rozprawie ograniczymy się do przedstawienia końcowych wzorów na radialne sturmiany.

Okazuje się, że wartości własne  $\mu_{n\kappa}$  analizowanego zagadnienia zależą od parametru  $\varepsilon$  [zdefiniowanego za pomocą wzoru (3.21)], tj.:  $\mu_{n\kappa} = \mu_{n\kappa}(\varepsilon)$ . Można opisać je wyrażeniem:

$$\mu_{n\kappa}(\varepsilon) = \frac{\varepsilon}{\zeta} (|n| + \gamma_\kappa + N_{n\kappa}) \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots), \quad (3.25)$$

gdzie  $n$  oznacza radialną liczbę kwantową, parametr  $\zeta$  zdefiniowano zgodnie z (2.12), wielkość  $\gamma_\kappa$  określono za pomocą wzoru (2.13), zaś

$$N_{n\kappa} = \pm \sqrt{(|n| + \gamma_\kappa)^2 + \zeta^2} = \pm \sqrt{|n|^2 + 2|n|\gamma_\kappa + \kappa^2} \quad (3.26)$$

jest rozszerzeniem definicji pozornej głównej liczby kwantowej (2.11) na przypadek dowolnych całkowitych radialnych liczb kwantowych  $n$ . Zwróćmy uwagę na to, iż liczba  $N_{n\kappa}$  może przyjmować zarówno wartości dodatnie, jak i ujemne. O tym, jaki znak należy wybrać w definicji (3.26), decydują poniższe wytyczne:

- znak *plus* wybieramy dla  $n > 0$
- znak *minus* wybieramy dla  $n < 0$
- jeśli  $n = 0$ , wybieramy znak *plus* dla  $\kappa < 0$ , natomiast znak *minus* dla  $\kappa > 0$ .

Radialne funkcje Sturma–Diraca–Coulomba, występujące w górnej oraz dolnej składowej funkcji (3.9), należące do wartości własnej (3.25), dane są wzorami:

$$S_{n\kappa}(x) = \sqrt{\frac{\alpha(|n| + 2\gamma_\kappa)|n|!}{2\varepsilon N_{n\kappa}(N_{n\kappa} - \kappa)\Gamma(|n| + 2\gamma_\kappa)}} x^{\gamma_\kappa} e^{-x/2} \left[ L_{|n|-1}^{(2\gamma_\kappa)}(x) + \frac{\kappa - N_{n\kappa}}{|n| + 2\gamma_\kappa} L_{|n|}^{(2\gamma_\kappa)}(x) \right] \quad (3.27)$$

oraz

$$T_{n\kappa}(x) = \sqrt{\frac{\alpha\varepsilon(|n| + 2\gamma_\kappa)|n|!}{2N_{n\kappa}(N_{n\kappa} - \kappa)\Gamma(|n| + 2\gamma_\kappa)}} x^{\gamma_\kappa} e^{-x/2} \left[ L_{|n|-1}^{(2\gamma_\kappa)}(x) - \frac{\kappa - N_{n\kappa}}{|n| + 2\gamma_\kappa} L_{|n|}^{(2\gamma_\kappa)}(x) \right]. \quad (3.28)$$

Opierając się o prace [39, 86–88], przedstawimy teraz kilka faktów dotyczących radialnych sturmianów:

- wartości własne  $\mu_{n\kappa}$  zagadnienia (3.22)–(3.24) są *rzeczywiste*,
- funkcje  $S_{n\kappa}(x)$  oraz  $T_{n\kappa}(x)$  można wybrać jako *rzeczywiste*,
- wartości własne  $\mu_{n\kappa}$  są *niezdegenerowane*,

- funkcje własne zagadnienia (3.22)–(3.24), czyli radialne sturmiany, odpowiadające *różnym* wartościom własnym  $\mu_{n\kappa}$  oraz  $\mu_{n'\kappa}$ , są do siebie *ortogonalne* w sensie

$$\int_0^\infty dx \frac{1}{x} \left[ \mu_{n\kappa} S_{n\kappa}(x) S_{n'\kappa}(x) - \mu_{n'\kappa}^{-1} T_{n\kappa}(x) T_{n'\kappa}(x) \right] = 0 \quad (n \neq n') \quad (3.29)$$

oraz

$$\int_0^\infty dx \left[ \varepsilon S_{n\kappa}(x) S_{n'\kappa}(x) + \varepsilon^{-1} T_{n\kappa}(x) T_{n'\kappa}(x) \right] = 0 \quad (n \neq n'), \quad (3.30)$$

- relacja *ortonormalności* dla radialnych sturmianów ma postać

$$\int_0^\infty dx \frac{Z}{x} \left[ \mu_{n\kappa} S_{n\kappa}(x) S_{n'\kappa}(x) - \mu_{n'\kappa}^{-1} T_{n\kappa}(x) T_{n'\kappa}(x) \right] = \delta_{nn'} \quad (3.31)$$

oraz

$$\frac{1}{2\alpha} \int_0^\infty dx \left[ \varepsilon S_{n\kappa}(x) S_{n'\kappa}(x) + \varepsilon^{-1} T_{n\kappa}(x) T_{n'\kappa}(x) \right] = \delta_{nn'}, \quad (3.32)$$

- zbiory

$$\left\{ \begin{pmatrix} S_{n\kappa}(x) \\ -\mu_{n\kappa}^{-1} T_{n\kappa}(x) \end{pmatrix} \right\} \quad \text{oraz} \quad \left\{ \begin{pmatrix} \mu_{n\kappa} S_{n\kappa}(x) \\ T_{n\kappa}(x) \end{pmatrix} \right\} \quad (3.33)$$

są zupełne na półprostej  $0 \leq x < \infty$ , przy czym relacja zupełności ma postać

$$\frac{Z}{x} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \begin{pmatrix} S_{n\kappa}(x) \\ -\mu_{n\kappa}^{-1} T_{n\kappa}(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu_{n\kappa} S_{n\kappa}(x') & T_{n\kappa}(x') \end{pmatrix} = \delta(x - x') I \quad (0 < x, x' < \infty), \quad (3.34)$$

- zbiory

$$\left\{ \begin{pmatrix} S_{n\kappa}(x) \\ T_{n\kappa}(x) \end{pmatrix} \right\} \quad \text{oraz} \quad \left\{ \begin{pmatrix} \varepsilon S_{n\kappa}(x) \\ \varepsilon^{-1} T_{n\kappa}(x) \end{pmatrix} \right\} \quad (3.35)$$

są zupełne na tej samej półprostej; odpowiednia relacja zupełności ma postać

$$\frac{1}{2\alpha} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \begin{pmatrix} S_{n\kappa}(x) \\ T_{n\kappa}(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon S_{n\kappa}(x') & \varepsilon^{-1} T_{n\kappa}(x') \end{pmatrix} = \delta(x - x') I \quad (0 < x, x' < \infty). \quad (3.36)$$

W powyższych wyrażeniach  $\delta(x - x')$  oznacza jednowymiarową deltę Diraca.

Relacja ortonormalności dla zbioru funkcji Sturm–Diraca–Coulomba (3.9) wygląda następująco:

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r} \frac{Z}{r} \Phi_{n\kappa m}^\dagger(\mathcal{E}, \mathbf{r}) \mathcal{U}_{n\kappa} \mathcal{V}_{n'\kappa'} \Phi_{n'\kappa' m'}(\mathcal{E}, \mathbf{r}) = \delta_{nn'} \delta_{\kappa\kappa'} \delta_{mm'}, \quad (3.37)$$

natomiast relacja zupełności dla tych funkcji ma postać

$$\frac{Z}{r} \sum_{n\kappa m} \mathcal{V}_{n\kappa} \Phi_{n\kappa m}(\mathcal{E}, \mathbf{r}) \Phi_{n\kappa m}^\dagger(\mathcal{E}, \mathbf{r}') \mathcal{U}_{n\kappa} = \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathcal{I}, \quad (3.38)$$

przy czym  $\mathcal{U}_{n\kappa}$  oraz  $\mathcal{V}_{n\kappa}$  to macierze o wymiarach  $4 \times 4$  określone za pomocą wzorów

$$\mathcal{U}_{n\kappa} = \begin{pmatrix} \mu_{n\kappa}(\varepsilon) I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix}, \quad \mathcal{V}_{n\kappa} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -\mu_{n\kappa}^{-1}(\varepsilon) I \end{pmatrix}. \quad (3.39)$$

### 3.4 Uogólniona funkcja Greena

Wpływ zewnętrznego pola magnetycznego na atom opisywany jest w niniejszej rozprawie za pomocą rachunku zaburzeń pierwszego rzędu. Oznacza to, iż w wykonywanych obliczeniach niezbędna jest znajomość pierwszej poprawki do funkcji falowej elektronu. Poprawkę tę, zgodnie ze wzorem (2.32), można wyrazić za pomocą uogólnionej funkcji Greena dla zagadnienia Diraca–Coulomba (2.28)–(2.29) przy energii  $E_{n\kappa}^{(0)}$  niezaburzonego stanu atomu danej wzorem (2.10).

Aby wyznaczyć jawną postać uogólnionej funkcji Greena–Diraca–Coulomba, wygodnie jest zapisać jej rozwinięcie multipolowe [39, 89, 90]:

$$\bar{G}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2} \sum_{\substack{\kappa'=-\infty \\ (\kappa' \neq 0)}}^{\infty} \sum_{m=-|\kappa'|+1/2}^{|\kappa'|-1/2} \frac{1}{r r'} \times \begin{pmatrix} \bar{g}_{(++)\kappa'}^{(0)}(r, r') \Omega_{\kappa'm}(\mathbf{n}_r) \Omega_{\kappa'm}^\dagger(\mathbf{n}_{r'}) & -i\bar{g}_{(+-)\kappa'}^{(0)}(r, r') \Omega_{\kappa'm}(\mathbf{n}_r) \Omega_{-\kappa'm}^\dagger(\mathbf{n}_{r'}) \\ i\bar{g}_{(-+)\kappa'}^{(0)}(r, r') \Omega_{-\kappa'm}(\mathbf{n}_r) \Omega_{\kappa'm}^\dagger(\mathbf{n}_{r'}) & \bar{g}_{(--)\kappa'}^{(0)}(r, r') \Omega_{-\kappa'm}(\mathbf{n}_r) \Omega_{-\kappa'm}^\dagger(\mathbf{n}_{r'}) \end{pmatrix}. \quad (3.40)$$

Obecne w powyższym wzorze cztery funkcje  $\bar{g}_{(\pm\pm)\kappa'}^{(0)}(r, r')$  tworzą uogólnioną radialną funkcję Greena

$$\bar{G}_{\kappa'}^{(0)}(r, r') = \begin{pmatrix} \bar{g}_{(++)\kappa'}^{(0)}(r, r') & \bar{g}_{(+-)\kappa'}^{(0)}(r, r') \\ \bar{g}_{(-+)\kappa'}^{(0)}(r, r') & \bar{g}_{(--)\kappa'}^{(0)}(r, r') \end{pmatrix}, \quad (3.41)$$

której jawną postać uzyskuje się, na przykład, poprzez rozwinięcie jej w bazie radialnych funkcji Sturm–Diraca–Coulomba (3.27)–(3.28).

W zależności od relacji pomiędzy liczbami  $\kappa'$  (wykorzystywanej do indeksowania radialnych Sturmianów) oraz  $\kappa$  (określającej stan atomu izolowanego), rozwinięcie funkcji (3.41) w bazie Sturmowskiej może mieć dwojaką postać [39]:

- gdy  $\kappa' \neq \kappa$ , mamy

$$\bar{G}_{\kappa'}^{(0)}(r, r') = \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\mu_{n'\kappa'}^{(0)} - 1} \begin{pmatrix} S_{n'\kappa'}^{(0)}(2\lambda r) \\ T_{n'\kappa'}^{(0)}(2\lambda r) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu_{n'\kappa'}^{(0)} S_{n'\kappa'}^{(0)}(2\lambda r') & T_{n'\kappa'}^{(0)}(2\lambda r') \end{pmatrix}, \quad (3.42)$$

- gdy  $\kappa' = \kappa$ , mamy

$$\begin{aligned} \bar{G}_{\kappa}^{(0)}(r, r') &= \sum_{\substack{n'=-\infty \\ (n' \neq n)}}^{\infty} \frac{1}{\mu_{n'\kappa}^{(0)} - 1} \begin{pmatrix} S_{n'\kappa}^{(0)}(2\lambda r) \\ T_{n'\kappa}^{(0)}(2\lambda r) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu_{n'\kappa}^{(0)} S_{n'\kappa}^{(0)}(2\lambda r') & T_{n'\kappa}^{(0)}(2\lambda r') \end{pmatrix} \\ &+ \frac{2E_{n\kappa}^{(0)} - m_e c^2}{2m_e c^2} \begin{pmatrix} S_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r) \\ T_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r') & T_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r') \end{pmatrix} \\ &+ \begin{pmatrix} I_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r) \\ K_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r') & T_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r') \end{pmatrix} \\ &+ \begin{pmatrix} S_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r) \\ T_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r') & K_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r') \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.43)$$

Ponieważ uogólniona funkcja Greena zdefiniowana została dla wartości energii atomu izolowanego, danej wzorem (2.10), w definicjach (3.14) oraz (3.21) przyjmujemy parametr  $\mathcal{E}$  jako równy tej energii, tj.:

$$\mathcal{E} = m_e c^2 \frac{n + \gamma_\kappa}{N_{n\kappa}}. \quad (3.44)$$



Takie podstawienie pozwala zapisać, iż w począwszy od wzoru (3.42) parametry  $\lambda$  i  $\epsilon_{n\kappa}$  określone będą za pomocą wzorów:

$$\lambda \equiv \lambda_{n\kappa} = \frac{Z}{a_0 N_{n\kappa}} \quad (3.45)$$

oraz

$$\epsilon_{n\kappa} = \sqrt{\frac{1 - \epsilon_{n\kappa}}{1 + \epsilon_{n\kappa}}}, \quad (3.46)$$

a w konsekwencji

$$\mu_{n'\kappa'}^{(0)} = \frac{|n'| + \gamma_{\kappa'} + N_{n'\kappa'}}{n + \gamma_{\kappa} + N_{n\kappa}}, \quad (3.47)$$

zaś wyrażenia na radialne funkcje Sturm–Diraca–Coulomba, które będą wykorzystywane do obliczeń w niniejszej rozprawie, przyjmują postać<sup>8</sup>:

$$\begin{aligned} S_{n'\kappa'}^{(0)}(2\lambda r) &= \sqrt{\frac{\alpha\sqrt{1 + \epsilon_{n\kappa}}(|n'| + 2\gamma_{\kappa'})|n'|!}{2\sqrt{1 - \epsilon_{n\kappa}}N_{n'\kappa'}(N_{n'\kappa'} - \kappa')\Gamma(|n'| + 2\gamma_{\kappa'})}} \\ &\times (2\lambda r)^{\gamma_{\kappa'}} e^{-\lambda r} \left[ L_{|n'|-1}^{(2\gamma_{\kappa'})}(2\lambda r) + \frac{\kappa' - N_{n'\kappa'}}{|n'| + 2\gamma_{\kappa'}} L_{|n'|}^{(2\gamma_{\kappa'})}(2\lambda r) \right] \end{aligned} \quad (3.48)$$

oraz

$$\begin{aligned} T_{n'\kappa'}^{(0)}(2\lambda r) &= \sqrt{\frac{\alpha\sqrt{1 - \epsilon_{n\kappa}}(|n'| + 2\gamma_{\kappa'})|n'|!}{2\sqrt{1 + \epsilon_{n\kappa}}N_{n'\kappa'}(N_{n'\kappa'} - \kappa')\Gamma(|n'| + 2\gamma_{\kappa'})}} \\ &\times (2\lambda r)^{\gamma_{\kappa'}} e^{-\lambda r} \left[ L_{|n'|-1}^{(2\gamma_{\kappa'})}(2\lambda r) - \frac{\kappa' - N_{n'\kappa'}}{|n'| + 2\gamma_{\kappa'}} L_{|n'|}^{(2\gamma_{\kappa'})}(2\lambda r) \right]. \end{aligned} \quad (3.49)$$

Wielkość  $\epsilon_{n\kappa}$  występująca w powyższych wzorach jest określona wzorem (2.20), natomiast wybór argumentu radialnych sturmianów w postaci  $2\lambda r$  został podyktowany wygodą późniejszych obliczeń.

Funkcje  $I_{n\kappa}^{(0)}$ ,  $J_{n\kappa}^{(0)}$  oraz  $K_{n\kappa}^{(0)}$  obecne w rozwinięciu (3.43) są zdefiniowane w następujący sposób [39]:

$$I_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r) = \epsilon_{n\kappa} \left[ r \frac{dS_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r)}{dr} - \frac{1}{2\epsilon_{n\kappa}} S_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r) \right], \quad (3.50)$$

$$J_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r) = \epsilon_{n\kappa} \left[ r \frac{dS_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r)}{dr} + \frac{1}{2\epsilon_{n\kappa}} S_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r) \right], \quad (3.51)$$

$$K_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r) = \epsilon_{n\kappa} \left[ r \frac{dT_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r)}{dr} + \frac{1}{2\epsilon_{n\kappa}} T_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r) \right]. \quad (3.52)$$

---

<sup>8</sup>Ponieważ parametr  $\lambda$ , zadany zależnością (3.45), występuje w argumentach wielokrotnie wykorzystywanych w rozprawie radialnych sturmianów, dla przejrzystości prezentowanych rachunków, zrezygnowano z indeksowania go liczbami kwantowymi  $n$  oraz  $\kappa$ .

## 4 Magnetyczny moment dipolowy

### 4.1 Wprowadzenie

Jak już zostało wspomniane we wstępie, celem niniejszej rozprawy jest m.in. opis wpływu pola magnetycznego na rozkłady gęstości prądu i ładunku elektrycznego w atomie, które wygodnie jest charakteryzować poprzez ich momenty multipolowe. Aby zwięźle opisać modyfikacje tych rozkładów, należy rozważyć proces indukowania się dodatkowych multipolowych momentów magnetycznych (lub elektrycznych) w układzie. Z fizycznego punktu widzenia najbardziej interesujące są najniższe momenty elektromagnetyczne, jakie mają szansę wyindukować się w atomie pod wpływem przyłożenia zewnętrznego pola magnetycznego. Multipole wyższych rzędów bardzo często są pomijane w większości rozważań, gdyż im wyższy rząd momentu elektromagnetycznego, tym szybciej jego potencjał zanika dla dużych odległości rozpatrywanego punktu od jądra. W związku z tym, naturalną rzeczą będzie przeprowadzenie analizy magnetycznego momentu dipolowego, czym zajmiemy się w niniejszym rozdziale.

### 4.2 Definicja

Rozważmy ograniczony przestrzennie statyczny rozkład prądów elektrycznych, opisany za pomocą funkcji gęstości prądu  $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ . Magnetyczny moment dipolowy takiego układu fizycznego definiujemy jako [17, 18]

$$\mathbf{m} = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r} \mathbf{r} \times \mathbf{j}(\mathbf{r}). \quad (4.1)$$

Powyższa definicja jest przypadkiem szczególnym szerszej definicji rodziny magnetycznych momentów multipolowych, których składowe sferyczne mają postać [91, 92]

$$M_{LM} = -\frac{1}{L+1} \sqrt{\frac{4\pi}{2L+1}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r} r^L Y_{LM}(\mathbf{n}_r) (\mathbf{r} \times \nabla) \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}), \quad (4.2)$$

gdzie  $Y_{LM}(\mathbf{n}_r)$  to zespolona harmonika sferyczna zdefiniowana za pomocą wzoru (A.17).

### 4.3 Indukowany magnetyczny moment dipolowy

Do wyznaczenia magnetycznego momentu dipolowego w relatywistycznym atomie jednoelektronowym zastosujemy formalizm rachunku zaburzeń, który umożliwi wyznaczenie tej wielkości z dokładnością do wyrazów pierwszego rzędu ze względu na zaburzenie, czyli zewnętrzne pole magnetyczne  $\mathcal{B}$ . Pole to, według poczynionych wcześniej założeń, jest skierowane wzdłuż osi  $z$  kartezjańskiego układu współrzędnych. Jeżeli w definicji (4.1) uwzględnimy wzory (2.49), (2.51) oraz (2.53), wówczas otrzymamy zależność

$$\mathbf{m} \simeq \mathbf{m}^{(0)} + \mathbf{m}^{(1)}, \quad (4.3)$$

w której

$$\mathbf{m}^{(0)} = -\frac{1}{2} ec \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r} \Psi^{(0)\dagger}(\mathbf{r}) (\mathbf{r} \times \boldsymbol{\alpha}) \Psi^{(0)}(\mathbf{r}) \quad (4.4)$$

oznacza magnetyczny moment dipolowy atomu izolowanego, natomiast

$$\mathbf{m}^{(1)} = -ec \operatorname{Re} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r} \Psi^{(0)\dagger}(\mathbf{r}) (\mathbf{r} \times \boldsymbol{\alpha}) \Psi^{(1)}(\mathbf{r}) \quad (4.5)$$

to indukowany magnetyczny moment dipolowy.

Składowe kartezjańskie wektora magnetycznego momentu dipolowego (4.4) wyznaczymy, przemnażając go skalarnie przez wersor  $\mathbf{n}_\alpha$ , gdzie  $\alpha \in \{x, y, z\}$ , tj.:

$$\mathbf{n}_\alpha \cdot \mathbf{m}^{(0)} = -\frac{1}{2} ec \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r} r \Psi^{(0)\dagger}(\mathbf{r}) \mathbf{n}_\alpha \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\alpha}) \Psi^{(0)}(\mathbf{r}). \quad (4.6)$$

W kolejnym kroku wstawiamy postać funkcji falowej (2.15), po czym całkę występującą po prawej stronie powyższego wyrażenia zapiszemy we współrzędnych sferycznych. Dostajemy

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_\alpha \cdot \mathbf{m}^{(0)} &= -\frac{i}{2} ec \int_0^\infty dr r P_{n\kappa}^{(0)}(r) Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \\ &\quad \times \oint_{4\pi} d^2 \mathbf{n}_r \left[ \Omega_{\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}_r) \mathbf{n}_\alpha \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa\mu}(\mathbf{n}_r) - \Omega_{-\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}_r) \mathbf{n}_\alpha \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu}(\mathbf{n}_r) \right]. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Korzystając kolejno z relacji (A.12)–(A.14) oraz (A.37)–(A.38), dokonując całkowania po kątach, przy jednoczesnym wykorzystaniu wzoru (A.34), dochodzimy do następujących rezultatów:

$$m_x^{(0)} = \mathbf{n}_x \cdot \mathbf{m}^{(0)} = 0, \quad (4.8)$$

$$m_y^{(0)} = \mathbf{n}_y \cdot \mathbf{m}^{(0)} = 0, \quad (4.9)$$

$$m_z^{(0)} = \mathbf{n}_z \cdot \mathbf{m}^{(0)} = -\frac{4\kappa\mu}{4\kappa^2 - 1} ec \int_0^\infty dr r P_{n\kappa}^{(0)}(r) Q_{n\kappa}^{(0)}(r). \quad (4.10)$$

Występująca powyżej całka radialna pojawiła się już przy okazji liczenia pierwszej poprawki do energii omawianego układu; jej wartość została wyznaczona w uzupełnieniu C. Po uwzględnieniu wzorów (C.18) i (C.26) oraz zależności (4.8)–(4.10), możemy zapisać, iż magnetyczny moment dipolowy izolowanego atomu jednoelektronowego wynosi

$$\mathbf{m}^{(0)} = -\frac{2\kappa\mu}{N_{n\kappa}} \frac{2\kappa(n + \gamma_\kappa) - N_{n\kappa}}{4\kappa^2 - 1} \mu_B \mathbf{n}_z, \quad (4.11)$$

gdzie  $\mu_B$  jest magnetonem Bohra.

W celu wyznaczenia indukowanego magnetycznego momentu dipolowego, w pierwszej kolejności do wyrażenia (4.5) wstawiamy wzór na zaburzoną funkcję falową (2.32). Otrzymujemy wówczas

$$\mathbf{m}^{(1)} = \frac{1}{2} e^2 c^2 \operatorname{Re} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \mathbf{r} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \mathbf{r}' \Psi^{(0)\dagger}(\mathbf{r}) (\mathbf{r} \times \boldsymbol{\alpha}) \bar{G}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathcal{B} \cdot (\mathbf{r}' \times \boldsymbol{\alpha}) \Psi^{(0)}(\mathbf{r}'), \quad (4.12)$$

lub równoważnie

$$\left( \frac{\mu_0}{4\pi} \right) \mathbf{m}^{(1)} = \left[ \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \operatorname{Re} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \mathbf{r} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \mathbf{r}' \Psi^{(0)\dagger}(\mathbf{r}) (\mathbf{r} \times \boldsymbol{\alpha}) \bar{G}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') (\mathbf{r}' \times \boldsymbol{\alpha}) \Psi^{(0)}(\mathbf{r}') \right] \cdot \mathcal{B}, \quad (4.13)$$

przy czym skorzystano tutaj z zależności  $\mu_0 \epsilon_0 c^2 = 1$ . Rozpiszmy iloczyn skalarny z równania (4.13) w taki sposób:

$$\left( \frac{\mu_0}{4\pi} \right) \mathbf{m}^{(1)} = \mathbf{n}_x \chi_{xz} \mathcal{B}_z + \mathbf{n}_y \chi_{yz} \mathcal{B}_z + \mathbf{n}_z \chi_{zz} \mathcal{B}_z. \quad (4.14)$$

Współczynniki liczbowe  $\chi_{xz}$ ,  $\chi_{yz}$ ,  $\chi_{zz}$  określają składowe magnetycznego momentu dipolowego indukującego się w atomie pod wpływem zaburzenia  $\mathcal{B} = \mathcal{B}_z \mathbf{n}_z$ , odpowiednio w kierunkach osi  $x$ ,  $y$  oraz  $z$ . W oparciu o wzory (4.13) oraz (4.14) możemy napisać, że wynoszą one

$$\chi_{xz} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \operatorname{Re} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \mathbf{r} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \mathbf{r}' \left[ \mathbf{n}_x \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\alpha}) \Psi^{(0)}(\mathbf{r}) \right]^\dagger r \bar{G}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') r' \left[ \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\alpha}) \Psi^{(0)}(\mathbf{r}') \right], \quad (4.15)$$

$$\chi_{yz} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \operatorname{Re} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \mathbf{r} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \mathbf{r}' \left[ \mathbf{n}_y \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\alpha}) \Psi^{(0)}(\mathbf{r}) \right]^\dagger r \bar{G}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') r' \left[ \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\alpha}) \Psi^{(0)}(\mathbf{r}') \right], \quad (4.16)$$

$$\chi_{zz} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \text{Re} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}' \left[ \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\alpha}) \Psi^{(0)}(\mathbf{r}) \right]^\dagger r \bar{G}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') r' \left[ \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\alpha}) \Psi^{(0)}(\mathbf{r}') \right]. \quad (4.17)$$

We wzorze (4.17) symbol Re można pominąć, ponieważ prawa strona tej równości reprezentuje element diagonalny macierzy operatora hermitowskiego, którego jądrem jest zredukowana funkcja Greena  $\bar{G}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ .

Wstawiając funkcje falowe w postaci (2.15) oraz wykorzystując rozwinięcie multipolowe uogólnionej funkcji Greena–Diraca–Coulomba (3.40), a następnie zapisując powyższe całki we współrzędnych sferycznych<sup>9</sup>, otrzymujemy

$$\begin{aligned} \chi_{xz} = & \frac{1}{2} \text{Re} \sum_{\substack{\kappa'=-\infty \\ (\kappa' \neq 0)}}^{\infty} \sum_{m=-|\kappa'|+\frac{1}{2}}^{|\kappa'|\frac{1}{2}} \int_0^\infty dr \int_0^\infty dr' r r' \\ & \times \left[ Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \bar{g}_{(++)\kappa'}^{(0)}(r, r') Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \langle \mathbf{n}_x \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa\mu} | \Omega_{\kappa'm} \rangle \langle \Omega_{\kappa'm} | \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa\mu} \rangle \right. \\ & - P_{n\kappa}^{(0)}(r) \bar{g}_{(-+)\kappa'}^{(0)}(r, r') Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \langle \mathbf{n}_x \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu} | \Omega_{-\kappa'm} \rangle \langle \Omega_{\kappa'm} | \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa\mu} \rangle \\ & - Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \bar{g}_{(+-)\kappa'}^{(0)}(r, r') P_{n\kappa}^{(0)}(r') \langle \mathbf{n}_x \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa\mu} | \Omega_{\kappa'm} \rangle \langle \Omega_{-\kappa'm} | \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu} \rangle \\ & \left. + P_{n\kappa}^{(0)}(r) \bar{g}_{(--)\kappa'}^{(0)}(r, r') P_{n\kappa}^{(0)}(r') \langle \mathbf{n}_x \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu} | \Omega_{-\kappa'm} \rangle \langle \Omega_{-\kappa'm} | \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu} \rangle \right], \quad (4.18) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \chi_{yz} = & \frac{1}{2} \text{Re} \sum_{\substack{\kappa'=-\infty \\ (\kappa' \neq 0)}}^{\infty} \sum_{m=-|\kappa'|+\frac{1}{2}}^{|\kappa'|\frac{1}{2}} \int_0^\infty dr \int_0^\infty dr' r r' \\ & \times \left[ Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \bar{g}_{(++)\kappa'}^{(0)}(r, r') Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \langle \mathbf{n}_y \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa\mu} | \Omega_{\kappa'm} \rangle \langle \Omega_{\kappa'm} | \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa\mu} \rangle \right. \\ & - P_{n\kappa}^{(0)}(r) \bar{g}_{(-+)\kappa'}^{(0)}(r, r') Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \langle \mathbf{n}_y \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu} | \Omega_{-\kappa'm} \rangle \langle \Omega_{\kappa'm} | \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa\mu} \rangle \\ & - Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \bar{g}_{(+-)\kappa'}^{(0)}(r, r') P_{n\kappa}^{(0)}(r') \langle \mathbf{n}_y \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa\mu} | \Omega_{\kappa'm} \rangle \langle \Omega_{-\kappa'm} | \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu} \rangle \\ & \left. + P_{n\kappa}^{(0)}(r) \bar{g}_{(--)\kappa'}^{(0)}(r, r') P_{n\kappa}^{(0)}(r') \langle \mathbf{n}_y \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu} | \Omega_{-\kappa'm} \rangle \langle \Omega_{-\kappa'm} | \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu} \rangle \right], \quad (4.19) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \chi_{zz} = & \frac{1}{2} \sum_{\substack{\kappa'=-\infty \\ (\kappa' \neq 0)}}^{\infty} \sum_{m=-|\kappa'|+\frac{1}{2}}^{|\kappa'|\frac{1}{2}} \int_0^\infty dr \int_0^\infty dr' r r' \\ & \times \left[ Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \bar{g}_{(++)\kappa'}^{(0)}(r, r') Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \langle \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa\mu} | \Omega_{\kappa'm} \rangle \langle \Omega_{\kappa'm} | \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa\mu} \rangle \right. \\ & - P_{n\kappa}^{(0)}(r) \bar{g}_{(-+)\kappa'}^{(0)}(r, r') Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \langle \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu} | \Omega_{-\kappa'm} \rangle \langle \Omega_{\kappa'm} | \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa\mu} \rangle \\ & - Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \bar{g}_{(+-)\kappa'}^{(0)}(r, r') P_{n\kappa}^{(0)}(r') \langle \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa\mu} | \Omega_{\kappa'm} \rangle \langle \Omega_{-\kappa'm} | \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu} \rangle \\ & \left. + P_{n\kappa}^{(0)}(r) \bar{g}_{(--)\kappa'}^{(0)}(r, r') P_{n\kappa}^{(0)}(r') \langle \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu} | \Omega_{-\kappa'm} \rangle \langle \Omega_{-\kappa'm} | \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu} \rangle \right]. \quad (4.20) \end{aligned}$$

<sup>9</sup>Mając na uwadze przejrzystość prezentowanych wzorów, w niektórych miejscach w niniejszej rozprawie (jak na przykład tutaj) do oznaczenia całek kątowych zastosowano notację *braketową*.

Wykorzystując w powyższych wyrażeniach wzory (A.12)–(A.14) oraz relacje (A.37)–(A.38), dokonując następnie całkowania po kątach, uwzględniając przy tym relację ortonormalności dla spinorów sferycznych (A.34), dochodzimy do następujących rezultatów:

$$\chi_{xz} = 0, \quad (4.21)$$

$$\chi_{yz} = 0, \quad (4.22)$$

$$\begin{aligned} \chi_{zz} = & \sum_{\kappa'} \int_0^\infty dr \int_0^\infty dr' \begin{pmatrix} Q_{n\kappa}^{(0)}(r) & P_{n\kappa}^{(0)}(r) \end{pmatrix} r \bar{G}_{\kappa'}^{(0)}(r, r') r' \begin{pmatrix} Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \\ P_{n\kappa}^{(0)}(r') \end{pmatrix} \\ & \times \left[ \frac{8\kappa^2\mu^2}{(4\kappa^2-1)^2} \delta_{\kappa',\kappa} + \frac{\left(\kappa + \frac{1}{2}\right)^2 - \mu^2}{2(2\kappa+1)^2} \delta_{\kappa',-\kappa-1} + \frac{\left(\kappa - \frac{1}{2}\right)^2 - \mu^2}{2(2\kappa-1)^2} \delta_{\kappa',-\kappa+1} \right], \end{aligned} \quad (4.23)$$

gdzie  $\bar{G}_{\kappa'}^{(0)}(r, r')$  to uogólniona radialna funkcja Greena (3.41). Jeśli w równaniu (4.14) uwzględnimy wzory (4.21)–(4.22), otrzymamy zależność

$$\left(\frac{\mu_0}{4\pi}\right) \mathbf{m}^{(1)} = \mathbf{n}_z \chi_{zz} \mathcal{B}_z, \quad (4.24)$$

z której wynika, iż w jednoelektronowym atomie Diraca powstanie dodatkowy magnetyczny moment dipolowy o kierunku zgodnym z kierunkiem przyłożonego pola magnetycznego, które go wyindukowało.

Wielkość  $\chi_{zz}$  od tej pory będziemy oznaczać symbolem  $\chi$  i będziemy ją nazywać *magnetyzowalnością* (lub też *podatnością magnetyczną*) atomu. Przy zastosowaniu tej konwencji, równanie (4.24) wygodnie jest przepisać w postaci

$$\mathbf{m}^{(1)} = \left(\frac{\mu_0}{4\pi}\right)^{-1} \chi \mathcal{B}. \quad (4.25)$$

#### 4.4 Magnetyzowalność

Przejdziemy teraz do ilościowego wyznaczenia magnetyzowalności dla relatywistycznego atomu jednoelektronowego, znajdującego się w dowolnym dyskretnym stanie energetycznym. Zgodnie z uwagą kończącą poprzedni podrozdział, a także w oparciu o wzór (4.23), możemy zapisać, iż wynosi ona

$$\chi = \chi_\kappa + \chi_{-\kappa+1} + \chi_{-\kappa-1}, \quad (4.26)$$

gdzie

$$\chi_\kappa = \frac{8\kappa^2\mu^2}{(4\kappa^2-1)^2} \int_0^\infty dr \int_0^\infty dr' \begin{pmatrix} Q_{n\kappa}^{(0)}(r) & P_{n\kappa}^{(0)}(r) \end{pmatrix} r \bar{G}_\kappa^{(0)}(r, r') r' \begin{pmatrix} Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \\ P_{n\kappa}^{(0)}(r') \end{pmatrix} \quad (4.27)$$

oraz

$$\begin{aligned} \chi_{-\kappa+1} + \chi_{-\kappa-1} = & \sum_{\kappa'} \int_0^\infty dr \int_0^\infty dr' \begin{pmatrix} Q_{n\kappa}^{(0)}(r) & P_{n\kappa}^{(0)}(r) \end{pmatrix} r \bar{G}_{\kappa'}^{(0)}(r, r') r' \begin{pmatrix} Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \\ P_{n\kappa}^{(0)}(r') \end{pmatrix} \\ & \times \left[ \frac{(2\kappa-1)^2 - 4\mu^2}{8(2\kappa-1)^2} \delta_{\kappa',-\kappa+1} + \frac{(2\kappa+1)^2 - 4\mu^2}{8(2\kappa+1)^2} \delta_{\kappa',-\kappa-1} \right]. \end{aligned} \quad (4.28)$$

W pierwszej kolejności zajmiemy się wyznaczeniem składnika  $\chi_\kappa$ . Biorąc pod uwagę wzór (4.27), można napisać

$$\chi_\kappa = \frac{8\kappa^2 \mu^2}{(4\kappa^2 - 1)^2} I_{\kappa\chi}, \quad (4.29)$$

gdzie  $I_{\kappa\chi}$  oznacza podwójną całkę radialną, zdefiniowaną następująco:

$$I_{\kappa\chi} = \int_0^\infty dr \int_0^\infty dr' \begin{pmatrix} Q_{n\kappa}^{(0)}(r) & P_{n\kappa}^{(0)}(r) \end{pmatrix} r \bar{G}_\kappa^{(0)}(r, r') r' \begin{pmatrix} Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \\ P_{n\kappa}^{(0)}(r') \end{pmatrix}. \quad (4.30)$$

Jeżeli do powyższego wyrażenia wstawimy funkcję Greena daną wzorem (3.43), będziemy mogli rozbić tę całkę na sumę czterech składników:

$$I_{\kappa\chi} = \tilde{I}_{\kappa\chi}^{(\infty)} + \tilde{I}_\kappa^{(a)}(1, 1) + \tilde{I}_\kappa^{(b)}(1, 1) + \tilde{I}_\kappa^{(c)}(1, 1), \quad (4.31)$$

przy czym

$$\begin{aligned} \tilde{I}_{\kappa\chi}^{(\infty)} &= \sum_{\substack{n'=-\infty \\ (n' \neq n)}}^{\infty} \frac{1}{\mu_{n'\kappa}^{(0)} - 1} \int_0^\infty dr r \left( Q_{n\kappa}^{(0)}(r) S_{n'\kappa}^{(0)}(2\lambda r) + P_{n\kappa}^{(0)}(r) T_{n'\kappa}^{(0)}(2\lambda r) \right) \\ &\quad \times \int_0^\infty dr' r' \left( \mu_{n'\kappa}^{(0)} Q_{n\kappa}^{(0)}(r') S_{n'\kappa}^{(0)}(2\lambda r') + P_{n\kappa}^{(0)}(r') T_{n'\kappa}^{(0)}(2\lambda r') \right) \end{aligned} \quad (4.32)$$

z wartością własną  $\mu_{n'\kappa}^{(0)}$  wynoszącą [zgodnie z (3.47)]

$$\mu_{n'\kappa}^{(0)} = \frac{|n'| + \gamma_\kappa + N_{n'\kappa}}{n + \gamma_\kappa + N_{n\kappa}}, \quad (4.33)$$

natomiast  $\tilde{I}_\kappa^{(a)}(1, 1)$ ,  $\tilde{I}_\kappa^{(b)}(1, 1)$  oraz  $\tilde{I}_\kappa^{(c)}(1, 1)$  to całki radialne zdefiniowane za pomocą wzorów (C.29)–(C.31). Na podstawie rozważań przeprowadzonych w uzupełnieniu C, a w szczególności w oparciu o wzór (C.39), możemy zapisać, że

$$\tilde{I}_\kappa^{(a)}(1, 1) + \tilde{I}_\kappa^{(c)}(1, 1) = 0, \quad (4.34)$$

zatem

$$I_{\kappa\chi} = \tilde{I}_{\kappa\chi}^{(\infty)} + \tilde{I}_\kappa^{(b)}(1, 1). \quad (4.35)$$

Wartość całki  $\tilde{I}_\kappa^{(b)}(1, 1)$  otrzymamy, kładąc  $t = 1$  oraz  $k = 1$  w równaniu (C.40); dostajemy

$$\tilde{I}_\kappa^{(b)}(1, 1) = -4\epsilon_{n\kappa} \frac{a_0 N_{n\kappa}^2}{Z^2} \left[ \int_0^\infty dr r P_{n\kappa}(r) Q_{n\kappa}(r) \right]^2. \quad (4.36)$$

Wykorzystując następnie wzory (C.18), (C.26) oraz (2.20), otrzymujemy ostatecznie

$$\tilde{I}_\kappa^{(b)}(1, 1) = -\frac{\alpha^2 a_0^3 (n + \gamma_\kappa) [2\kappa(n + \gamma_\kappa) - N_{n\kappa}]^2}{Z^2 4N_{n\kappa}}. \quad (4.37)$$

Wyznaczenie składnika  $\tilde{I}_{\kappa\chi}^{(\infty)}$  okazuje się być znacznie bardziej pracochłonne. Przepiszmy jego definicję (4.32) w następujący sposób:

$$\tilde{I}_{\kappa\chi}^{(\infty)} = \sum_{\substack{n'=-\infty \\ (n' \neq n)}}^{\infty} \frac{\mathcal{J}_1(1, 1) \mathcal{J}_1(1, \mu_{n'\kappa}^{(0)})}{\mu_{n'\kappa}^{(0)} - 1}. \quad (4.38)$$

Pojawiające się tutaj wielkości  $\mathcal{J}_1(1, 1)$  oraz  $\mathcal{J}_1(1, \mu_{n'\kappa}^{(0)})$  to całki radialne zdefiniowane za pomocą (C.10). Wykorzystując ich jawne postacie, czyli odpowiednio wzory (C.12) i (C.14), uwzględniając także (C.15), otrzymujemy

$$\begin{aligned}
\tilde{I}_{\kappa\chi}^{(\infty)} &= \frac{\alpha^2 a_0^3 \Gamma(n + 2\gamma_\kappa + 1) N_{n\kappa}}{Z^2} \sum_{\substack{n'=-\infty \\ (n' \neq n)}}^{\infty} \frac{|n'|!}{N_{n'\kappa} (N_{n'\kappa} - \kappa) \Gamma(|n'| + 2\gamma_\kappa + 1)} \\
&\times \left\{ n^2 \left( \frac{\mu_{n'\kappa}^{(0)} + 1}{\mu_{n'\kappa}^{(0)} - 1} \left[ (\kappa - N_{n\kappa})(\kappa - N_{n'\kappa}) - (n-1)(n + 2\gamma_\kappa - 1) \right]^2 \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + (\kappa - N_{n'\kappa})(2n + 2\gamma_\kappa - 1) \left[ (\kappa - N_{n\kappa})(\kappa - N_{n'\kappa}) - (n-1)(n + 2\gamma_\kappa - 1) \right] \right) \delta_{|n'|, n-1} \right. \\
&\quad \left. + \left( \frac{\mu_{n'\kappa}^{(0)} + 1}{\mu_{n'\kappa}^{(0)} - 1} \left[ n(n + 2\gamma_\kappa)(2n + 2\gamma_\kappa - 1) - (\kappa - N_{n\kappa})(\kappa - N_{n'\kappa})(2n + 2\gamma_\kappa + 1) \right]^2 \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + n(n + 2\gamma_\kappa)(N_{n'\kappa} - N_{n\kappa}) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \times \left[ n(n + 2\gamma_\kappa)(2n + 2\gamma_\kappa - 1) - (\kappa - N_{n\kappa})(\kappa - N_{n'\kappa})(2n + 2\gamma_\kappa + 1) \right] \right) \delta_{|n'|, n} \right. \\
&\quad \left. + (n + 2\gamma_\kappa + 1)^2 \left( \frac{\mu_{n'\kappa}^{(0)} + 1}{\mu_{n'\kappa}^{(0)} - 1} \left[ n(n + 2\gamma_\kappa) - (\kappa - N_{n\kappa})(\kappa - N_{n'\kappa}) \right]^2 \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + (\kappa - N_{n\kappa})(2n + 2\gamma_\kappa + 1) \left[ n(n + 2\gamma_\kappa) - (\kappa - N_{n\kappa})(\kappa - N_{n'\kappa}) \right] \right) \delta_{|n'|, n+1} \right\}. \quad (4.39)
\end{aligned}$$

Występujące w powyższym wyrażeniu delty Kroneckera spowodują, iż z całej nieskończonej sumy pozostaną tylko trzy wyrazy:

$$\tilde{I}_{\kappa\chi}^{(\infty)} = \tilde{I}_{\kappa\chi}^{(\infty)'} + \tilde{I}_{\kappa\chi}^{(\infty)''} + \tilde{I}_{\kappa\chi}^{(\infty)'''}, \quad (4.40)$$

przy czym prim oznacza część wyciętą przez deltę Kroneckera  $\delta_{|n'|, n}$ , bis określa wyrazy z  $|n'| = n - 1$ , natomiast ostatni człon jest wynikiem działania  $\delta_{|n'|, n+1}$ . Przy wyznaczaniu każdego z tych trzech składników wykorzystano następującą własność pozornej liczby kwantowej, wynikającą bezpośrednio z jej definicji (3.26):

$$N_{n'\kappa'}^2 - (\kappa')^2 = |n'|(|n'| + 2\gamma_{\kappa'}). \quad (4.41)$$

Po żmudnych rachunkach otrzymuje się następujące wyniki:

$$\tilde{I}_{\kappa\chi}^{(\infty)'} = -\frac{\alpha^2 a_0^3}{Z^2} \frac{n(n + \gamma_\kappa)(n + 2\gamma_\kappa) [2(n + \gamma_\kappa)^2 + N_{n\kappa}^2]}{4N_{n\kappa}}, \quad (4.42)$$

$$\tilde{I}_{\kappa\chi}^{(\infty)''} = -\frac{\alpha^2 a_0^3}{8Z^2} N_{n\kappa} (N_{n\kappa} + \kappa) \left[ (N_{n\kappa} - 2\kappa)(2n + 2\gamma_\kappa - 1) + 2\kappa^2 (N_{n\kappa} - \kappa) \right], \quad (4.43)$$

$$\tilde{I}_{\kappa\chi}^{(\infty)'''} = -\frac{\alpha^2 a_0^3}{8Z^2} N_{n\kappa} (N_{n\kappa} - \kappa) \left[ (N_{n\kappa} + 2\kappa)(2n + 2\gamma_\kappa + 1) - 2\kappa^2 (N_{n\kappa} + \kappa) \right]. \quad (4.44)$$

Uwzględniając w (4.35) zależności (4.37), (4.40) oraz (4.42)–(4.44), dostajemy

$$\begin{aligned}
I_{\kappa\chi} &= -\frac{\alpha^2 a_0^3}{Z^2} \frac{1}{4N_{n\kappa}} \left[ N_{n\kappa}^2 (n + \gamma_\kappa) (5n^2 + 10n\gamma_\kappa + 2\gamma_\kappa^2 - 2\kappa^2 + 1) \right. \\
&\quad \left. + 2\kappa^2 (n + \gamma_\kappa)^3 - \kappa N_{n\kappa} (3n^2 + 6n\gamma_\kappa + 4\gamma_\kappa^2 - \kappa^2) \right]. \quad (4.45)
\end{aligned}$$

Zatem, w oparciu o (4.29), pierwszy ze składników podatności magnetycznej atomu wynosi

$$\begin{aligned} \chi_\kappa = & -\frac{\alpha^2 a_0^3}{Z^2} \frac{2\kappa^2 \mu^2}{N_{n\kappa} (4\kappa^2 - 1)^2} \left[ N_{n\kappa}^2 (n + \gamma_\kappa) (5n^2 + 10n\gamma_\kappa + 2\gamma_\kappa^2 - 2\kappa^2 + 1) \right. \\ & \left. + 2\kappa^2 (n + \gamma_\kappa)^3 - \kappa N_{n\kappa} (3n^2 + 6n\gamma_\kappa + 4\gamma_\kappa^2 - \kappa^2) \right]. \end{aligned} \quad (4.46)$$

W przypadku dwóch pozostałych składników wyrażenia (4.26) rachunki są dużo bardziej skomplikowane. Ich suma, zdefiniowana poprzez wzór (4.28), może być zapisana w następujący sposób:

$$\chi_{-\kappa+1} + \chi_{-\kappa-1} = \sum_{\kappa'} \left[ \frac{(2\kappa - 1)^2 - 4\mu^2}{8(2\kappa - 1)^2} \delta_{\kappa', -\kappa+1} + \frac{(2\kappa + 1)^2 - 4\mu^2}{8(2\kappa + 1)^2} \delta_{\kappa', -\kappa-1} \right] I_{\kappa'\chi}, \quad (4.47)$$

gdzie  $I_{\kappa'\chi}$  to podwójna całka radialna, dana poniższym wzorem:

$$I_{\kappa'\chi} = \int_0^\infty dr \int_0^\infty dr' \begin{pmatrix} Q_{n\kappa}^{(0)}(r) & P_{n\kappa}^{(0)}(r) \end{pmatrix} r \bar{G}_{\kappa'}^{(0)}(r, r') r' \begin{pmatrix} Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \\ P_{n\kappa}^{(0)}(r') \end{pmatrix}. \quad (4.48)$$

W celu wyznaczenia wartości tej całki, w pierwszym kroku zastosujemy w powyższym wzorze wyrażenie na uogólnioną radialną funkcję Greena (3.42). Pojawiają się wówczas całki radialne typu (C.5), w oparciu o które możemy napisać

$$I_{\kappa'\chi} = \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \frac{\mathcal{I}_1(1, 1) \mathcal{I}_1(1, \mu_{n'\kappa'}^{(0)})}{\mu_{n'\kappa'}^{(0)} - 1}, \quad (4.49)$$

przy czym wielkość  $\mu_{n'\kappa'}^{(0)}$  została zdefiniowana za pomocą wzoru (3.47). W kolejnym kroku zapiszemy jawne postacie występujących powyżej całek typu (C.5). Do wyrażenia (C.7) wstawiamy zatem odpowiednie wartości parametrów  $L$  oraz  $C$  i dostajemy

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_1(1, 1) = & 2A_0 \sqrt{\frac{\alpha Z}{N_{n\kappa}}} \left( \frac{1}{2\lambda} \right)^2 \frac{\Gamma(n + 2\gamma_\kappa)}{(|n'| - 1)!(N_{n'\kappa'} + \kappa')} \\ & \times \sum_{k=0}^n \frac{(-)^k}{k!} \frac{\Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + k + 2) \Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k - 2)}{\Gamma(n - k + 1) \Gamma(k + 2\gamma_\kappa + 1) \Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k - 1)} \\ & \times \left[ (n - k)(N_{n'\kappa'} + \kappa') + (\kappa - N_{n\kappa})(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k - 2) \right] \end{aligned} \quad (4.50)$$

oraz

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_1(1, \mu_{n'\kappa'}^{(0)}) = & A_0 \sqrt{\frac{\alpha Z}{N_{n\kappa}}} \left( \frac{1}{2\lambda} \right)^2 \frac{\Gamma(n + 2\gamma_\kappa)}{(|n'| - 1)!(N_{n'\kappa'} + \kappa')} \\ & \times \sum_{p=0}^n \frac{(-)^p}{p!} \frac{\Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + p + 2) \Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 2)}{\Gamma(n - p + 1) \Gamma(p + 2\gamma_\kappa + 1) \Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 1)} \\ & \times \left\{ (\mu_{n'\kappa'}^{(0)} + 1) \left[ (n - p)(N_{n'\kappa'} + \kappa') + (\kappa - N_{n\kappa})(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 2) \right] \right. \\ & \left. - (\mu_{n'\kappa'}^{(0)} - 1) \left[ (\kappa - N_{n\kappa})(N_{n'\kappa'} + \kappa') + (n - p)(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 2) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.51)$$



Po wstawieniu do wyrażenia (4.49) wzorów (4.50)–(4.51) oraz jawnej postaci (C.9) współczynnika  $A_0$ , otrzymujemy następującą postać omawianej całki radialnej:

$$\begin{aligned}
I_{\kappa'\chi} &= \frac{\alpha^2 a_0^3}{Z^2} \frac{n! \Gamma(n + 2\gamma_\kappa + 1) N_{n\kappa}}{32(N_{n\kappa} - \kappa)} \sum_{k=0}^n \sum_{p=0}^n \frac{(-)^{k+p}}{k! p!} f_\chi(k, p) \\
&\times \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k - 2) \Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 2)}{|n'|! \Gamma(|n'| + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \frac{N_{n'\kappa'} - \kappa'}{N_{n'\kappa'}} \\
&\times \left[ (n - k)(N_{n'\kappa'} + \kappa') + (\kappa - N_{n\kappa})(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k - 2) \right] \\
&\times \left\{ \frac{\mu_{n'\kappa'}^{(0)} + 1}{\mu_{n'\kappa'}^{(0)} - 1} \left[ (n - p)(N_{n'\kappa'} + \kappa') + (\kappa - N_{n\kappa})(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 2) \right] \right. \\
&\quad \left. - \left[ (\kappa - N_{n\kappa})(N_{n'\kappa'} + \kappa') + (n - p)(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 2) \right] \right\}, \tag{4.52}
\end{aligned}$$

w której, dla przejrzystości dalszych rachunków, wprowadzono oznaczenie

$$\begin{aligned}
f_\chi(k, p) &= \frac{\Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + k + 2)}{\Gamma(k + 2\gamma_\kappa + 1) \Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k - 1) \Gamma(n - k + 1)} \\
&\times \frac{\Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + p + 2)}{\Gamma(p + 2\gamma_\kappa + 1) \Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 1) \Gamma(n - p + 1)}. \tag{4.53}
\end{aligned}$$

Należy w tym miejscu zaznaczyć, iż przy wyprowadzaniu wyrażenia (4.52) uwzględniono wzór (3.45) oraz skorzystano z własności (4.41). Aby zapewnić czytelność przeprowadzanych obliczeń, szereg występujący w równaniu (4.52) rozbijemy na sumę ośmiu składników; mamy

$$I_{\kappa'\chi} = \frac{\alpha^2 a_0^3}{Z^2} \frac{n! \Gamma(n + 2\gamma_\kappa + 1) N_{n\kappa}}{32(N_{n\kappa} - \kappa)} \sum_{k=0}^n \sum_{p=0}^n \frac{(-)^{k+p}}{k! p!} f_\chi(k, p) \sum_{i=1}^8 S_i^{(\chi)}, \tag{4.54}$$

gdzie

$$\begin{aligned}
S_1^{(\chi)} &= (n - k)(n - p) \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k - 2) \Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 2)}{|n'|! \Gamma(|n'| + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \\
&\times \frac{|n'| + \gamma_{\kappa'} + N_{n'\kappa'} + n + \gamma_\kappa + N_{n\kappa}}{|n'| + \gamma_{\kappa'} + N_{n'\kappa'} - n - \gamma_\kappa - N_{n\kappa}} \frac{(N_{n'\kappa'} - \kappa')(N_{n'\kappa'} + \kappa')^2}{N_{n'\kappa'}}, \tag{4.55}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S_2^{(\chi)} &= (n - k)(\kappa - N_{n\kappa}) \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k - 2) \Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 1)}{|n'|! \Gamma(|n'| + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \\
&\times \frac{|n'| + \gamma_{\kappa'} + N_{n'\kappa'} + n + \gamma_\kappa + N_{n\kappa}}{|n'| + \gamma_{\kappa'} + N_{n'\kappa'} - n - \gamma_\kappa - N_{n\kappa}} \frac{(N_{n'\kappa'} - \kappa')(N_{n'\kappa'} + \kappa')}{N_{n'\kappa'}}, \tag{4.56}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S_3^{(\chi)} &= (n - p)(\kappa - N_{n\kappa}) \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k - 1) \Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 2)}{|n'|! \Gamma(|n'| + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \\
&\times \frac{|n'| + \gamma_{\kappa'} + N_{n'\kappa'} + n + \gamma_\kappa + N_{n\kappa}}{|n'| + \gamma_{\kappa'} + N_{n'\kappa'} - n - \gamma_\kappa - N_{n\kappa}} \frac{(N_{n'\kappa'} - \kappa')(N_{n'\kappa'} + \kappa')}{N_{n'\kappa'}}, \tag{4.57}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S_4^{(\chi)} &= (\kappa - N_{n\kappa})^2 \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 1)\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{|n'|!\Gamma(|n'| + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \\
&\quad \times \frac{|n'| + \gamma_{\kappa'} + N_{n'\kappa'} + n + \gamma_{\kappa} + N_{n\kappa}}{|n'| + \gamma_{\kappa'} + N_{n'\kappa'} - n - \gamma_{\kappa} - N_{n\kappa}} \frac{N_{n'\kappa'} - \kappa'}{N_{n'\kappa'}}, \tag{4.58}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S_5^{(\chi)} &= (n - k)(N_{n\kappa} - \kappa) \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2)\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 2)}{|n'|!\Gamma(|n'| + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \\
&\quad \times \frac{(N_{n'\kappa'} - \kappa')(N_{n'\kappa'} + \kappa')^2}{N_{n'\kappa'}}, \tag{4.59}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S_6^{(\chi)} &= -(n - k)(n - p) \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2)\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{|n'|!\Gamma(|n'| + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \\
&\quad \times \frac{(N_{n'\kappa'} - \kappa')(N_{n'\kappa'} + \kappa')}{N_{n'\kappa'}}, \tag{4.60}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S_7^{(\chi)} &= -(\kappa - N_{n\kappa})^2 \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 1)\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 2)}{|n'|!\Gamma(|n'| + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \\
&\quad \times \frac{(N_{n'\kappa'} - \kappa')(N_{n'\kappa'} + \kappa')}{N_{n'\kappa'}}, \tag{4.61}
\end{aligned}$$

$$S_8^{(\chi)} = (n - p)(N_{n\kappa} - \kappa) \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 1)\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{|n'|!\Gamma(|n'| + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \frac{N_{n'\kappa'} - \kappa'}{N_{n'\kappa'}}, \tag{4.62}$$

przy czym podczas formowania wzorów (4.55)–(4.58) uwzględniono dodatkowo wyrażenie (3.47). Zajmiemy się teraz wyznaczeniem każdego z osobna z powyższych składników.

Przyjrzyjmy się najpierw wyrażeniu dla  $S_5^{(\chi)}$ . W pierwszej kolejności będziemy chcieli dokonać zamiany sumowania z  $\sum_{n'=-\infty}^{\infty}(\dots)$  na  $\sum_{n'=0}^{\infty}(\dots)$ . W tym celu sumę występującą w równaniu (4.59) rozbijemy według schematu

$$\sum_{n'=-\infty}^{\infty} (\dots) = \sum_{n'=-\infty}^{-1} (\dots) + \sum_{n'=0}^{\infty} (\dots). \tag{4.63}$$

Transformacja zmiennej sumowania  $n' \rightarrow -n'$  w pierwszym z otrzymanych w ten sposób szeregów, a także skorzystanie z zależności (4.41) oraz własności

$$N_{-n'\kappa'} = -N_{n'\kappa'}, \tag{4.64}$$

prowadzi nas do wyrażenia

$$\begin{aligned}
S_5^{(\chi)} &= (n - k)(N_{n\kappa} - \kappa) \left[ \sum_{n'=1}^{\infty} \frac{\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2)\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 2)}{n'!\Gamma(n' + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \frac{(N_{n'\kappa'} + \kappa')(N_{n'\kappa'} - \kappa')^2}{-N_{n'\kappa'}} \right. \\
&\quad \left. + \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2)\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 2)}{n'!\Gamma(n' + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \frac{(N_{n'\kappa'} - \kappa')(N_{n'\kappa'} + \kappa')^2}{N_{n'\kappa'}} \right]. \tag{4.65}
\end{aligned}$$

Na potrzeby dalszych rachunków, do pierwszego z szeregów występujących po prawej stronie powyższego równania włączymy (wynoszący zero) wyraz z  $n' = 0$ . W kolejnym kroku zbieramy pod jedną sumę całe wyrażenie, które po zastosowaniu własności (4.41) i kolejnych drobnych przekształceniach prezentuje się następująco:

$$S_5^{(x)} = -2(n-k)(\kappa - N_{n\kappa}) \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2)\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 2)}{(n' - 1)!\Gamma(n' + 2\gamma_{\kappa'})}. \quad (4.66)$$

Zwróćmy uwagę, iż wyraz z  $n' = 0$  nie wnosi żadnego wkładu do sumy powyższego szeregu. Rozpoczynamy zatem sumowanie od  $n' = 1$ , po czym przeddefiniujemy sobie zmienną sumowania w taki sposób, by znów mieć szereg w granicach od 0 do  $\infty$ . Opisany zabieg skutkuje otrzymaniem wyrażenia

$$S_5^{(x)} = -2(n-k)(\kappa - N_{n\kappa}) \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 1)\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{n'!\Gamma(n' + 2\gamma_{\kappa'} + 1)}. \quad (4.67)$$

Ostatni wzór możemy przekształcić za pomocą funkcji hipergeometrycznych, omówionych szerzej w uzupełnieniu E. Korzystając z definicji (E.6), odnajdujemy w powyższym wyrażeniu funkcję  ${}_2F_1$  z jednostkowym argumentem:

$$S_5^{(x)} = -2(n-k)(\kappa - N_{n\kappa}) \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 1)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)} \times {}_2F_1 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1 \\ 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix} ; 1 \right). \quad (4.68)$$

Do funkcji  ${}_2F_1$  zastosujemy *tożsamość Gaussa* (E.9) i otrzymujemy ostatecznie

$$S_5^{(x)} = -2(n-k)(\kappa - N_{n\kappa}) \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 1)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)\Gamma(2\gamma_{\kappa} + k + p + 3)}{\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + k + 2)\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + p + 2)}. \quad (4.69)$$

Następnym składnikiem wzoru (4.54), który teraz wyznaczymy, jest  $S_8^{(x)}$ . Będziemy postępować analogicznie, jak w przypadku obliczania  $S_5^{(x)}$ . Zatem do wyrażenia (4.62) zastosujemy schemat (4.63)–(4.64), po czym znów dodamy do jednego szeregów (zerowy) wyraz z  $n' = 0$ . Po kilku przekształceniach dostajemy

$$S_8^{(x)} = -2(n-p)(\kappa - N_{n\kappa}) \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 1)\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{n'!\Gamma(n' + 2\gamma_{\kappa'} + 1)}. \quad (4.70)$$

Warto w tym miejscu zwrócić uwagę na to, iż powyższe wyrażenie będzie identyczne ze wzorem (4.67), w którym dokona się zamiany parametrów  $k \leftrightarrow p$ . Innymi słowy, aby otrzymać końcową postać składnika  $S_8^{(x)}$ , wystarczy w finalnym wyrażeniu na  $S_5^{(x)}$ , czyli we wzorze (4.69), przeprowadzić wspomnianą zamianę parametrów  $k$  i  $p$ . Mamy zatem:

$$S_8^{(x)} = -2(n-p)(\kappa - N_{n\kappa}) \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 1)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)\Gamma(2\gamma_{\kappa} + k + p + 3)}{\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + k + 2)\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + p + 2)}. \quad (4.71)$$

Obliczenie składników  $S_6^{(x)}$  oraz  $S_7^{(x)}$  do pewnego momentu przebiega bardzo podobnie do rozważań przeprowadzanych powyżej. Stosując opisany wcześniej schemat (4.63)–(4.64) do szeregów występujących w wyrażeniach (4.60) oraz (4.61), dochodzimy do wniosków, iż

$$S_6^{(x)} = 0 \quad (4.72)$$

oraz

$$S_7^{(x)} = 0. \quad (4.73)$$

Wyznaczenie pozostałych komponentów we wzorze (4.54), czyli  $S_1^{(x)}$  do  $S_4^{(x)}$ , okazuje się być nieco bardziej złożone. Zacznijmy od elementu  $S_1^{(x)}$ . Do szeregu obecnego w wyrażeniu (4.55) wykorzystamy opisany uprzednio schemat postępowania (4.63)–(4.64), po czym do szeregu rozpoczynającego się od 1 dodamy (nie wnoszący żadnego wkładu do jego sumy) wyraz z  $n' = 0$ . Łączymy oba szeregi i dostajemy

$$\begin{aligned} S_1^{(x)} &= (n-k)(n-p) \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2)\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 2)}{(n' - 1)!\Gamma(n' + 2\gamma_{\kappa'})} \\ &\quad \times \left\{ \frac{(N_{n'\kappa'} + \kappa')(n' + \gamma_{\kappa'} + N_{n'\kappa'} + n + \gamma_{\kappa} + N_{n\kappa})}{N_{n'\kappa'}(n' + \gamma_{\kappa'} + N_{n'\kappa'} - n - \gamma_{\kappa} - N_{n\kappa})} \right. \\ &\quad \left. - \frac{(N_{n'\kappa'} - \kappa')(n' + \gamma_{\kappa'} - N_{n'\kappa'} + n + \gamma_{\kappa} + N_{n\kappa})}{N_{n'\kappa'}(n' + \gamma_{\kappa'} - N_{n'\kappa'} - n - \gamma_{\kappa} - N_{n\kappa})} \right\}. \end{aligned} \quad (4.74)$$

Wyrażenie znajdujące się w nawiasie klamrowym sprowadzamy do wspólnego mianownika, a następnie wykonujemy na nim kilka żmudnych przekształceń algebraicznych. Wykorzystując po drodze niezwykle przydatną zależność

$$\gamma_{\kappa'}^2 - (\kappa')^2 = \gamma_{\kappa}^2 - \kappa^2, \quad (4.75)$$

dochodzimy do następującej postaci  $S_1^{(x)}$ :

$$S_1^{(x)} = 2(n-k)(n-p)(N_{n\kappa} + \kappa') \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2)\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 2)}{(n' - 1)!\Gamma(n' + 2\gamma_{\kappa'})(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n)}. \quad (4.76)$$

Widzimy, iż wyraz z  $n' = 0$  powyższego szeregu wynosi zero. W związku z tym, dokonamy takiego samego zabiegu, jak w przypadku obliczania składnika  $S_5^{(x)}$ , czyli dolną granicę sumy zamienimy z 0 na 1, po czym zdefiniujemy indeks sumowania w taki sposób, by w rezultacie znów otrzymać szereg w granicach  $[0, \infty)$ . Dodatkowo, skorzystamy z relacji

$$\frac{1}{n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n} = \frac{\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n)}{\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1)}. \quad (4.77)$$

Po tych przekształceniach mamy

$$\begin{aligned} S_1^{(x)} &= 2(n-k)(n-p)(N_{n\kappa} + \kappa') \\ &\quad \times \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 1)\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1)}{n'!\Gamma(n' + 2\gamma_{\kappa'} + 1)\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 2)}. \end{aligned} \quad (4.78)$$

Wzór (4.78) możemy dalej transponować, wykorzystując funkcje hipergeometryczne. W oparciu o definicję (E.7) możemy zapisać, że

$$\begin{aligned} S_1^{(x)} &= 2(n-k)(n-p)(N_{n\kappa} + \kappa') \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 1)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1)} \\ &\quad \times {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 2, 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix} ; 1 \right). \end{aligned} \quad (4.79)$$

Identyczny tok rozumowania wykorzystuje się podczas obliczania składników  $S_2^{(\chi)}$  do  $S_4^{(\chi)}$ . Pomijając szczegółowe rachunki, podamy od razu wyniki końcowe:

$$S_2^{(\chi)} = 2(n-k)(\kappa - N_{n\kappa}) \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 1)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p)}{\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1)} \\ \times {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 2, 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix} ; 1 \right), \quad (4.80)$$

$$S_3^{(\chi)} = 2(n-p)(\kappa - N_{n\kappa}) \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1)} \\ \times {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 2, 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix} ; 1 \right), \quad (4.81)$$

$$S_4^{(\chi)} = 2(\kappa - N_{n\kappa})^2(N_{n\kappa} - \kappa') \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 1)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n)} \\ \times {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1, 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix} ; 1 \right). \quad (4.82)$$

Na tym etapie mogliśmy już dodać do siebie wyliczone składniki sumy  $\sum_{i=1}^8 S_i^{(\chi)}$ . Jednak zanim to zrobimy, spróbujemy doprowadzić do sytuacji, w której wszystkie funkcje  ${}_3F_2$ , obecne we wzorach (4.79)–(4.82), będą miały takie same górne i dolne parametry. Jako funkcję odniesienia wybierzmy tę występującą we wzorze (4.79). Dla przejrzystości oznaczmy ją sobie tymczasowo poprzez  ${}_3F_2(\dots)$ :

$${}_3F_2(\dots) \equiv {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 2, 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix} ; 1 \right). \quad (4.83)$$

Do funkcji hipergeometrycznych w wyrażeniach (4.80)–(4.81) zastosujemy relację (E.10), natomiast tę obecną w (4.82) przekształcimy za pomocą zależności (E.12). Po tych zabiegach wyrażenia dla  $S_2^{(\chi)}$  do  $S_4^{(\chi)}$  przyjmują następującą formę:

$$S_2^{(\chi)} = 2(n-k)(\kappa - N_{n\kappa}) \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 1)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)\Gamma(2\gamma_{\kappa} + k + p + 3)}{\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + k + 2)\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + p + 2)} \\ + 2(n-k)(n-p-2)(\kappa - N_{n\kappa}) \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 1)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1)} {}_3F_2(\dots), \quad (4.84)$$

$$S_3^{(\chi)} = 2(n-p)(\kappa - N_{n\kappa}) \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 1)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)\Gamma(2\gamma_{\kappa} + k + p + 3)}{\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + k + 2)\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + p + 2)} \\ + 2(n-p)(n-k-2)(\kappa - N_{n\kappa}) \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 1)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1)} {}_3F_2(\dots), \quad (4.85)$$

$$\begin{aligned}
S_4^{(\chi)} &= -2 \frac{(\kappa - N_{n\kappa})^2}{\kappa' + N_{n\kappa}} \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k - 1) \Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 1) \Gamma(2\gamma_\kappa + k + p + 4)}{\Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + k + 2) \Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + p + 2)} \\
&+ 2 \frac{(\kappa - N_{n\kappa})^2}{\kappa' + N_{n\kappa}} (n - k - 2)(n - p - 2) \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k - 1) \Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 1)}{\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1) (\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1)} {}_3F_2(\dots). \quad (4.86)
\end{aligned}$$

Przy wyprowadzaniu równania (4.86) pomocne okazały się zależności

$$\begin{aligned}
&(n - k - 2)(n - p - 2) + (n + \gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'}) (\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + k + p - n + 4) \\
&= (\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + k + 2) (\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + p + 2) \quad (4.87)
\end{aligned}$$

oraz

$$(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n) (\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + n) = (\kappa' + N_{n\kappa}) (\kappa' - N_{n\kappa}). \quad (4.88)$$

Jednym z ostatnich kroków będzie wyznaczenie sumy  $\sum_{i=1}^8 S_i^{(\chi)}$ . Dodajemy do siebie wyrażenia (4.69), (4.71)–(4.73), (4.79) oraz (4.84)–(4.86) i dostajemy

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^8 S_i^{(\chi)} &= \frac{-2}{N_{n\kappa} + \kappa'} \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k - 1) \Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 1)}{\Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + k + 2) \Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + p + 2)} \\
&\times \left\{ (N_{n\kappa} - \kappa)^2 \Gamma(2\gamma_\kappa + k + p + 4) - \frac{\Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + k + 2) \Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + p + 2)}{\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1) (\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1)} \right. \\
&\quad \left. \times [2(N_{n\kappa} - \kappa) + (n - k)(\kappa + \kappa')] [2(N_{n\kappa} - \kappa) + (n - p)(\kappa + \kappa')] {}_3F_2(\dots) \right\}. \quad (4.89)
\end{aligned}$$

Uwzględniając wzory (4.53), (4.83) i (4.89) w wyrażeniu (4.54), otrzymujemy szukaną całkę radialną w następującej postaci:

$$I_{\kappa'\chi} = A_\chi + \sum_{k=0}^n \sum_{p=0}^n B_\chi(k, p) {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2, 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix}; 1 \right), \quad (4.90)$$

w której odpowiednie współczynniki wynoszą

$$\begin{aligned}
A_\chi &= \frac{\alpha^2 a_0^3}{Z^2} \frac{N_{n\kappa} (\kappa - N_{n\kappa})}{16(\kappa' + N_{n\kappa})} n! \Gamma(n + 2\gamma_\kappa + 1) \\
&\times \sum_{k=0}^n \sum_{p=0}^n \frac{(-)^{k+p}}{k! p!} \frac{\Gamma(2\gamma_\kappa + k + p + 4)}{\Gamma(k + 2\gamma_\kappa + 1) \Gamma(p + 2\gamma_\kappa + 1) \Gamma(n - k + 1) \Gamma(n - p + 1)} \quad (4.91)
\end{aligned}$$

oraz

$$\begin{aligned}
B_\chi(k, p) &= \frac{\alpha^2 a_0^3}{Z^2} \frac{n! \Gamma(n + 2\gamma_\kappa + 1) N_{n\kappa}}{16(N_{n\kappa} - \kappa)(N_{n\kappa} + \kappa')} \frac{(-)^{k+p}}{k! p!} \frac{\Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + k + 2) \Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + p + 2)}{\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1) (\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1)} \\
&\times \frac{[2(N_{n\kappa} - \kappa) + (n - k)(\kappa + \kappa')] [2(N_{n\kappa} - \kappa) + (n - p)(\kappa + \kappa')]}{\Gamma(n - k + 1) \Gamma(k + 2\gamma_\kappa + 1) \Gamma(n - p + 1) \Gamma(p + 2\gamma_\kappa + 1)}. \quad (4.92)
\end{aligned}$$

Wyraz  $A_\chi$  można przekształcić do bardziej elementarnej postaci. W tym celu zapiszmy go w następującej formie:

$$A_\chi = \frac{\alpha^2 a_0^3}{Z^2} \frac{N_{n\kappa}(\kappa - N_{n\kappa})}{16(\kappa' + N_{n\kappa})} \tilde{f}(1, 4), \quad (4.93)$$

gdzie  $\tilde{f}(1, 4)$  to wyrażenie zdefiniowane za pomocą wzoru (F.1). Analiza tego czynnika (przeprowadzona w uzupełnieniu F), a w szczególności wzór (F.10), pozwala nam zapisać, iż

$$A_\chi = \frac{\alpha^2 a_0^3}{Z^2} \frac{N_{n\kappa}(\kappa - N_{n\kappa})}{16(\kappa' + N_{n\kappa})} (-)^n \sum_{k=n-3}^n \frac{(-)^k \Gamma(2\gamma_\kappa + k + 4) \Gamma(k + 4)}{k! \Gamma(2\gamma_\kappa + k + 1) \Gamma(k + 4 - n) \Gamma(n - k + 1)}, \quad (4.94)$$

skąd dostajemy

$$A_\chi = \frac{\alpha^2 a_0^3}{Z^2} \frac{N_{n\kappa}(\kappa - N_{n\kappa})}{8(\kappa' + N_{n\kappa})} (2n + 2\gamma_\kappa + 1) \left[ 5(n + \gamma_\kappa)(n + \gamma_\kappa + 1) - 3(\gamma_\kappa^2 - 1) \right]. \quad (4.95)$$

Uwzględniając wzory (4.92) oraz (4.95) w wyrażeniu (4.90), otrzymujemy:

$$\begin{aligned} I_{\kappa'\chi} = & \frac{\alpha^2 a_0^3}{Z^2} \frac{N_{n\kappa}(N_{n\kappa} - \kappa)}{16(N_{n\kappa} + \kappa')} \left\{ 2(2n + 2\gamma_\kappa + 1) \left[ 3(\gamma_\kappa^2 - 1) - 5(n + \gamma_\kappa)(n + \gamma_\kappa + 1) \right] \right. \\ & + \frac{n! \Gamma(n + 2\gamma_\kappa + 1)}{(N_{n\kappa} - \kappa)^2 (\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1) \Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)} \\ & \times \sum_{k=0}^n \sum_{p=0}^n \frac{(-)^{k+p}}{k! p!} \frac{\Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + k + 2) \Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + p + 2)}{\Gamma(n - k + 1) \Gamma(k + 2\gamma_\kappa + 1) \Gamma(n - p + 1) \Gamma(p + 2\gamma_\kappa + 1)} \\ & \times \left[ 2(N_{n\kappa} - \kappa) + (n - k)(\kappa + \kappa') \right] \left[ 2(N_{n\kappa} - \kappa) + (n - p)(\kappa + \kappa') \right] \\ & \left. \times {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2, 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix} ; 1 \right) \right\}. \quad (4.96) \end{aligned}$$

W związku z powyższym, suma dwóch ostatnich składników podatności magnetycznej, na podstawie

(4.47), wynosi

$$\begin{aligned}
\chi_{-\kappa+1} + \chi_{-\kappa-1} &= \frac{\alpha^2 a_0^3}{Z^2} \frac{N_{n\kappa}(N_{n\kappa} - \kappa)}{128} \sum_{\kappa'} \left[ \frac{(2\kappa-1)^2 - 4\mu^2}{(2\kappa-1)^2} \delta_{\kappa', -\kappa+1} + \frac{(2\kappa+1)^2 - 4\mu^2}{(2\kappa+1)^2} \delta_{\kappa', -\kappa-1} \right] \\
&\times \frac{1}{N_{n\kappa} + \kappa'} \left\{ 2(2n + 2\gamma_\kappa + 1) \left[ 3(\gamma_\kappa^2 - 1) - 5(n + \gamma_\kappa)(n + \gamma_\kappa + 1) \right] \right. \\
&+ \frac{n! \Gamma(n + 2\gamma_\kappa + 1)}{(N_{n\kappa} - \kappa)^2 (\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1) \Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)} \\
&\times \sum_{k=0}^n \sum_{p=0}^n \frac{(-)^{k+p}}{k! p!} \frac{\Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + k + 2) \Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + p + 2)}{\Gamma(n - k + 1) \Gamma(k + 2\gamma_\kappa + 1) \Gamma(n - p + 1) \Gamma(p + 2\gamma_\kappa + 1)} \\
&\times \left[ 2(N_{n\kappa} - \kappa) + (n - k)(\kappa + \kappa') \right] \left[ 2(N_{n\kappa} - \kappa) + (n - p)(\kappa + \kappa') \right] \\
&\times {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2, 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix} ; 1 \right) \left. \right\}. \quad (4.97)
\end{aligned}$$

W celu wyznaczenia całkowitej magnetyzowalności jednoelektronowego atomu Diraca, w równaniu (4.26) uwzględniamy wyrażenia (4.46) oraz (4.97); dostajemy ostatecznie

$$\begin{aligned}
\chi &= \frac{\alpha^2 a_0^3}{Z^2} \frac{1}{(4\kappa^2 - 1)^2} \left[ \frac{-2\kappa^2 \mu^2}{N_{n\kappa}} \left[ N_{n\kappa}^2 (n + \gamma_\kappa) (5n^2 + 10n\gamma_\kappa + 2\gamma_\kappa^2 - 2\kappa^2 + 1) + 2\kappa^2 (n + \gamma_\kappa)^3 \right. \right. \\
&- \kappa N_{n\kappa} (3n^2 + 6n\gamma_\kappa + 4\gamma_\kappa^2 - \kappa^2) \left. \right] + \frac{N_{n\kappa}(N_{n\kappa} - \kappa)}{128} \sum_{\kappa'} \frac{1}{N_{n\kappa} + \kappa'} \\
&\times \left[ \left( (2\kappa - 1)^2 - 4\mu^2 \right) (2\kappa + 1)^2 \delta_{\kappa', -\kappa+1} + \left( (2\kappa + 1)^2 - 4\mu^2 \right) (2\kappa - 1)^2 \delta_{\kappa', -\kappa-1} \right] \\
&\times \left\{ 2(2n + 2\gamma_\kappa + 1) \left[ 3(\gamma_\kappa^2 - 1) - 5(n + \gamma_\kappa)(n + \gamma_\kappa + 1) \right] \right. \\
&+ \frac{n! \Gamma(n + 2\gamma_\kappa + 1)}{(N_{n\kappa} - \kappa)^2 (\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1) \Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)} \\
&\times \sum_{k=0}^n \sum_{p=0}^n \frac{(-)^{k+p}}{k! p!} \frac{\Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + k + 2) \Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + p + 2)}{\Gamma(n - k + 1) \Gamma(k + 2\gamma_\kappa + 1) \Gamma(n - p + 1) \Gamma(p + 2\gamma_\kappa + 1)} \\
&\times \left[ 2(N_{n\kappa} - \kappa) + (n - k)(\kappa + \kappa') \right] \left[ 2(N_{n\kappa} - \kappa) + (n - p)(\kappa + \kappa') \right] \\
&\times {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2, 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix} ; 1 \right) \left. \right\}. \quad (4.98)
\end{aligned}$$

Autorce nie jest znane jakiegokolwiek inne wyrażenie na podatność magnetyczną dla *dowolnego* stanu jednoelektronowego atomu Diraca. Testem poprawności powyższego wyniku może być sprawdzenie jego wartości dla pewnych szczególnych stanów atomu. Na przykład, dla stanów, dla których



radialna liczba kwantowa jest równa zero, wzór (4.98) przyjmuje postać:

$$\begin{aligned}
\chi|_{n=0} &= \frac{\alpha^2 a_0^3 \kappa^2}{Z^2 16} \left\{ \frac{32\kappa\mu^2(2\gamma_\kappa + 1)(2\gamma_\kappa^2 + \gamma_\kappa - \kappa^2)}{(4\kappa^2 - 1)^2} + \sum_{\kappa'} \frac{1}{\kappa' - \kappa} \right. \\
&\times \left[ \frac{(2\kappa - 1)^2 - 4\mu^2}{4(2\kappa - 1)^2} \delta_{\kappa', -\kappa+1} + \frac{(2\kappa + 1)^2 - 4\mu^2}{4(2\kappa + 1)^2} \delta_{\kappa', -\kappa-1} \right] \\
&\times \left[ - (2\gamma_\kappa + 1)(2\gamma_\kappa + 2)(2\gamma_\kappa + 3) + \frac{4\Gamma^2(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + 2)}{(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa + 1)\Gamma(2\gamma_\kappa + 1)\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)} \right. \\
&\left. \left. \times {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa + 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa + 2, 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix} ; 1 \right) \right] \right\}. \tag{4.99}
\end{aligned}$$

Po zastosowaniu transformacji (E.11) do funkcji  ${}_3F_2$  występującej w powyższym równaniu otrzymujemy wyrażenie

$$\begin{aligned}
\chi|_{n=0} &= \frac{\alpha^2 a_0^3 \kappa^2}{Z^2 16} \left\{ \frac{32\kappa\mu^2(2\gamma_\kappa + 1)(2\gamma_\kappa^2 + \gamma_\kappa - \kappa^2)}{(4\kappa^2 - 1)^2} - \sum_{\kappa'} (\kappa + \kappa') \right. \\
&\times \left[ \frac{(2\kappa - 1)^2 - 4\mu^2}{4(2\kappa - 1)^2} \delta_{\kappa', -\kappa+1} + \frac{(2\kappa + 1)^2 - 4\mu^2}{4(2\kappa + 1)^2} \delta_{\kappa', -\kappa-1} \right] \\
&\times \left. \frac{\Gamma^2(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + 2)}{(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa)\Gamma(2\gamma_\kappa + 1)\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)} {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa + 1, 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix} ; 1 \right) \right\}, \tag{4.100}
\end{aligned}$$

zgodne z wynikami podanymi w pracach [31, 34]<sup>10</sup>.

Szczególnym przypadkiem stanów z  $n = 0$  jest stan podstawowy. Jeśli do wzoru (4.100) wstawimy wartości liczb kwantowych charakteryzujących ten stan, dostaniemy następujące wyrażenie:

$$\begin{aligned}
\chi_g &= \frac{\alpha^2 a_0^3}{Z^2} \left[ - \frac{(\gamma_1 + 1)(4\gamma_1^2 - 1)}{18} - \frac{\Gamma^2(\gamma_1 + \gamma_2 + 2)}{72(\gamma_2 - \gamma_1)\Gamma(2\gamma_1 + 1)\Gamma(2\gamma_2 + 1)} \right. \\
&\left. \times {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_2 - \gamma_1 - 1, \gamma_2 - \gamma_1 - 1, \gamma_2 - \gamma_1 \\ \gamma_2 - \gamma_1 + 1, 2\gamma_2 + 1 \end{matrix} ; 1 \right) \right], \tag{4.101}
\end{aligned}$$

(indeks dolny  $g$  oznacza, iż mamy do czynienia ze stanem podstawowym) tożsame z rezultatami uzyskanymi przez autorów prac [27, 28, 32, 33, 54].

<sup>10</sup>Uwaga! W obu cytowanych tutaj pracach, a zwłaszcza w książce [34], występuje bardzo duża liczba błędów drukarskich.

## 5 Elektryczny moment kwadrupolowy

### 5.1 Wprowadzenie

Rozważmy statyczny rozkład ładunków elektrycznych, opisany za pomocą gęstości  $\rho(\mathbf{r})$ . Składowe sferyczne elektrycznych momentów multipolowych takiego układu mają postać [92]

$$\mathcal{Q}_{LM} = \sqrt{\frac{4\pi}{2L+1}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r} r^L Y_{LM}(\mathbf{n}_r) \rho(\mathbf{r}), \quad (5.1)$$

przy czym  $Y_{LM}(\mathbf{n}_r)$  to zespolona harmonika sferyczna zdefiniowana za pomocą wzoru (A.17).

Biorąc pod uwagę wzór na gęstość ładunku (2.46), a następnie analizując parzystość wyrażenia podcałkowego w powyższej definicji, łatwo można wykazać, iż elektryczny moment dipolowy ( $L = 1$ ) atomu jednoelektronowego wynosi zero. W celu wyznaczenia najniższej wartości  $L$ , dla której przynajmniej jedna ze współrzędnych  $\mathcal{Q}_{LM}$  jest różna od zera, w niniejszym rozdziale przeprowadzono ogólną analizę elektrycznych momentów multipolowych. W oparciu o nią określono, jakiego rzędu (dla  $L \geq 2$ ) są niezerowe elektryczne multipole, a następnie szczegółowo omówiono ten z nich, dla którego  $L$  przyjmuje najmniejszą wartość.

### 5.2 Elektryczne momenty multipolowe

Na początek zastanówmy się, jakie elektryczne momenty multipolowe posiada izolowany atom jednoelektronowy, oraz które z nich mogą się w nim wyindukować poprzez umieszczenie go w zewnętrznym słabym polu magnetycznym. Stosując formalizm rachunku zaburzeń, z dokładnością do wyrazów pierwszego rzędu ze względu na zaburzenie, w oparciu o definicję (5.1) oraz o związki (2.48), (2.50) i (2.52), możemy zapisać

$$\mathcal{Q}_{LM} \simeq \mathcal{Q}_{LM}^{(0)} + \mathcal{Q}_{LM}^{(1)}, \quad (5.2)$$

przy czym

$$\mathcal{Q}_{LM}^{(0)} = -e \sqrt{\frac{4\pi}{2L+1}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r} \Psi^{(0)\dagger}(\mathbf{r}) r^L Y_{LM}(\mathbf{n}_r) \Psi^{(0)}(\mathbf{r}) \quad (5.3)$$

oznacza elektryczne momenty multipolowe, jakie posiada atom w niezaburzonym stanie (2.15), natomiast

$$\mathcal{Q}_{LM}^{(1)} = -e \sqrt{\frac{4\pi}{2L+1}} \left[ \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r} \Psi^{(0)\dagger}(\mathbf{r}) r^L Y_{LM}(\mathbf{n}_r) \Psi^{(1)}(\mathbf{r}) + \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r} \Psi^{(1)\dagger}(\mathbf{r}) r^L Y_{LM}(\mathbf{n}_r) \Psi^{(0)}(\mathbf{r}) \right] \quad (5.4)$$

określa indukowane elektryczne momenty multipolowe.

W celu wyznaczenia  $\mathcal{Q}_{LM}^{(0)}$ , w wyrażeniu (5.3) uwzględniamy najpierw wzór na funkcję falową (2.15). Zapisujemy następnie rozpatrywaną całkę w sferycznym układzie współrzędnych; dodatkowo wykorzystujemy własność (B.4) i otrzymujemy:

$$\mathcal{Q}_{LM}^{(0)} = -e \sqrt{\frac{4\pi}{2L+1}} \oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r \Omega_{\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}_r) Y_{LM}(\mathbf{n}_r) \Omega_{\kappa\mu}(\mathbf{n}_r) \int_0^\infty dr r^L \left\{ [P_{n\kappa}^{(0)}(r)]^2 + [Q_{n\kappa}^{(0)}(r)]^2 \right\}. \quad (5.5)$$

W oparciu o wzór (B.3), całkę kątową obecną w powyższym wyrażeniu możemy przepisać w postaci

$$\oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r \Omega_{\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}_r) Y_{LM}(\mathbf{n}_r) \Omega_{\kappa\mu}(\mathbf{n}_r) = (-)^L \oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r \Omega_{\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}_r) Y_{LM}(\mathbf{n}_r) \Omega_{\kappa\mu}(\mathbf{n}_r). \quad (5.6)$$

Z ostatniej równości wynika, że dla  $L$  będącego liczbą *nieparzystą* wartość występującej tam całki będzie równa zero. Z fizycznego punktu widzenia oznacza to, iż – na podstawie wzoru (5.5) –

izolowany atom jednoelektronowy posiada wyłącznie *parzystopolowe* momenty elektryczne.

Przejdźmy teraz do analizy składowych  $Q_{LM}^{(1)}$ . W pierwszym kroku, w oparciu o własność (A.19), wyrażenie (5.4) przepiszemy w następującej postaci:

$$Q_{LM}^{(1)} = \tilde{Q}_{LM}^{(1)} + (-)^M \tilde{Q}_{L,-M}^{(1)*}, \quad (5.7)$$

gdzie

$$\tilde{Q}_{LM}^{(1)} = -e \sqrt{\frac{4\pi}{2L+1}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r} \Psi^{(0)\dagger}(\mathbf{r}) r^L Y_{LM}(\mathbf{n}_r) \Psi^{(1)}(\mathbf{r}). \quad (5.8)$$

Uwzględniając w powyższym wyrażeniu postać zaburzonej funkcji falowej (2.32), dochodzimy do następującego wyrażenia:

$$\tilde{Q}_{LM}^{(1)} = \sqrt{\frac{4\pi}{2L+1}} \frac{e^2 c \mathcal{B}}{2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}' \Psi^{(0)\dagger}(\mathbf{r}) Y_{LM}(\mathbf{n}_r) r^L \bar{G}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') r' \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\alpha}) \Psi^{(0)}(\mathbf{r}'). \quad (5.9)$$

Wykorzystując następnie wzory (2.6) oraz (2.15), otrzymujemy:

$$\begin{aligned} \tilde{Q}_{LM}^{(1)} = & \sqrt{\frac{4\pi}{2L+1}} \frac{e^2 c \mathcal{B}}{2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}' \left( \begin{array}{cc} P_{n\kappa}^{(0)}(r) \Omega_{\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}_r) & -i Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \Omega_{-\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}_r) \end{array} \right) Y_{LM}(\mathbf{n}_r) \\ & \times r^{L-1} \bar{G}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \left( \begin{array}{c} i Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa\mu}(\mathbf{n}'_r) \\ P_{n\kappa}^{(0)}(r') \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu}(\mathbf{n}'_r) \end{array} \right). \end{aligned} \quad (5.10)$$

Wstawiamy teraz rozwinięcie uogólnionej funkcji Greena–Diraca–Coulomba (3.40) i zapisując we współrzędnych sferycznych całki występujące w równaniu (5.10), dostajemy

$$\begin{aligned} \tilde{Q}_{LM}^{(1)} = & \frac{1}{2} \sqrt{\frac{4\pi}{2L+1}} (4\pi\epsilon_0) c \mathcal{B} \sum_{\substack{\kappa'=-\infty \\ (\kappa' \neq 0)}}^{\infty} \sum_{m=-|\kappa'|+\frac{1}{2}}^{|\kappa'|-\frac{1}{2}} i \int_0^\infty dr \int_0^\infty dr' r^L r' \\ & \times \left[ P_{n\kappa}^{(0)}(r) \bar{g}_{(++)\kappa'}^{(0)}(r, r') Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \langle \Omega_{\kappa\mu} | Y_{LM} \Omega_{\kappa'm} \rangle \langle \Omega_{\kappa'm} | \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa\mu} \rangle \right. \\ & - P_{n\kappa}^{(0)}(r) \bar{g}_{(+-)\kappa'}^{(0)}(r, r') P_{n\kappa}^{(0)}(r') \langle \Omega_{\kappa\mu} | Y_{LM} \Omega_{\kappa'm} \rangle \langle \Omega_{-\kappa'm} | \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu} \rangle \\ & + Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \bar{g}_{(-+)\kappa'}^{(0)}(r, r') Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \langle \Omega_{-\kappa\mu} | Y_{LM} \Omega_{-\kappa'm} \rangle \langle \Omega_{\kappa'm} | \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa\mu} \rangle \\ & \left. - Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \bar{g}_{(--)\kappa'}^{(0)}(r, r') P_{n\kappa}^{(0)}(r') \langle \Omega_{-\kappa\mu} | Y_{LM} \Omega_{-\kappa'm} \rangle \langle \Omega_{-\kappa'm} | \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu} \rangle \right]. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Jeśli skorzystamy teraz z własności (B.4) i (B.5) całek kątowych, powyższe wyrażenie będziemy mogli zapisać w znacznie prostszej postaci

$$\begin{aligned} \tilde{Q}_{LM}^{(1)} = & \frac{i}{2} \sqrt{\frac{4\pi}{2L+1}} (4\pi\epsilon_0) c \mathcal{B} \sum_{\substack{\kappa'=-\infty \\ (\kappa' \neq 0)}}^{\infty} \sum_{m=-|\kappa'|+\frac{1}{2}}^{|\kappa'|-\frac{1}{2}} \langle \Omega_{\kappa'm} | \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa\mu} \rangle \langle \Omega_{\kappa\mu} | Y_{LM} \Omega_{\kappa'm} \rangle \\ & \times \int_0^\infty dr \int_0^\infty dr' \left( \begin{array}{cc} P_{n\kappa}^{(0)}(r) & Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \end{array} \right) r^L \bar{G}_{\kappa'}^{(0)}(r, r') r' \left( \begin{array}{c} Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \\ P_{n\kappa}^{(0)}(r') \end{array} \right). \end{aligned} \quad (5.12)$$

Aby obliczyć pierwszą z całek kątowych, występujących po prawej stronie powyższej równości, zastosujemy najpierw jedną z relacji rekurencyjnych dla spinorów sferycznych (A.37), a następnie

wykorzystamy fakt, iż stanowią one układ ortonormalny na sferze jednostkowej (A.34). Wykonując w kolejnym kroku sumowanie po  $m$ , otrzymujemy

$$\begin{aligned}
\tilde{Q}_{LM}^{(1)} &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{4\pi}{2L+1}} (4\pi\epsilon_0) c\mathcal{B} \sum_{\substack{\kappa'=-\infty \\ (\kappa' \neq 0)}}^{\infty} \langle \Omega_{\kappa\mu} | Y_{LM} \Omega_{\kappa'\mu} \rangle \\
&\times \int_0^\infty dr \int_0^\infty dr' \begin{pmatrix} P_{n\kappa}^{(0)}(r) & Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \end{pmatrix} r^L \bar{G}_{\kappa'}^{(0)}(r, r') r' \begin{pmatrix} Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \\ P_{n\kappa}^{(0)}(r') \end{pmatrix} \\
&\times \left[ \frac{4\kappa\mu}{4\kappa^2-1} \delta_{\kappa',\kappa} - \frac{\sqrt{\left(\kappa - \frac{1}{2}\right)^2 - \mu^2}}{|2\kappa-1|} \delta_{\kappa',-\kappa+1} + \frac{\sqrt{\left(\kappa + \frac{1}{2}\right)^2 - \mu^2}}{|2\kappa+1|} \delta_{\kappa',-\kappa-1} \right]. \quad (5.13)
\end{aligned}$$

Mając na uwadze własność (B.3), dla całki kątovej obecnej w powyższym wyrażeniu możemy podać następującą zależność:

$$\langle \Omega_{\kappa\mu} | Y_{LM} \Omega_{\kappa'\mu} \rangle = (-)^{L+l_\kappa+l_{\kappa'}} \langle \Omega_{\kappa\mu} | Y_{LM} \Omega_{\kappa'\mu} \rangle. \quad (5.14)$$

Jeśli wyrażenie  $L + l_\kappa + l_{\kappa'}$  jest liczbą nieparzystą, to wartość całki kątovej w powyższym równaniu wynosi zero. Analiza przeprowadzona w uzupełnieniu A, a zwłaszcza wzory (A.32)–(A.33), pozwalają stwierdzić, że niezależnie od relacji pomiędzy liczbami  $\kappa$  i  $\kappa'$ , taka sytuacja będzie miała miejsce, gdy  $L$  będzie liczbą *nieparzystą*. Z fizycznego punktu widzenia oznacza to, iż w oparciu o wzór (5.13), zewnętrzne jednorodne pole magnetyczne, z dokładnością do wyrazów pierwszego rzędu ze względu na zaburzenie, wyindukuje w relatywistycznym atomie wodoropodobnym wyłącznie *parzystopolowe* momenty elektryczne<sup>11</sup>.

W związku z powyższym, najniższym momentem elektrycznym, jaki powstanie w atomie zaburzonym jednorodnym polem magnetycznym, jest moment kwadrupolowy ( $L = 2$ ), który będzie przedmiotem rozważań w kolejnym podrozdziale.

### 5.3 Indukowany kwadrupol elektryczny

Jednoelektronowy atom Diraca posiada elektryczny moment kwadrupolowy, którego składowe w sferycznym układzie współrzędnych, na podstawie wzoru (5.2), wynoszą:

$$Q_{2M} \simeq Q_{2M}^{(0)} + Q_{2M}^{(1)}, \quad (5.15)$$

przy czym  $Q_{2M}^{(0)}$  oznacza elektryczny moment kwadrupolowy atomu izolowanego, natomiast  $Q_{2M}^{(1)}$  to moment indukowany. Na podstawie wzorów (5.5), (5.7) oraz (5.13) momenty te wynoszą odpowiednio

$$Q_{2M}^{(0)} = -e \sqrt{\frac{4\pi}{5}} \oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r \Omega_{\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}_r) Y_{2M}(\mathbf{n}_r) \Omega_{\kappa\mu}(\mathbf{n}_r) \int_0^\infty dr r^2 \left\{ \left[ P_{n\kappa}^{(0)}(r) \right]^2 + \left[ Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \right]^2 \right\} \quad (5.16)$$

oraz

$$Q_{2M}^{(1)} = \tilde{Q}_{2M}^{(1)} + (-)^M \tilde{Q}_{2,-M}^{(1)*}, \quad (5.17)$$

<sup>11</sup>Całkę kątową obecną we wzorze (5.14) można wyrazić poprzez współczynniki 3-j Wignera [93, 94]. W oparciu o reguły wyboru dla współczynników 3-j pojawiających się w równaniu (5.13) można dodatkowo pokazać, iż w stanie atomu określonym liczbą kwantową  $\kappa$  zewnętrzne dipolowe pole magnetyczne wyindukuje parzystopolowe momenty elektryczne do rzędu  $2|\kappa|$  włącznie.

gdzie

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{Q}}_{2M}^{(1)} &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{4\pi}{5}} (4\pi\epsilon_0) c\mathcal{B} \sum_{\substack{\kappa'=-\infty \\ (\kappa' \neq 0)}}^{\infty} \oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r \Omega_{\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}_r) Y_{2M}(\mathbf{n}_r) \Omega_{\kappa'\mu}(\mathbf{n}_r) \\
&\times \int_0^\infty dr \int_0^\infty dr' \begin{pmatrix} P_{n\kappa}^{(0)}(r) & Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \end{pmatrix} r^2 \bar{\mathbf{G}}_{\kappa'}^{(0)}(r, r') r' \begin{pmatrix} Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \\ P_{n\kappa}^{(0)}(r') \end{pmatrix} \\
&\times \left[ \frac{4\kappa\mu}{4\kappa^2 - 1} \delta_{\kappa', \kappa} - \frac{\sqrt{(\kappa - \frac{1}{2})^2 - \mu^2}}{|2\kappa - 1|} \delta_{\kappa', -\kappa+1} + \frac{\sqrt{(\kappa + \frac{1}{2})^2 - \mu^2}}{|2\kappa + 1|} \delta_{\kappa', -\kappa-1} \right]. \quad (5.18)
\end{aligned}$$

W celu wyznaczenia składowych  $\mathcal{Q}_{2M}^{(0)}$  (dla  $M=0, \pm 1, \pm 2$ ), w pierwszym kroku wykorzystamy jawne postacie harmonik sferycznych  $Y_{2M}(\mathbf{n}_r)$ , tj. wzory (A.23)–(A.25), a następnie użyjemy relacji (A.35)–(A.36). Po wykonaniu tych operacji dokonamy całkowania po pełnym kącie bryłowym, przy jednoczesnym zastosowaniu relacji ortonormalności dla spinorów sferycznych (A.34). W rezultacie otrzymujemy następujący układ równań:

$$\mathcal{Q}_{20}^{(0)} = -\frac{e}{4} \frac{4\kappa^2 - 12\mu^2 - 1}{4\kappa^2 - 1} \int_0^\infty dr r^2 \left\{ [P_{n\kappa}^{(0)}(r)]^2 + [Q_{n\kappa}^{(0)}(r)]^2 \right\}, \quad (5.19)$$

$$\mathcal{Q}_{2, \pm 1}^{(0)} = 0, \quad (5.20)$$

$$\mathcal{Q}_{2, \pm 2}^{(0)} = 0. \quad (5.21)$$

Widzimy, iż jedyną składową, która przetrwa całkowanie kątowe, jest  $\mathcal{Q}_{20}^{(0)}$ . Aby znaleźć jej wartość liczbową, musimy wyznaczyć całkę radialną występującą w wyrażeniu (5.19). Szczegóły tego wyprowadzenia zostały zawarte w załączniku C. Na mocy wzorów (C.16) i (C.24) dostajemy ostatecznie

$$\begin{aligned}
\mathcal{Q}_{20}^{(0)} &= -\frac{ea_0^2}{8Z^2} \frac{4\kappa^2 - 12\mu^2 - 1}{4\kappa^2 - 1} \\
&\times \left[ \kappa^2 (2\gamma_\kappa^2 + 1) - 3N_{n\kappa} \kappa (n + \gamma_\kappa) + n(n + 2\gamma_\kappa) (5n^2 + 10n\gamma_\kappa + 4\gamma_\kappa^2 + 3\kappa^2 + 1) \right]. \quad (5.22)
\end{aligned}$$

Zajmiemy się teraz obliczeniem składowych tensora indukowanego elektrycznego momentu kwadrupolowego, czyli  $\mathcal{Q}_{2M}^{(1)}$  ( $M=0, \pm 1, \pm 2$ ). Sposób, w jaki zostały zdefiniowane, czyli wzór (5.17), sugeruje, by wyznaczyć najpierw wielkość  $\tilde{\mathcal{Q}}_{2M}^{(1)}$ . A zatem, do wyrażenia (5.18) wstawiamy jawne postacie zespolonych harmonik sferycznych (A.23)–(A.25), po czym zastosujemy relacje rekurencyjne (A.35)–(A.36). Dokonując następnie całkowania po kątach, uwzględniając przy tym relację (A.34), dochodzimy do wniosku, iż

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{Q}}_{20}^{(1)} &= \frac{(4\pi\epsilon_0) c\mathcal{B}\mu}{2(4\kappa^2 - 1)} \sum_{\kappa'} \int_0^\infty dr \int_0^\infty dr' \begin{pmatrix} P_{n\kappa}^{(0)}(r) & Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \end{pmatrix} r^2 \bar{\mathbf{G}}_{\kappa'}^{(0)}(r, r') r' \begin{pmatrix} Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \\ P_{n\kappa}^{(0)}(r') \end{pmatrix} \\
&\times \left[ \frac{\kappa(4\kappa^2 - 12\mu^2 - 1)}{4\kappa^2 - 1} \delta_{\kappa', \kappa} + \frac{6 \left[ (\kappa - \frac{1}{2})^2 - \mu^2 \right]}{(2\kappa - 1)(2\kappa - 3)} \delta_{\kappa', -\kappa+1} - \frac{6 \left[ (\kappa + \frac{1}{2})^2 - \mu^2 \right]}{(2\kappa + 1)(2\kappa + 3)} \delta_{\kappa', -\kappa-1} \right], \quad (5.23)
\end{aligned}$$

$$\tilde{\mathcal{Q}}_{2,\pm 1}^{(1)} = 0, \quad (5.24)$$

$$\tilde{\mathcal{Q}}_{2,\pm 2}^{(1)} = 0. \quad (5.25)$$

Uwzględnienie powyższych rezultatów w wyrażeniu (5.17) prowadzi do następujących wniosków:

$$\mathcal{Q}_{2M}^{(1)} = 0 \quad (\text{dla } M = \pm 1, \pm 2) \quad (5.26)$$

oraz

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_{20}^{(1)} &= \frac{(4\pi\epsilon_0)c\mathcal{B}\mu}{4\kappa^2 - 1} \sum_{\kappa'} \int_0^\infty dr \int_0^\infty dr' \begin{pmatrix} P_{n\kappa}^{(0)}(r) & Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \end{pmatrix} r^2 \bar{\mathcal{G}}_{\kappa'}^{(0)}(r, r') r' \begin{pmatrix} Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \\ P_{n\kappa}^{(0)}(r') \end{pmatrix} \\ &\times \left[ \frac{\kappa(4\kappa^2 - 12\mu^2 - 1)}{4\kappa^2 - 1} \delta_{\kappa', \kappa} + \frac{6 \left[ \left( \kappa - \frac{1}{2} \right)^2 - \mu^2 \right]}{(2\kappa - 1)(2\kappa - 3)} \delta_{\kappa', -\kappa + 1} - \frac{6 \left[ \left( \kappa + \frac{1}{2} \right)^2 - \mu^2 \right]}{(2\kappa + 1)(2\kappa + 3)} \delta_{\kappa', -\kappa - 1} \right]. \end{aligned} \quad (5.27)$$

Innymi słowy, jedyną niezerową składową tensora indukowanego elektrycznego momentu kwadrupolowego jest  $\mathcal{Q}_{20}^{(1)}$ , którą od tego momentu będziemy oznaczać przez  $\mathcal{Q}^{(1)}$ .

W zależności od relacji pomiędzy liczbami  $\kappa$  i  $\kappa'$ , rozwinięcie uogólnionej radialnej funkcji Greena  $\bar{\mathcal{G}}_{\kappa'}^{(0)}(r, r')$  będzie miało różną postać. W związku z tym, przepiszmy definicję (5.27) w następującej formie:

$$\mathcal{Q}^{(1)} = \mathcal{Q}_{\kappa}^{(1)} + \mathcal{Q}_{-\kappa+1}^{(1)} + \mathcal{Q}_{-\kappa-1}^{(1)}, \quad (5.28)$$

gdzie

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_{\kappa}^{(1)} &= (4\pi\epsilon_0)c\mathcal{B}\mu \frac{\kappa(4\kappa^2 - 12\mu^2 - 1)}{(4\kappa^2 - 1)^2} \\ &\times \int_0^\infty dr \int_0^\infty dr' \begin{pmatrix} P_{n\kappa}^{(0)}(r) & Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \end{pmatrix} r^2 \bar{\mathcal{G}}_{\kappa}^{(0)}(r, r') r' \begin{pmatrix} Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \\ P_{n\kappa}^{(0)}(r') \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5.29)$$

oraz

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_{-\kappa+1}^{(1)} + \mathcal{Q}_{-\kappa-1}^{(1)} &= \frac{6(4\pi\epsilon_0)c\mathcal{B}\mu}{4\kappa^2 - 1} \sum_{\kappa'} \left[ \frac{\left( \kappa - \frac{1}{2} \right)^2 - \mu^2}{(2\kappa - 1)(2\kappa - 3)} \delta_{\kappa', -\kappa + 1} - \frac{\left( \kappa + \frac{1}{2} \right)^2 - \mu^2}{(2\kappa + 1)(2\kappa + 3)} \delta_{\kappa', -\kappa - 1} \right] \\ &\times \int_0^\infty dr \int_0^\infty dr' \begin{pmatrix} P_{n\kappa}^{(0)}(r) & Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \end{pmatrix} r^2 \bar{\mathcal{G}}_{\kappa'}^{(0)}(r, r') r' \begin{pmatrix} Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \\ P_{n\kappa}^{(0)}(r') \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (5.30)$$

W pierwszej kolejności zajmiemy się wyznaczeniem składnika  $\mathcal{Q}_{\kappa}^{(1)}$ , który występuje dla symetrii  $\kappa' = \kappa$ . Zapiszmy równanie (5.29) w postaci

$$\mathcal{Q}_{\kappa}^{(1)} = (4\pi\epsilon_0)c\mathcal{B}\mu \frac{\kappa(4\kappa^2 - 12\mu^2 - 1)}{(4\kappa^2 - 1)^2} I_{\kappa\mathcal{Q}}, \quad (5.31)$$

przy czym

$$I_{\kappa\mathcal{Q}} = \int_0^\infty dr \int_0^\infty dr' \begin{pmatrix} P_{n\kappa}^{(0)}(r) & Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \end{pmatrix} r^2 \bar{\mathcal{G}}_{\kappa}^{(0)}(r, r') r' \begin{pmatrix} Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \\ P_{n\kappa}^{(0)}(r') \end{pmatrix}. \quad (5.32)$$

Do powyższego wyrażenia wstawiamy funkcję Greena, daną wzorem (3.43), której postać sugeruje rozbicie całki  $I_{\kappa\mathcal{Q}}$  na sumę czterech składników:

$$I_{\kappa\mathcal{Q}} = \widehat{I}_{\kappa\mathcal{Q}}^{(\infty)} + \widehat{I}_{\kappa}^{(a)}(2, 1) + \widehat{I}_{\kappa}^{(b)}(2, 1) + \widehat{I}_{\kappa}^{(c)}(2, 1). \quad (5.33)$$

Pojawiające się tutaj wielkości  $\widehat{I}_{\kappa}^{(a)}(2, 1)$ ,  $\widehat{I}_{\kappa}^{(b)}(2, 1)$  oraz  $\widehat{I}_{\kappa}^{(c)}(2, 1)$  to całki radialne zdefiniowane za pomocą wzorów (C.41)–(C.43), natomiast

$$\begin{aligned} \widehat{I}_{\kappa\mathcal{Q}}^{(\infty)} &= \sum_{\substack{n'=-\infty \\ (n' \neq n)}}^{\infty} \frac{1}{\mu_{n'\kappa}^{(0)} - 1} \int_0^{\infty} dr r^2 \left( P_{n\kappa}^{(0)}(r) S_{n'\kappa}^{(0)}(2\lambda r) + Q_{n\kappa}^{(0)}(r) T_{n'\kappa}^{(0)}(2\lambda r) \right) \\ &\quad \times \int_0^{\infty} dr' r' \left( \mu_{n'\kappa}^{(0)} Q_{n\kappa}^{(0)}(r') S_{n'\kappa}^{(0)}(2\lambda r') + P_{n\kappa}^{(0)}(r') T_{n'\kappa}^{(0)}(2\lambda r') \right), \end{aligned} \quad (5.34)$$

gdzie  $\mu_{n'\kappa}^{(0)}$  jest określona wyrażeniem (4.33). Analiza przeprowadzona w załączniku C, a zwłaszcza wzór (C.47), pozwalają nam napisać, iż

$$\widehat{I}_{\kappa}^{(a)}(2, 1) + \widehat{I}_{\kappa}^{(c)}(2, 1) = 0, \quad (5.35)$$

a w konsekwencji

$$I_{\kappa\mathcal{Q}} = \widehat{I}_{\kappa\mathcal{Q}}^{(\infty)} + \widehat{I}_{\kappa}^{(b)}(2, 1). \quad (5.36)$$

Wartość całki  $\widehat{I}_{\kappa}^{(b)}(2, 1)$  dostaniemy, kładąc w równaniu (C.50)  $k = 2$  oraz  $t = 1$ ; mamy zatem

$$\begin{aligned} \widehat{I}_{\kappa}^{(b)}(2, 1) &= -\frac{a_0 N_{n\kappa}^2}{Z^2} \int_0^{\infty} dr' r' P_{n\kappa}^{(0)}(r') Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \int_0^{\infty} dr r^2 \left\{ (3\epsilon_{n\kappa} + 1) [P_{n\kappa}^{(0)}(r)]^2 + (3\epsilon_{n\kappa} - 1) [Q_{n\kappa}^{(0)}(r)]^2 \right\} \\ &= -\frac{a_0 N_{n\kappa}^2}{Z^2} \int_0^{\infty} dr' r' P_{n\kappa}^{(0)}(r') Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \\ &\quad \times \left\{ \int_0^{\infty} dr r^2 \left( [P_{n\kappa}^{(0)}(r)]^2 - [Q_{n\kappa}^{(0)}(r)]^2 \right) + 3\epsilon_{n\kappa} \int_0^{\infty} dr r^2 \left( [P_{n\kappa}^{(0)}(r)]^2 + [Q_{n\kappa}^{(0)}(r)]^2 \right) \right\}. \end{aligned} \quad (5.37)$$

Obliczenie wartości poszczególnych całek radialnych, występujących w powyższym wyrażeniu, zostało szczegółowo przedstawione w załączniku C. Wykorzystujemy zatem wzory (C.16)–(C.18) oraz (C.24)–(C.26) i otrzymujemy

$$\begin{aligned} \widehat{I}_{\kappa}^{(b)}(2, 1) &= \frac{\alpha a_0^4}{4Z^4} (n + \gamma_{\kappa}) [N_{n\kappa} - 2\kappa(n + \gamma_{\kappa})] \left[ \kappa^2 (7n^2 + 14n\gamma_{\kappa} + 4\gamma_{\kappa}^2 + 2) \right. \\ &\quad \left. + n(n + 2\gamma_{\kappa})(10n^2 + 20n\gamma_{\kappa} + 7\gamma_{\kappa}^2 + 2) - 6\kappa N_{n\kappa}(n + \gamma_{\kappa}) \right]. \end{aligned} \quad (5.38)$$

Dla tej symetrii pozostał nam jeszcze do wyznaczenia składnik  $\widehat{I}_{\kappa\mathcal{Q}}^{(\infty)}$ . Przepiszmy jego definicję (5.34) w postaci

$$\widehat{I}_{\kappa\mathcal{Q}}^{(\infty)} = \sum_{\substack{n'=-\infty \\ (n' \neq n)}}^{\infty} \frac{\mathcal{J}_1(1, \mu_{n'\kappa}^{(0)}) \mathcal{J}_2(2, 1)}{\mu_{n'\kappa}^{(0)} - 1}. \quad (5.39)$$

Pojawiające się tutaj wielkości  $\mathcal{J}_1(1, \mu_{n'\kappa}^{(0)})$  oraz  $\mathcal{J}_2(2, 1)$  to całki radialne odpowiednio typu (C.10) i (C.11). Wykorzystując ich jawne postacie, czyli wzory (C.14) oraz (C.13), uwzględniając również

(C.15), dostajemy dość obszerne wyrażenie

$$\begin{aligned}
\widehat{I}_{\kappa\mathcal{Q}}^{(\infty)} &= \frac{\alpha a_0^4}{Z^4} \frac{\Gamma(n+2\gamma_\kappa+1)N_{n\kappa}^3}{64n!(N_{n\kappa}-\kappa)} \sum_{\substack{n'=-\infty \\ (n' \neq n)}}^{\infty} \frac{|n'|!}{N_{n'\kappa}(N_{n'\kappa}-\kappa)\Gamma(|n'|+2\gamma_\kappa+1)} \\
&\times \left\{ n^2(n-1)^2(N_{n'\kappa}-\kappa) \left( (n-2)(n+2\gamma_\kappa-2) + (\kappa-N_{n'\kappa})[\kappa-N_{n\kappa}-4\epsilon_{n\kappa}(n+\gamma_\kappa-1)] \right) \delta_{|n'|,n-2} \right. \\
&+ n^2 \left( (\kappa-N_{n'\kappa})(2n+2\gamma_\kappa-1) + \frac{\mu_{n'\kappa}^{(0)}+1}{\mu_{n'\kappa}^{(0)}-1} \left[ (\kappa-N_{n\kappa})(\kappa-N_{n'\kappa}) - (n-1)(n+2\gamma_\kappa-1) \right] \right) \\
&\times \left( 2(N_{n'\kappa}-\kappa)[(n+\gamma_\kappa)(3\epsilon_{n\kappa}+2\kappa-2N_{n'\kappa}) - \epsilon_{n\kappa}(3n^2+6n\gamma_\kappa+2\gamma_\kappa^2+1)] \right. \\
&\quad \left. - (n-1)(n+2\gamma_\kappa-1)[4(n+\gamma_\kappa-1) + \epsilon_{n\kappa}(\kappa-N_{n\kappa})] \right) \delta_{|n'|,n-1} \\
&- 2(N_{n\kappa}-\kappa)^2 \left( 3(n+\gamma_\kappa)(2\kappa+N_{n\kappa}-N_{n'\kappa}) - (N_{n\kappa}+N_{n'\kappa})(3n^2+6n\gamma_\kappa+2\gamma_\kappa^2+1) \right. \\
&\quad \left. + 2\epsilon_{n\kappa}(n+\gamma_\kappa)(N_{n\kappa}+\kappa)(2\kappa-N_{n\kappa}-N_{n'\kappa}) \right) \left( (N_{n\kappa}+\kappa)(N_{n'\kappa}-N_{n\kappa}) \right. \\
&\quad \left. + \frac{\mu_{n'\kappa}^{(0)}+1}{\mu_{n'\kappa}^{(0)}-1} \left[ 2(n+\gamma_\kappa)(2\kappa+N_{n\kappa}-N_{n'\kappa}) - (N_{n\kappa}+N_{n'\kappa}) \right] \right) \delta_{|n'|,n} \\
&+ (n+2\gamma_\kappa+1)^2(N_{n\kappa}-\kappa)^2 \left( 2(n+\gamma_\kappa)(3\epsilon_{n\kappa}+N_{n\kappa}+N_{n'\kappa}) + 2\epsilon_{n\kappa}(3n^2+6n\gamma_\kappa+2\gamma_\kappa^2+1) \right. \\
&\quad \left. - (\kappa-N_{n'\kappa})[\epsilon_{n\kappa}(N_{n\kappa}+\kappa)+4] \right) \left( \frac{\mu_{n'\kappa}^{(0)}+1}{\mu_{n'\kappa}^{(0)}-1} (2\kappa+N_{n\kappa}-N_{n'\kappa}) - (2n+2\gamma_\kappa+1) \right) \delta_{|n'|,n+1} \\
&\left. - (n+2\gamma_\kappa+1)^2(n+2\gamma_\kappa+2)^2(\kappa-N_{n\kappa})^2 [4\epsilon_{n\kappa}(n+\gamma_\kappa+1)+N_{n\kappa}+N_{n'\kappa}] \delta_{|n'|,n+2} \right\}. \quad (5.40)
\end{aligned}$$

Obecność delt Kroneckera powoduje, iż z całej powyższej nieskończonej sumy pozostaje tylko pięć wyrazów:

$$\widehat{I}_{\kappa\mathcal{Q}}^{(\infty)} = \widehat{I}_{\kappa\mathcal{Q}}^{(\infty)}[n-2] + \widehat{I}_{\kappa\mathcal{Q}}^{(\infty)}[n-1] + \widehat{I}_{\kappa\mathcal{Q}}^{(\infty)}[n] + \widehat{I}_{\kappa\mathcal{Q}}^{(\infty)}[n+1] + \widehat{I}_{\kappa\mathcal{Q}}^{(\infty)}[n+2], \quad (5.41)$$

przy czym symbole w nawiasach kwadratowych każdego ze składników po prawej stronie powyższego równania określają, która z delt Kroneckera jest odpowiedzialna za jego istnienie. Wyznaczenie każdego z tych pięciu wyrazów jest bardzo żmudne i czasochłonne. Zatem, podobnie jak to miało miejsce w przypadku obliczania całki  $I_{\kappa\chi}$  w rozdziale 4, zapiszemy tutaj tylko ich końcowe postacie. Mamy:

$$\widehat{I}_{\kappa\mathcal{Q}}^{(\infty)}[n] = \frac{\alpha a_0^4}{8Z^4} n(n+\gamma_\kappa)(n+2\gamma_\kappa) [3N_{n\kappa} + 2\kappa(n+\gamma_\kappa)] [N_{n\kappa}^2 + 2(n+\gamma_\kappa)^2], \quad (5.42)$$



$$\begin{aligned} \tilde{I}_{\kappa\mathcal{Q}}^{(\infty)}[n \pm 1] = & \frac{\alpha a_0^4}{16Z^4} N_{n\kappa}^2 (N_{n\kappa} \mp \kappa) \left\{ \kappa N_{n\kappa} \left[ 4(3n^2 + 6n\gamma_\kappa + 2\gamma_\kappa^2 + 1) \pm 15(n + \gamma_\kappa)^3 \right. \right. \\ & \left. \mp (n + \gamma_\kappa)(11\gamma_\kappa^2 \pm 8\kappa^2 - 11) \right] + (n + \gamma_\kappa) \left[ \kappa^2(15n^2 + 30n\gamma_\kappa + 8\kappa^2) \right. \\ & \left. \left. + (\kappa^2 + 2)(4\gamma_\kappa^2 - 1) \mp (n + \gamma_\kappa)(10n^2 + 20n\gamma_\kappa \pm 11n \pm 11\gamma_\kappa + 4\gamma_\kappa^2 + 5) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (5.43)$$

$$\tilde{I}_{\kappa\mathcal{Q}}^{(\infty)}[n \pm 2] = \frac{\alpha a_0^4}{32Z^4} N_{n\kappa}^2 (\kappa \mp N_{n\kappa})(n \pm 1)(n + 2\gamma_\kappa \pm 1) \left[ 4(\gamma_\kappa^2 \pm \gamma_\kappa \pm n) + (N_{n\kappa} \pm \kappa)(5N_{n\kappa} \mp 4\kappa) \right]. \quad (5.44)$$

Przy wyprowadzaniu powyższych równań zostały wykorzystane własności (4.41) i (4.64). W równaniu (5.36) uwzględniamy teraz wzory (5.38), (5.41) oraz (5.42)–(5.44) i po uporządkowaniu otrzymanego wyrażenia dostajemy

$$\hat{I}_{\kappa\mathcal{Q}} = \frac{\alpha a_0^4}{2Z^4} \kappa (\kappa^2 - \gamma_\kappa^2) \left\{ N_{n\kappa}^2 (5n^2 + 10n\gamma_\kappa + 4\gamma_\kappa^2 + 1) - \kappa(n + \gamma_\kappa) [(2\kappa(n + \gamma_\kappa) + 3N_{n\kappa})] \right\} \quad (5.45)$$

lub równoważnie

$$\hat{I}_{\kappa\mathcal{Q}} = \frac{\alpha^3 a_0^4}{2Z^2} \kappa \left\{ N_{n\kappa}^2 (5n^2 + 10n\gamma_\kappa + 4\gamma_\kappa^2 + 1) - \kappa(n + \gamma_\kappa) [(2\kappa(n + \gamma_\kappa) + 3N_{n\kappa})] \right\}. \quad (5.46)$$

A zatem, pierwszy składnik indukowanego elektrycznego momentu kwadrupolowego, na podstawie (5.31), wynosi

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_\kappa^{(1)} = & \frac{\alpha^3 a_0^4}{Z^2} (4\pi\epsilon_0) c B \mu \frac{\kappa^2 (4\kappa^2 - 12\mu^2 - 1)}{2(4\kappa^2 - 1)^2} \\ & \times \left\{ N_{n\kappa}^2 (5n^2 + 10n\gamma_\kappa + 4\gamma_\kappa^2 + 1) - \kappa(n + \gamma_\kappa) [(2\kappa(n + \gamma_\kappa) + 3N_{n\kappa})] \right\}. \end{aligned} \quad (5.47)$$

Zajmiemy się teraz wyznaczeniem dwóch pozostałych składników wyrażenia (5.28). W tym celu ich sumę, daną równaniem (5.30), przepiszemy w następującej formie:

$$\mathcal{Q}_{-\kappa+1}^{(1)} + \mathcal{Q}_{-\kappa-1}^{(1)} = \frac{6(4\pi\epsilon_0) c B \mu}{4\kappa^2 - 1} \sum_{\kappa'} \left[ \frac{\left(\kappa - \frac{1}{2}\right)^2 - \mu^2}{(2\kappa - 1)(2\kappa - 3)} \delta_{\kappa', -\kappa+1} - \frac{\left(\kappa + \frac{1}{2}\right)^2 - \mu^2}{(2\kappa + 1)(2\kappa + 3)} \delta_{\kappa', -\kappa-1} \right] I_{\kappa'\mathcal{Q}}. \quad (5.48)$$

Z postaci powyższego równania wynika, iż do wyznaczenia sumy  $\mathcal{Q}_{-\kappa+1}^{(1)} + \mathcal{Q}_{-\kappa-1}^{(1)}$  niezbędna jest znajomość całki radialnej  $I_{\kappa'\mathcal{Q}}$ , zdefiniowanej jako:

$$I_{\kappa'\mathcal{Q}} = \int_0^\infty dr \int_0^\infty dr' \begin{pmatrix} P_{n\kappa}^{(0)}(r) & Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \end{pmatrix} r^2 \bar{\mathcal{G}}_{\kappa'}^{(0)}(r, r') r' \begin{pmatrix} Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \\ P_{n\kappa}^{(0)}(r') \end{pmatrix}. \quad (5.49)$$

Aby obliczyć wartość liczbową powyższego wyrażenia, w pierwszym kroku wstawimy do niego postać uogólnionej radialnej funkcji Greena dla rozpatrywanej symetrii  $\kappa' = -\kappa \pm 1$ , czyli wzór (3.42). Konsekwencją takiego podstawienia będzie pojawienie się całek radialnych typu (C.5) oraz (C.6), w oparciu o które możemy napisać

$$I_{\kappa'\mathcal{Q}} = \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \frac{\mathcal{I}_1(1, \mu_{n'\kappa'}^{(0)}) \mathcal{I}_2(2, 1)}{\mu_{n'\kappa'}^{(0)} - 1}, \quad (5.50)$$

gdzie, dla przypomnienia, wartość własna  $\mu_{n'\kappa'}^{(0)}$  została określona wzorem (3.47). Jawną postać całki  $\mathcal{I}_2(2, 1)$  otrzymamy, kładąc w (C.8) warunki  $L = 2$  oraz  $C = 1$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_2(2, 1) &= 2A_0 \sqrt{\frac{N_{n\kappa}}{\alpha Z}} \left(\frac{1}{2\lambda}\right)^3 \frac{\Gamma(n + 2\gamma_\kappa)}{(|n'| - 1)!(N_{n'\kappa'} + \kappa')} \\ &\times \sum_{k=0}^n \frac{(-)^k}{k!} \frac{\Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + k + 3)\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k - 3)}{\Gamma(n - k + 1)\Gamma(k + 2\gamma_\kappa + 1)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k - 3)} \\ &\times \left\{ (N_{n'\kappa'} + \kappa') \left[ (n - k) + \epsilon_{n\kappa}(\kappa - N_{n\kappa}) \right] \right. \\ &\quad \left. - (|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k - 3) \left[ (\kappa - N_{n\kappa}) + \epsilon_{n\kappa}(n - k) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (5.51)$$

natomiast całka  $\mathcal{I}_1(1, \mu_{n'\kappa'}^{(0)})$  pojawiła się w rozprawie już wcześniej, przy omawianiu sumy składników  $\chi_{-\kappa-1} + \chi_{-\kappa+1}$  magnetyzowalności; jej postać określa wzór (4.51). Do wyrażenia (5.50) wstawiamy zatem wzory (4.51) i (5.51), uwzględniając jednocześnie zależności (3.45) oraz (C.9). Dokonujemy następnie kilku przekształceń algebraicznych, wykorzystując przy tym własność (4.41). W rezultacie dostajemy

$$\begin{aligned} I_{\kappa'\mathcal{Q}} &= \frac{\alpha a_0^4}{Z^4} \frac{n!\Gamma(n + 2\gamma_\kappa + 1)N_{n\kappa}^3}{64(N_{n\kappa} - \kappa)} \sum_{k=0}^n \sum_{p=0}^n \frac{(-)^{k+p}}{k!p!} f_{\mathcal{Q}}(k, p) \\ &\times \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k - 3)\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 2)}{|n'|!\Gamma(|n'| + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \frac{N_{n'\kappa'} - \kappa'}{N_{n'\kappa'}} \\ &\times \left\{ (N_{n'\kappa'} + \kappa') \left[ (n - k) + \epsilon_{n\kappa}(\kappa - N_{n\kappa}) \right] - (|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k - 3) \left[ (\kappa - N_{n\kappa}) + \epsilon_{n\kappa}(n - k) \right] \right\} \\ &\times \left\{ \frac{\mu_{n'\kappa'}^{(0)} + 1}{\mu_{n'\kappa'}^{(0)} - 1} \left[ (n - p)(N_{n'\kappa'} + \kappa') + (\kappa - N_{n\kappa})(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 2) \right] \right. \\ &\quad \left. - \left[ (\kappa - N_{n\kappa})(N_{n'\kappa'} + \kappa') + (n - p)(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 2) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (5.52)$$

gdzie wprowadzono tymczasowe oznaczenie

$$\begin{aligned} f_{\mathcal{Q}}(k, p) &= \frac{\Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + k + 3)}{\Gamma(k + 2\gamma_\kappa + 1)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k - 2)\Gamma(n - k + 1)} \\ &\times \frac{\Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + p + 2)}{\Gamma(p + 2\gamma_\kappa + 1)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 1)\Gamma(n - p + 1)}. \end{aligned} \quad (5.53)$$

Przepisanie równania (5.52) w postaci:

$$I_{\kappa'\mathcal{Q}} = \frac{\alpha a_0^4}{Z^4} \frac{n!\Gamma(n + 2\gamma_\kappa + 1)N_{n\kappa}^3}{64(N_{n\kappa} - \kappa)} \sum_{k=0}^n \sum_{p=0}^n \frac{(-)^{k+p}}{k!p!} f_{\mathcal{Q}}(k, p) \sum_{i=1}^8 S_i^{(\mathcal{Q})} \quad (5.54)$$

ma na celu zapewnienie maksymalnej przejrzystości przeprowadzanych obliczeń. Szereg obecny we wzorze (5.52) został przedstawiony w formie sumy  $\sum_{i=1}^8 S_i^{(\mathcal{Q})}$ , której poszczególne składniki wynoszą:

$$\begin{aligned}
S_1^{(\mathcal{Q})} &= (n-p)[(n-k) + \epsilon_{n\kappa}(\kappa - N_{n\kappa})] \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \frac{|n'| + \gamma_{\kappa'} + N_{n'\kappa'} + n + \gamma_{\kappa} + N_{n\kappa}}{|n'| + \gamma_{\kappa'} + N_{n'\kappa'} - n - \gamma_{\kappa} - N_{n\kappa}} \\
&\times \frac{\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 3)\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 2)}{|n'|!\Gamma(|n'| + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \frac{(N_{n'\kappa'} - \kappa')(N_{n'\kappa'} + \kappa')^2}{N_{n'\kappa'}}, \quad (5.55)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S_2^{(\mathcal{Q})} &= (\kappa - N_{n\kappa})[(n-k) + \epsilon_{n\kappa}(\kappa - N_{n\kappa})] \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \frac{|n'| + \gamma_{\kappa'} + N_{n'\kappa'} + n + \gamma_{\kappa} + N_{n\kappa}}{|n'| + \gamma_{\kappa'} + N_{n'\kappa'} - n - \gamma_{\kappa} - N_{n\kappa}} \\
&\times \frac{\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 3)\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{|n'|!\Gamma(|n'| + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \frac{(N_{n'\kappa'} - \kappa')(N_{n'\kappa'} + \kappa')}{N_{n'\kappa'}}, \quad (5.56)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S_3^{(\mathcal{Q})} &= -(n-p)[(\kappa - N_{n\kappa}) + \epsilon_{n\kappa}(n-k)] \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \frac{|n'| + \gamma_{\kappa'} + N_{n'\kappa'} + n + \gamma_{\kappa} + N_{n\kappa}}{|n'| + \gamma_{\kappa'} + N_{n'\kappa'} - n - \gamma_{\kappa} - N_{n\kappa}} \\
&\times \frac{\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2)\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 2)}{|n'|!\Gamma(|n'| + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \frac{(N_{n'\kappa'} - \kappa')(N_{n'\kappa'} + \kappa')}{N_{n'\kappa'}}, \quad (5.57)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S_4^{(\mathcal{Q})} &= (N_{n\kappa} - \kappa)[(\kappa - N_{n\kappa}) + \epsilon_{n\kappa}(n-k)] \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \frac{|n'| + \gamma_{\kappa'} + N_{n'\kappa'} + n + \gamma_{\kappa} + N_{n\kappa}}{|n'| + \gamma_{\kappa'} + N_{n'\kappa'} - n - \gamma_{\kappa} - N_{n\kappa}} \\
&\times \frac{\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2)\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{|n'|!\Gamma(|n'| + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \frac{N_{n'\kappa'} - \kappa'}{N_{n'\kappa'}}, \quad (5.58)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S_5^{(\mathcal{Q})} &= (N_{n\kappa} - \kappa)[(n-k) + \epsilon_{n\kappa}(\kappa - N_{n\kappa})] \\
&\times \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 3)\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 2)}{|n'|!\Gamma(|n'| + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \frac{(N_{n'\kappa'} - \kappa')(N_{n'\kappa'} + \kappa')^2}{N_{n'\kappa'}}, \quad (5.59)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S_6^{(\mathcal{Q})} &= -(n-p)[(n-k) + \epsilon_{n\kappa}(\kappa - N_{n\kappa})] \\
&\times \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 3)\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 2)}{|n'|!\Gamma(|n'| + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \frac{(N_{n'\kappa'} - \kappa')(N_{n'\kappa'} + \kappa')}{N_{n'\kappa'}}, \quad (5.60)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S_7^{(\mathcal{Q})} &= (\kappa - N_{n\kappa})[(\kappa - N_{n\kappa}) + \epsilon_{n\kappa}(n-k)] \\
&\times \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2)\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 2)}{|n'|!\Gamma(|n'| + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \frac{(N_{n'\kappa'} - \kappa')(N_{n'\kappa'} + \kappa')}{N_{n'\kappa'}}, \quad (5.61)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S_8^{(\mathcal{Q})} &= (n-p)[(\kappa - N_{n\kappa}) + \epsilon_{n\kappa}(n-k)] \\
&\times \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2)\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{|n'|!\Gamma(|n'| + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \frac{N_{n'\kappa'} - \kappa'}{N_{n'\kappa'}}. \quad (5.62)
\end{aligned}$$

Przy formowaniu wzorów (5.55)–(5.58) wykorzystano zależność (3.47). W kolejnych krokach postępowania zajmiemy się wyznaczeniem każdego z wyżej podanych składników, przy czym tok rozumowania w przypadku tych obliczeń będzie bardzo podobny do tego, jakim kierowaliśmy się przy rozpatrywaniu wyrażenia  $\sum_{i=1}^8 S_1^{(\chi)}$  w rozdziale 4.

Jako pierwszy wyznaczmy składnik  $S_5^{(\mathcal{Q})}$ . Na potrzeby dalszych rachunków, w szeregu występującym po prawej stronie równania (5.59) dokonamy zamiany sumowania z  $\sum_{n'=-\infty}^{\infty}(\dots)$  na  $\sum_{n'=0}^{\infty}(\dots)$ . Transformację tę rozpoczynamy poprzez zastosowanie schematu opisanego wzorami (4.63)–(4.64). Skutkuje to otrzymaniem następującego wyrażenia:

$$S_5^{(\mathcal{Q})} = (N_{n\kappa} - \kappa)[(n - k) + \epsilon_{n\kappa}(\kappa - N_{n\kappa})] \times \left[ \sum_{n'=1}^{\infty} \frac{\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 3)\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 2)}{n'!\Gamma(n' + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \frac{(-N_{n'\kappa'} - \kappa')(N_{n'\kappa'} - \kappa')^2}{-N_{n'\kappa'}} \right. \\ \left. + \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 3)\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 2)}{n'!\Gamma(n' + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \frac{(N_{n'\kappa'} - \kappa')(N_{n'\kappa'} + \kappa')^2}{N_{n'\kappa'}} \right]. \quad (5.63)$$

W kolejnym kroku, do szeregu, w którym sumowanie rozpoczyna się od 1, dodamy wyraz z  $n' = 0$ , który i tak nie wnosi żadnego wkładu do sumy. Będziemy mieć wówczas dwa szeregi o tych samych granicach, które zbierzemy następnie pod jedną sumę. Po wykonaniu tych operacji oraz zastosowaniu własności (4.41) dostajemy:

$$S_5^{(\mathcal{Q})} = 2(N_{n\kappa} - \kappa)[(n - k) + \epsilon_{n\kappa}(\kappa - N_{n\kappa})] \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 3)\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 2)}{(n' - 1)!\Gamma(n' + 2\gamma_{\kappa'})}. \quad (5.64)$$

Zwróćmy uwagę na fakt, iż wyraz z  $n' = 0$  w powyższej sumie wynosi zero. W związku z tym, rozpoczynamy sumowanie od 1, po czym dokonamy transformacji zmiennej sumowania tak, by z powrotem otrzymać szereg w granicach od 0 do  $\infty$ . Wykonanie tych czynności zwraca nam następujące wyrażenie:

$$S_5^{(\mathcal{Q})} = 2(N_{n\kappa} - \kappa)[(n - k) + \epsilon_{n\kappa}(\kappa - N_{n\kappa})] \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2)\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{n'!\Gamma(n' + 2\gamma_{\kappa'} + 1)}, \quad (5.65)$$

w którym dostrzec można, na podstawie definicji (E.6), funkcję hipergeometryczną Gaussa z jednostkowym argumentem, tj.:

$$S_5^{(\mathcal{Q})} = 2(N_{n\kappa} - \kappa)[(n - k) + \epsilon_{n\kappa}(\kappa - N_{n\kappa})] \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)} \\ \times {}_2F_1 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1 \\ 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix} ; 1 \right). \quad (5.66)$$

Funkcję  ${}_2F_1$  możemy wyeliminować za pomocą *tożsamości Gaussa*. W równaniu (5.66) uwzględniamy zatem wzór (E.9) i w rezultacie składnik  $S_5^{(\mathcal{Q})}$  przyjmuje następującą postać:

$$S_5^{(\mathcal{Q})} = 2(N_{n\kappa} - \kappa)[(n - k) + \epsilon_{n\kappa}(\kappa - N_{n\kappa})] \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)\Gamma(2\gamma_{\kappa} + k + p + 4)}{\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + k + 3)\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + p + 2)}. \quad (5.67)$$

Zajmijmy się teraz wyznaczeniem składnika  $S_8^{(\mathcal{Q})}$ . Przyjmiemy analogiczny sposób postępowania, jaki towarzyszył nam przy obliczaniu  $S_5^{(\mathcal{Q})}$ . Szereg obecny w równaniu (5.62) przekształcimy zatem zgodnie ze schematem (4.63)–(4.64). W ten sposób otrzymamy wyrażenie zawierające sumę

dwóch szeregów, o różnych granicach sumowania. Aby ujednoczyć te granice, do szeregu rozpoczynającego się od 1 włączymy (równy zero) wyraz z  $n' = 0$ . Wykonanie opisanych rachunków, wspartych kilkoma dodatkowymi przekształceniami, skutkuje otrzymaniem następującego wyrażenia:

$$S_8^{(\mathcal{Q})} = 2(n-p)[(\kappa - N_{n\kappa}) + \epsilon_{n\kappa}(n-k)] \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2)\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{n'!\Gamma(n' + 2\gamma_{\kappa'} + 1)}. \quad (5.68)$$

Z dokładnością do współczynnika liczbowego występującego przed znakiem sumy, uzyskane wyrażenie ma taką samą formę, jak wzór (5.65). Innymi słowy, zawiera ono w sobie funkcję  ${}_2F_1$  identyczną z tą występującą we wzorze (5.66). Przekształcenie tejże funkcji za pomocą zależności (E.9) pozwala nam zapisać, iż:

$$S_8^{(\mathcal{Q})} = 2(n-p)[(\kappa - N_{n\kappa}) + \epsilon_{n\kappa}(n-k)] \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)\Gamma(2\gamma_{\kappa} + k + p + 4)}{\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + k + 3)\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + p + 2)}. \quad (5.69)$$

Przyjrzyjmy się teraz kolejnym komponentom wzoru (5.54), a mianowicie składnikom  $S_6^{(\mathcal{Q})}$  oraz  $S_7^{(\mathcal{Q})}$ , danym odpowiednio poprzez (5.60) i (5.61). Ich wyznaczenie przebiega podobnie, jak w przypadku obliczonych już wielkości  $S_5^{(\mathcal{Q})}$  czy  $S_8^{(\mathcal{Q})}$ . Stosujemy zatem schemat opisany wzorami (4.63)–(4.64) i po kilku dodatkowych przekształceniach, otrzymujemy

$$S_6^{(\mathcal{Q})} = 0 \quad (5.70)$$

oraz

$$S_7^{(\mathcal{Q})} = 0. \quad (5.71)$$

Z wyrażenia (5.54) pozostały nam do wyznaczenia jeszcze cztery składniki:  $S_1^{(\mathcal{Q})}$  do  $S_4^{(\mathcal{Q})}$ . Obliczenie ich będzie wymagało nieco większej ilości rachunków. W początkowych etapach rachunków wykorzystamy jednak ten sam tok rozumowania, który stosowaliśmy przy wyprowadzaniu wyrażeń na elementy  $S_5^{(\mathcal{Q})}$  do  $S_8^{(\mathcal{Q})}$ . Weźmy pod uwagę najpierw składnik  $S_1^{(\mathcal{Q})}$ . Zgodnie z tym, co zostało przed momentem napisane, szereg występujący w równaniu (5.55) przekształcimy według schematu nakreślonego poprzez wzory (4.63)–(4.64). Dostaniemy wówczas wyrażenie zawierające sumę dwóch szeregów, których granice sumowania się różnią. W związku z tym, do szeregu, w którym sumowanie rozpoczyna się od 1, włączymy wyraz z  $n' = 0$ , który i tak nie wnosi żadnego wkładu do jego sumy. Na tym etapie zbierzemy oba szeregi pod znak jednej sumy, czyli:

$$S_1^{(\mathcal{Q})} = (n-p)[(n-k) + \epsilon_{n\kappa}(\kappa - N_{n\kappa})] \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 3)\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 2)}{(n' - 1)!\Gamma(n' + 2\gamma_{\kappa'})} \\ \times \left\{ \frac{(N_{n'\kappa'} + \kappa')(n' + \gamma_{\kappa'} + N_{n'\kappa'} + n + \gamma_{\kappa} + N_{n\kappa})}{N_{n'\kappa'}(n' + \gamma_{\kappa'} + N_{n'\kappa'} - n - \gamma_{\kappa} - N_{n\kappa})} \right. \\ \left. - \frac{(N_{n'\kappa'} - \kappa')(n' + \gamma_{\kappa'} - N_{n'\kappa'} + n + \gamma_{\kappa} + N_{n\kappa})}{N_{n'\kappa'}(n' + \gamma_{\kappa'} - N_{n'\kappa'} - n - \gamma_{\kappa} - N_{n\kappa})} \right\}. \quad (5.72)$$

Wykonanie żmudnych przekształceń algebraicznych wyrażenia znajdującego się w nawiasie klamrowym po prawej stronie równania (5.72), przy jednoczesnym wykorzystaniu zależności (4.41) oraz (4.75), pozwala znacznie je uprościć, w konsekwencji czego wzór dla  $S_1^{(\mathcal{Q})}$  przyjmuje postać

$$S_1^{(\mathcal{Q})} = 2(n-p)[(n-k) + \epsilon_{n\kappa}(\kappa - N_{n\kappa})](N_{n\kappa} + \kappa') \\ \times \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 3)\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 2)}{(n' - 1)!\Gamma(n' + 2\gamma_{\kappa'})(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n)}. \quad (5.73)$$

W związku z tym, iż wyraz z  $n' = 0$  powyższego szeregu wynosi zero, rozpoczniemy w nim sumowanie od  $n' = 1$ . Ponieważ jednak celem tych rozważań jest zapisanie wyrażenia na  $S_1^{(\mathcal{Q})}$  za pomocą funkcji hipergeometrycznych, w dalszej kolejności przeddefiniujemy zmienną sumowania w taki sposób, by dolna granica rozpatrywanego szeregu z powrotem wynosiła zero. Przeprowadzamy zatem opisane przekształcenia, wykorzystujemy następnie zależność (4.77) i dostajemy

$$S_1^{(\mathcal{Q})} = 2(n-p)[(n-k) + \epsilon_{n\kappa}(\kappa - N_{n\kappa})](N_{n\kappa} + \kappa') \times \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2)\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1)}{n'!\Gamma(n' + 2\gamma_{\kappa'} + 1)\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 2)}. \quad (5.74)$$

W ostatnim kroku zastosujemy definicję (E.7) do wyrażenia powyższego wzoru poprzez funkcje hipergeometryczne z jednostkowym argumentem, tj.:

$$S_1^{(\mathcal{Q})} = 2(n-p)[(n-k) + \epsilon_{n\kappa}(\kappa - N_{n\kappa})](N_{n\kappa} + \kappa') \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1)} \times {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 2, 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix}; 1 \right). \quad (5.75)$$

Wyżej omówiony schemat wyprowadzenia wyrażenia na  $S_1^{(\mathcal{Q})}$  został powtórzony przy wyznaczaniu składników  $S_2^{(\mathcal{Q})}$  do  $S_4^{(\mathcal{Q})}$ . Zatem, rezygnując z opisywania szczegółowych rachunków, ograniczymy się do podania w rozprawie tylko końcowych wyników tych przekształceń. I tak:

$$S_2^{(\mathcal{Q})} = 2(\kappa - N_{n\kappa})[(n-k) + \epsilon_{n\kappa}(\kappa - N_{n\kappa})] \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p)}{\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1)} \times {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 2, 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix}; 1 \right), \quad (5.76)$$

$$S_3^{(\mathcal{Q})} = -2(n-p)[(\kappa - N_{n\kappa}) + \epsilon_{n\kappa}(n-k)] \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 1)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1)} \times {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 2, 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix}; 1 \right), \quad (5.77)$$

$$S_4^{(\mathcal{Q})} = 2(N_{n\kappa} - \kappa)(N_{n\kappa} - \kappa')[(\kappa - N_{n\kappa}) + \epsilon_{n\kappa}(n-k)] \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n)} \times {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1, 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix}; 1 \right). \quad (5.78)$$

Uzyskanie wyrazów  $S_1^{(\mathcal{Q})}$  do  $S_8^{(\mathcal{Q})}$  w postaci uogólnionych funkcji hipergeometrycznych stanowiło znaczną część wykonywanych rachunków. Aby ich suma (5.54) miała jak najbardziej zwartą postać, należy doprowadzić do sytuacji, w której każda z funkcji  ${}_3F_2$  będzie miała takie same wszystkie parametry. W tym celu za pomocą odpowiednich transformacji dokonamy podwyższenia bądź obniżenia górnych lub/i dolnych parametrów tych funkcji. Niech punktem odniesienia będzie funkcja

${}_3F_2$  występująca w równaniu (5.75), którą, aby zapewnić czytelność następnych wzorów, oznaczmy tymczasowo przez

$${}_3F_2(\dots) \equiv {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 2, 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix} ; 1 \right). \quad (5.79)$$

Aby pozostałe funkcje hipergeometryczne, obecne w wyrażeniach dla  $S_2^{(\mathcal{Q})}$  do  $S_4^{(\mathcal{Q})}$ , doprowadzić do postaci (5.79), należy przekształcić je za pomocą odpowiednich zależności, zestawionych w uzupełnieniu E. I tak: do funkcji  ${}_3F_2$  występujących we wzorach (5.76)–(5.77) zastosujemy relację obniżającą jeden z górnych ich parametrów, tj. wzór (E.10), natomiast w funkcji pojawiającej się w wyrażeniu (5.78) należy podwyższyć jeden górny i jeden dolny parametr, czyli w stosunku do tejże funkcji  ${}_3F_2$  trzeba użyć transformacji (E.12). W rezultacie wykonania tych rachunków, wzory na  $S_2^{(\mathcal{Q})}$  do  $S_4^{(\mathcal{Q})}$  przyjmują następujące postacie:

$$\begin{aligned} S_2^{(\mathcal{Q})} &= 2(\kappa - N_{n\kappa})[(n - k) + \epsilon_{n\kappa}(\kappa - N_{n\kappa})] \\ &\quad \times \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)\Gamma(2\gamma_{\kappa} + k + p + 4)}{\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + k + 3)\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + p + 2)} \\ &\quad + 2(n - p - 2)(\kappa - N_{n\kappa})[(n - k) + \epsilon_{n\kappa}(\kappa - N_{n\kappa})] \\ &\quad \times \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1)} {}_3F_2(\dots), \end{aligned} \quad (5.80)$$

$$\begin{aligned} S_3^{(\mathcal{Q})} &= -2(n - p)[(\kappa - N_{n\kappa}) + \epsilon_{n\kappa}(n - k)] \\ &\quad \times \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)\Gamma(2\gamma_{\kappa} + k + p + 4)}{\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + k + 3)\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + p + 2)} \\ &\quad - 2(n - p)(n - k - 3)(\kappa - N_{n\kappa})[(\kappa - N_{n\kappa}) + \epsilon_{n\kappa}(n - k)] \\ &\quad \times \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1)} {}_3F_2(\dots), \end{aligned} \quad (5.81)$$

$$\begin{aligned} S_4^{(\mathcal{Q})} &= 2[(\kappa - N_{n\kappa}) + \epsilon_{n\kappa}(n - k)] \\ &\quad \times \frac{\kappa - N_{n\kappa}}{\kappa' + N_{n\kappa}} \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)\Gamma(2\gamma_{\kappa} + k + p + 5)}{\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + k + 3)\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + p + 2)} \\ &\quad - 2(n - k - 3)(n - p - 2)[(\kappa - N_{n\kappa}) + \epsilon_{n\kappa}(n - k)] \frac{\kappa - N_{n\kappa}}{\kappa' + N_{n\kappa}} \\ &\quad \times \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1)} {}_3F_2(\dots), \end{aligned} \quad (5.82)$$

przy czym do uzyskania wzoru (5.82) niezbędne było wykorzystanie dodatkowo własności (4.88) oraz zależności

$$\begin{aligned} (n - k - 3)(n - p - 2) + (n + \gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa}')(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + k + p - n + 5) \\ = (\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + k + 3)(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + p + 2). \end{aligned} \quad (5.83)$$

Teraz możemy już zsumować wszystkie wyznaczone składniki  $S_1^{(\mathcal{Q})}$  do  $S_8^{(\mathcal{Q})}$ . W tym celu dodajemy do siebie wyrażenia (5.67), (5.69)–(5.71), (5.75) oraz (5.80)–(5.82) i po drobnych przekształceniach otrzymujemy

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^8 S_i^{(\mathcal{Q})} &= \frac{2}{N_{n\kappa} + \kappa'} \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + k + 3)\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + p + 2)} \\ &\times \left\{ \left[ (N_{n\kappa} + \kappa')[(n - k) + \epsilon_{n\kappa}(\kappa - N_{n\kappa})] - (n - k - 3)[(\kappa - N_{n\kappa}) + \epsilon_{n\kappa}(n - k)] \right] \right. \\ &\times \left[ 2(N_{n\kappa} - \kappa) + (n - p)(\kappa + \kappa') \right] \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + k + 3)\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + p + 2)}{\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1)} {}_3F_2(\dots) \\ &\left. + [(\kappa - N_{n\kappa}) + \epsilon_{n\kappa}(n - k)](\kappa - N_{n\kappa})\Gamma(2\gamma_{\kappa} + k + p + 5) \right\}. \end{aligned} \quad (5.84)$$

Wstawienie wzorów (5.53), (5.79) oraz (5.84) do wyrażenia (5.54) powoduje, iż szukana całka  $I_{\kappa'\mathcal{Q}}$  przyjmuje postać

$$I_{\kappa'\mathcal{Q}} = A_{\mathcal{Q}} + \sum_{k=0}^n \sum_{p=0}^n B_{\mathcal{Q}}(k, p) {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 2, 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix}; 1 \right), \quad (5.85)$$

w której współczynniki  $A_{\mathcal{Q}}$  i  $B_{\mathcal{Q}}(k, p)$  wynoszą

$$\begin{aligned} A_{\mathcal{Q}} &= -\frac{\alpha a_0^4}{Z^4} \frac{n!\Gamma(n + 2\gamma_{\kappa} + 1)N_{n\kappa}^3}{32(N_{n\kappa} + \kappa')} \sum_{k=0}^n \sum_{p=0}^n \frac{(-)^{k+p}}{k!p!} [(\kappa - N_{n\kappa}) + \epsilon_{n\kappa}(n - k)] \\ &\times \frac{\Gamma(2\gamma_{\kappa} + k + p + 5)}{\Gamma(k + 2\gamma_{\kappa} + 1)\Gamma(p + 2\gamma_{\kappa} + 1)\Gamma(n - k + 1)\Gamma(n - p + 1)} \end{aligned} \quad (5.86)$$

oraz

$$\begin{aligned} B_{\mathcal{Q}}(k, p) &= \frac{\alpha a_0^4}{Z^4} \frac{n!\Gamma(n + 2\gamma_{\kappa} + 1)N_{n\kappa}^3}{32(N_{n\kappa} - \kappa)(N_{n\kappa} + \kappa')} \frac{(-)^{k+p}}{k!p!} \left[ 2(N_{n\kappa} - \kappa) + (n - p)(\kappa + \kappa') \right] \\ &\times \frac{\left[ (N_{n\kappa} + \kappa')[(n - k) + \epsilon_{n\kappa}(\kappa - N_{n\kappa})] - (n - k - 3)[(\kappa - N_{n\kappa}) + \epsilon_{n\kappa}(n - k)] \right]}{\Gamma(n - k + 1)\Gamma(k + 2\gamma_{\kappa} + 1)\Gamma(n - p + 1)\Gamma(p + 2\gamma_{\kappa} + 1)} \\ &\times \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + k + 3)\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + p + 2)}{\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1)}. \end{aligned} \quad (5.87)$$

Okazuje się, iż wyraz  $A_{\mathcal{Q}}$  można jeszcze uprościć. Przepiszmy jego definicję w następującej postaci:

$$A_{\mathcal{Q}} = -\frac{\alpha a_0^4}{Z^4} \frac{N_{n\kappa}^3}{32(N_{n\kappa} + \kappa')} \left\{ \epsilon_{n\kappa} \tilde{f}(0, 5) + (\kappa - N_{n\kappa}) \tilde{f}(1, 5) \right\}, \quad (5.88)$$

gdzie  $\tilde{f}(0, 5)$  oraz  $\tilde{f}(1, 5)$  to pewne funkcje zdefiniowane za pomocą wzoru (F.1). Analiza tego typu wyrażeń została szczegółowo opisana w uzupełnieniu F. W oparciu o nią, a zwłaszcza o wzór (F.10), możemy napisać, że

$$\begin{aligned} A_{\mathcal{Q}} &= \frac{\alpha a_0^4}{Z^4} \frac{(-)^{n+1} N_{n\kappa}^3}{32(N_{n\kappa} + \kappa')} \left\{ \epsilon_{n\kappa} \sum_{k=n-4}^{n-1} \frac{(-)^k \Gamma(2\gamma_{\kappa} + k + 5)\Gamma(k + 5)}{k!\Gamma(2\gamma_{\kappa} + k + 1)\Gamma(k + 5 - n)\Gamma(n - k)} \right. \\ &\left. + (\kappa - N_{n\kappa}) \sum_{k=n-4}^n \frac{(-)^k \Gamma(2\gamma_{\kappa} + k + 5)\Gamma(k + 5)}{k!\Gamma(2\gamma_{\kappa} + k + 1)\Gamma(k + 5 - n)\Gamma(n - k + 1)} \right\}, \end{aligned} \quad (5.89)$$



przy czym parametr  $\epsilon_{n\kappa}$  został określony wzorem (2.20). Pomijając szczegóły, podamy tutaj końcową postać współczynnika  $A_{\mathcal{Q}}$ :

$$\begin{aligned}
A_{\mathcal{Q}} = & \frac{\alpha a_0^4}{Z^4} \frac{(N_{n\kappa} - \kappa) N_{n\kappa}^2}{16(N_{n\kappa} + \kappa')} \left\{ 4\kappa(n + \gamma_{\kappa})^2(7n^2 + 14n\gamma_{\kappa} + 4\gamma_{\kappa}^2 + 5) \right. \\
& + N_{n\kappa} \left[ 10(n + \gamma_{\kappa})(7n^2 + 14n\gamma_{\kappa} + 4\gamma_{\kappa}^2 + 5) + (n + \gamma_{\kappa})^2(51\gamma_{\kappa}^2 + 20) \right. \\
& \left. \left. + n(n + 2\gamma_{\kappa})(63n^2 + 126n\gamma_{\kappa} + 33\gamma_{\kappa}^2 + 85) - 27\gamma_{\kappa}^4 + 70\gamma_{\kappa}^2 + 12 \right] \right\}. \quad (5.90)
\end{aligned}$$

Uwzględniając wzory (5.87) i (5.90) w wyrażeniu (5.85), dostajemy wreszcie końcową postać rozważanej całki  $I_{\kappa'\mathcal{Q}}$ :

$$\begin{aligned}
I_{\kappa'\mathcal{Q}} = & \frac{\alpha a_0^4}{Z^4} \frac{(N_{n\kappa} - \kappa) N_{n\kappa}^2}{32(N_{n\kappa} + \kappa')} \left\{ 8\kappa(n + \gamma_{\kappa})^2(7n^2 + 14n\gamma_{\kappa} + 4\gamma_{\kappa}^2 + 5) \right. \\
& + 2N_{n\kappa} \left[ 10(n + \gamma_{\kappa})(7n^2 + 14n\gamma_{\kappa} + 4\gamma_{\kappa}^2 + 5) + (n + \gamma_{\kappa})^2(51\gamma_{\kappa}^2 + 20) \right. \\
& \left. + n(n + 2\gamma_{\kappa})(63n^2 + 126n\gamma_{\kappa} + 33\gamma_{\kappa}^2 + 85) - 27\gamma_{\kappa}^4 + 70\gamma_{\kappa}^2 + 12 \right] \\
& + \frac{n! \Gamma(n + 2\gamma_{\kappa} + 1) N_{n\kappa}}{(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1)(N_{n\kappa} - \kappa)^2 \Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)} \sum_{k=0}^n \sum_{p=0}^n \frac{(-)^{k+p}}{k! p!} \left[ 2(N_{n\kappa} - \kappa) + (n - p)(\kappa + \kappa') \right] \\
& \times \left[ (N_{n\kappa} + \kappa') [(n - k) + \epsilon_{n\kappa}(\kappa - N_{n\kappa})] - (n - k - 3) [(\kappa - N_{n\kappa}) + \epsilon_{n\kappa}(n - k)] \right] \\
& \times \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + k + 3) \Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + p + 2)}{\Gamma(n - k + 1) \Gamma(k + 2\gamma_{\kappa} + 1) \Gamma(n - p + 1) \Gamma(p + 2\gamma_{\kappa} + 1)} \\
& \left. \times {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k - 2, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 2, 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix} ; 1 \right) \right\}. \quad (5.91)
\end{aligned}$$

A zatem, suma dwóch ostatnich składników indukowanego elektrycznego momentu kwadrupolowe-

go, na podstawie (5.30), wynosi

$$\begin{aligned}
\mathcal{Q}_{-\kappa+1}^{(1)} + \mathcal{Q}_{-\kappa-1}^{(1)} &= \frac{3}{64} \frac{\alpha a_0^4}{Z^4} (4\pi\epsilon_0) c\mathcal{B}\mu \frac{N_{n\kappa}^2 (N_{n\kappa} - \kappa)}{4\kappa^2 - 1} \sum_{\kappa'} \frac{1}{N_{n\kappa} + \kappa'} \\
&\times \left[ \frac{(2\kappa - 1)^2 - 4\mu^2}{(2\kappa - 1)(2\kappa - 3)} \delta_{\kappa', -\kappa+1} - \frac{(2\kappa + 1)^2 - 4\mu^2}{(2\kappa + 1)(2\kappa + 3)} \delta_{\kappa', -\kappa-1} \right] \\
&\times \left\{ 2N_{n\kappa} \left[ 10(n + \gamma_\kappa)(7n^2 + 14n\gamma_\kappa + 4\gamma_\kappa^2 + 5) + (n + \gamma_\kappa)^2(51\gamma_\kappa^2 + 20) \right. \right. \\
&+ n(n + 2\gamma_\kappa)(63n^2 + 126n\gamma_\kappa + 33\gamma_\kappa^2 + 85) - 27\gamma_\kappa^4 + 70\gamma_\kappa^2 + 12 \left. \right] \\
&+ 8\kappa(n + \gamma_\kappa)^2(7n^2 + 14n\gamma_\kappa + 4\gamma_\kappa^2 + 5) + \frac{n!\Gamma(n + 2\gamma_\kappa + 1)N_{n\kappa}}{(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1)(N_{n\kappa} - \kappa)^2\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)} \\
&\times \sum_{k=0}^n \sum_{p=0}^n \frac{(-)^{k+p}}{k!p!} \frac{\Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + k + 3)\Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + p + 2) \left[ 2(N_{n\kappa} - \kappa) + (n - p)(\kappa + \kappa') \right]}{\Gamma(n - k + 1)\Gamma(k + 2\gamma_\kappa + 1)\Gamma(n - p + 1)\Gamma(p + 2\gamma_\kappa + 1)} \\
&\times \left[ (N_{n\kappa} + \kappa') \left[ (n - k) + \epsilon_{n\kappa}(\kappa - N_{n\kappa}) \right] - (n - k - 3) \left[ (\kappa - N_{n\kappa}) + \epsilon_{n\kappa}(n - k) \right] \right] \\
&\times {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k - 2, \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2, 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix} ; 1 \right) \left. \right\}. \tag{5.92}
\end{aligned}$$

Dla zupełności rozważań, przypomnijmy otrzymany wynik dla indukowanego elektrycznego momentu kwadrupolowego

$$\mathcal{Q}^{(1)} = \mathcal{Q}_\kappa^{(1)} + \mathcal{Q}_{-\kappa+1}^{(1)} + \mathcal{Q}_{-\kappa-1}^{(1)}, \tag{5.93}$$

gdzie  $\mathcal{Q}_\kappa^{(1)}$  wynosi

$$\begin{aligned}
\mathcal{Q}_\kappa^{(1)} &= \frac{\alpha^3 a_0^4}{Z^2} (4\pi\epsilon_0) c\mathcal{B}\mu \frac{\kappa^2(4\kappa^2 - 12\mu^2 - 1)}{2(4\kappa^2 - 1)^2} \\
&\times \left\{ N_{n\kappa}^2(5n^2 + 10n\gamma_\kappa + 4\gamma_\kappa^2 + 1) - \kappa(n + \gamma_\kappa)[2\kappa(n + \gamma_\kappa) + 3N_{n\kappa}] \right\}, \tag{5.94}
\end{aligned}$$

zaś suma  $\mathcal{Q}_{-\kappa+1}^{(1)} + \mathcal{Q}_{-\kappa-1}^{(1)}$  jest dana wyrażeniem (5.92).

Autorce rozprawy nie są znane prace, w których ta wielkość została by wyznaczona dla całego dyskretnego spektrum energetycznego atomu. Celem zweryfikowania poprawności uzyskanego wyniku, zapiszmy jego postać dla stanu podstawowego. Liczby kwantowe opisujące ten konkretny przypadek przyjmują wartości:  $n = 0$ ,  $\kappa = -1$ ,  $\mu = \pm 1/2$  oraz  $N_{0,-1} = 1$ . Wobec tego mamy

$$\mathcal{Q}_{-1,g}^{(1)} = 0 \tag{5.95}$$

oraz

$$\begin{aligned}
\mathcal{Q}_{2,g}^{(1)} &= \text{sgn}(\mu) \frac{\alpha a_0^4}{Z^4} (4\pi\epsilon_0) c\mathcal{B} \frac{\Gamma(2\gamma_1 + 5)}{360\Gamma(2\gamma_1 + 1)} \left\{ 1 - \frac{6(\gamma_1 + 1)\Gamma(\gamma_1 + \gamma_2 + 2)\Gamma(\gamma_1 + \gamma_2 + 3)}{(\gamma_2 - \gamma_1 + 1)\Gamma(2\gamma_1 + 5)\Gamma(2\gamma_2 + 1)} \right. \\
&\times {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_2 - \gamma_1 - 2, \gamma_2 - \gamma_1 - 1, \gamma_2 - \gamma_1 + 1 \\ \gamma_2 - \gamma_1 + 2, 2\gamma_2 + 1 \end{matrix} ; 1 \right) \left. \right\}, \tag{5.96}
\end{aligned}$$

przy czym indeks dolny  $g$  oznacza, iż mamy do czynienia ze stanem postawowym. Jeżeli w funkcji  ${}_3F_2$  obecnej w powyższym wzorze obniżymy trzeci górny i pierwszy dolny parametr, czyli zastosujemy do niej relację (E.11), wówczas równanie (5.96) przyjmie postać

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_{2,g}^{(1)} &= \text{sgn}(\mu) \frac{\alpha a_0^4}{Z^4} (4\pi\epsilon_0) c \mathcal{B} \frac{\Gamma(2\gamma_1 + 5)}{720\Gamma(2\gamma_1)} \left\{ -1 + \frac{(\gamma_1 + 1)(\gamma_1 + \gamma_2)\Gamma(\gamma_1 + \gamma_2 + 2)\Gamma(\gamma_1 + \gamma_2 + 3)}{\gamma_1\Gamma(2\gamma_1 + 5)\Gamma(2\gamma_2 + 1)} \right. \\ &\quad \left. \times {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_2 - \gamma_1 - 2, \gamma_2 - \gamma_1 - 1, \gamma_2 - \gamma_1 \\ \gamma_2 - \gamma_1 + 1, 2\gamma_2 + 1 \end{matrix} ; 1 \right) \right\}, \end{aligned} \quad (5.97)$$

a w konsekwencji

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_g^{(1)} &= \mathcal{Q}_{-1,g}^{(1)} + \mathcal{Q}_{2,g}^{(1)} = \text{sgn}(\mu) \frac{\alpha^2 e a_0^2}{Z^4} \frac{\mathcal{B}}{B_0} \frac{\Gamma(2\gamma_1 + 5)}{1440\Gamma(2\gamma_1)} \left\{ -1 + \frac{\Gamma(\gamma_1 + \gamma_2 + 2)\Gamma(\gamma_1 + \gamma_2 + 3)}{\Gamma(2\gamma_1 + 5)\Gamma(2\gamma_2 + 1)} \right. \\ &\quad \left. \times \frac{(\gamma_1 + 1)(\gamma_1 + \gamma_2)}{\gamma_1} {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_2 - \gamma_1 - 2, \gamma_2 - \gamma_1 - 1, \gamma_2 - \gamma_1 \\ \gamma_2 - \gamma_1 + 1, 2\gamma_2 + 1 \end{matrix} ; 1 \right) \right\}, \end{aligned} \quad (5.98)$$

gdzie

$$B_0 = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\mu_B}{a_0^3} = \frac{\alpha^2 \hbar}{2e a_0^2} \simeq 6.26 \text{ T} \quad (5.99)$$

jest atomową jednostką indukcji magnetycznej,  $\mu_0$  to przenikalność magnetyczna próżni, zaś  $\mu_B$  to magneton Bohra. Wynik (5.98), *liniowy* względem  $\mathcal{B}$ , jest identyczny z rezultatem uzyskanym w pracy [38]; w granicy nierelatywistycznej (kiedy  $\gamma_\kappa \rightarrow |\kappa|$ ) zbiega on do zera. Potwierdza to wyniki wcześniejszych obliczeń [35–37] tej wielkości dla atomu jednoelektronowego w stanie podstawowym, przeprowadzonych na gruncie teorii *nierelatywistycznej*, w których czynnikiem wiodącym w rozwinięciu zależności  $\mathcal{Q}^{(1)}(\mathcal{B})$  był człon *kwadratowy* względem pola.

#### 5.4 Podatność krzyżowa $\alpha_{M1 \rightarrow E2}$

Miarą wielkości momentów elektrycznych (lub magnetycznych) indukowanych w układzie przez zewnętrzne pole magnetyczne (lub elektryczne) mogą być odpowiednie podatności: polaryzowalność ( $\alpha_{E\lambda \rightarrow EL}$ ), magnetyzowalność ( $\alpha_{M\lambda \rightarrow ML}$ ) lub tzw. podatności krzyżowe ( $\alpha_{E\lambda \rightarrow ML}$  oraz  $\alpha_{M\lambda \rightarrow EL}$ ). W ogólności definiuje się je jako współczynniki proporcjonalności pomiędzy indukowanym momentem elektromagnetycznym a natężeniem pola, które go wyindukowało. Wyrażenie na indukowany elektryczny moment kwadrupolowy atomu z elektronem Diraca, znajdujący się w dowolnym stanie energetycznym, będący przedmiotem rozważań w niniejszym rozdziale, zapiszemy więc w postaci

$$\mathcal{Q}^{(1)} = (4\pi\epsilon_0) c \alpha_{M1 \rightarrow E2} \mathcal{B}. \quad (5.100)$$

Występujący w powyższym wzorze współczynnik liczbowy  $\alpha_{M1 \rightarrow E2}$  określa wspomnianą podatność krzyżową typu *magnetyczny dipol*  $\rightarrow$  *elektryczny kwadrupol* relatywistycznego atomu wodoropodobnego i wynosi

$$\begin{aligned}
\alpha_{M1 \rightarrow E2} &= \frac{\alpha a_0^4 \mu}{Z^4} \frac{1}{2} \left[ N_{n\kappa}^2 (5n^2 + 10n\gamma_\kappa + 4\gamma_\kappa^2 + 1) - \kappa(n + \gamma_\kappa)(2\kappa(n + \gamma_\kappa) + 3N_{n\kappa}) \right] \\
&\times \frac{\kappa^2(\kappa^2 - \gamma_\kappa^2)(4\kappa^2 - 12\mu^2 - 1)}{(4\kappa^2 - 1)^2} + \frac{3}{32} \frac{N_{n\kappa}^2(N_{n\kappa} - \kappa)}{4\kappa^2 - 1} \sum_{\kappa'} \frac{1}{N_{n\kappa} + \kappa'} \\
&\times \left[ \frac{(2\kappa - 1)^2 - 4\mu^2}{(2\kappa - 1)(2\kappa - 3)} \delta_{\kappa', -\kappa+1} - \frac{(2\kappa + 1)^2 - 4\mu^2}{(2\kappa + 1)(2\kappa + 3)} \delta_{\kappa', -\kappa-1} \right] \\
&\times \left\{ 2N_{n\kappa} \left[ 10(n + \gamma_\kappa)(7n^2 + 14n\gamma_\kappa + 4\gamma_\kappa^2 + 5) + (n + \gamma_\kappa)^2(51\gamma_\kappa^2 + 20) \right. \right. \\
&\left. \left. + n(n + 2\gamma_\kappa)(63n^2 + 126n\gamma_\kappa + 33\gamma_\kappa^2 + 85) - 27\gamma_\kappa^4 + 70\gamma_\kappa^2 + 12 \right] \right. \\
&\left. + 8\kappa(n + \gamma_\kappa)^2(7n^2 + 14n\gamma_\kappa + 4\gamma_\kappa^2 + 5) + \frac{n!\Gamma(n + 2\gamma_\kappa + 1)N_{n\kappa}}{(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1)(N_{n\kappa} - \kappa)^2\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)} \right. \\
&\times \frac{\sum_{k=0}^n \sum_{p=0}^n \frac{(-)^{k+p}}{k!p!} \Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + k + 3)\Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + p + 2) \left[ 2(N_{n\kappa} - \kappa) + (n - p)(\kappa + \kappa') \right]}{\Gamma(n - k + 1)\Gamma(k + 2\gamma_\kappa + 1)\Gamma(n - p + 1)\Gamma(p + 2\gamma_\kappa + 1)} \\
&\times \left[ (N_{n\kappa} + \kappa')[(n - k) + \epsilon_{n\kappa}(\kappa - N_{n\kappa})] - (n - k - 3)[(\kappa - N_{n\kappa}) + \epsilon_{n\kappa}(n - k)] \right] \\
&\times {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k - 2, \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2, 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix} ; 1 \right) \left. \right\}. \tag{5.101}
\end{aligned}$$

Powyższy wzór stanowić będzie podstawę obliczeń numerycznych, których wyniki zostały przedstawione w rozdziale 7.

## 6 Ekranowanie magnetyczne jądra atomu

### 6.1 Wprowadzenie

Rozważmy ponownie relatywistyczny atom jednoelektronowy umieszczony w słabym, jednorodnym polu magnetycznym  $\mathbf{B}$  jako przykład układu fizycznego, w którym występują stałe prądy elektryczne, scharakteryzowane funkcją gęstości prądu  $\mathbf{j}(\mathbf{r}')$ , daną wzorem (2.47). Pole magnetyczne wytwarzane przez te prądy w punkcie  $\mathbf{r}$ , zgodnie z prawem prawa Biota-Savarta, dane jest wyrażeniem

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}' \mathbf{j}(\mathbf{r}') \times \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3}. \quad (6.1)$$

Jeżeli początek układu współrzędnych umieścimy tradycyjnie w centrum omawianego systemu, będziemy mogli zapisać, iż dla  $\mathbf{r} = 0$ , czyli w miejscu, w którym znajduje się jądro atomowe, pole magnetyczne wynosi

$$\mathbf{B}(\mathbf{0}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}' \frac{\mathbf{r}' \times \mathbf{j}(\mathbf{r}')}{(r')^3}. \quad (6.2)$$

Do opisu wpływu zewnętrznego pola  $\mathbf{B}$  na indukowanie się zmian pola magnetycznego w tym miejscu zastosujemy formalizm rachunku zaburzeń, przy czym ograniczymy się do wyrazów pierwszego rzędu względem modułu zaburzającego pola. Uwzględniając w równaniu (6.2) wzory (2.49), (2.51) oraz (2.53), otrzymamy zależność

$$\mathbf{B}(\mathbf{0}) \simeq \mathbf{B}^{(0)}(\mathbf{0}) + \mathbf{B}^{(1)}(\mathbf{0}), \quad (6.3)$$

gdzie

$$\mathbf{B}^{(0)}(\mathbf{0}) = -ec \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}' \frac{\Psi^{(0)\dagger}(\mathbf{r}')(\mathbf{r}' \times \boldsymbol{\alpha})\Psi^{(0)}(\mathbf{r}')}{(r')^3} \quad (6.4)$$

to wartość pola magnetycznego w punkcie jądra atomu izolowanego, natomiast

$$\mathbf{B}^{(1)}(\mathbf{0}) = -2ec \frac{\mu_0}{4\pi} \operatorname{Re} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}' \frac{\Psi^{(0)\dagger}(\mathbf{r}')(\mathbf{r}' \times \boldsymbol{\alpha})\Psi^{(1)}(\mathbf{r}')}{(r')^3} \quad (6.5)$$

oznacza indukowaną zmianę pola magnetycznego tamże pod wpływem zaburzenia.

W celu wyznaczenia składowych kartezjańskich wektora  $\mathbf{B}^{(0)}(\mathbf{0})$ , równanie (6.4) przemnożymy skalarnie przez wersor  $\mathbf{n}_\alpha$ , przy czym  $\alpha \in \{x, y, z\}$ . Zapiszmy tę operację w następujący sposób:

$$\mathbf{n}_\alpha \cdot \mathbf{B}^{(0)}(\mathbf{0}) = -ec \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}' (r')^{-2} \Psi^{(0)\dagger}(\mathbf{r}') \mathbf{n}_\alpha \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\alpha}) \Psi^{(0)}(\mathbf{r}'). \quad (6.6)$$

Uwzględniamy następnie postać funkcji falowej (2.15), po czym całkę występującą po prawej stronie w powyższym równaniu zapiszemy we współrzędnych sferycznych, tj.:

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_\alpha \cdot \mathbf{B}^{(0)}(\mathbf{0}) &= -iec \frac{\mu_0}{4\pi} \int_0^\infty dr' (r')^{-2} P_{n\kappa}^{(0)}(r') Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \\ &\times \int_{4\pi} d^2\mathbf{n}'_r \left[ \Omega_{\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}'_r) \mathbf{n}_\alpha \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa\mu}(\mathbf{n}'_r) - \Omega_{-\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}'_r) \mathbf{n}_\alpha \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu}(\mathbf{n}'_r) \right]. \end{aligned} \quad (6.7)$$

W następnym kroku korzystamy kolejno z relacji (A.12)–(A.14) oraz (A.37)–(A.38), po czym wykonujemy całkowanie po pełnym kącie bryłowym, uwzględniając przy tym relację ortonormalności spinorów sferycznych (A.34). Rezultatem wykonania tych rachunków jest poniższy układ równań:

$$B_x^{(0)} = \mathbf{n}_x \cdot \mathbf{B}^{(0)}(\mathbf{0}) = 0, \quad (6.8)$$

$$B_y^{(0)} = \mathbf{n}_y \cdot \mathbf{B}^{(0)}(\mathbf{0}) = 0, \quad (6.9)$$

$$B_z^{(0)} = \mathbf{n}_z \cdot \mathbf{B}^{(0)}(\mathbf{0}) = -ec \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{8\kappa\mu}{4\kappa^2 - 1} \int_0^\infty dr' (r')^{-2} P_{n\kappa}^{(0)}(r') Q_{n\kappa}^{(0)}(r'). \quad (6.10)$$

Wartość całki radialnej<sup>12</sup> obecnej w powyższym wyrażeniu została wyprowadzona w załączniku C. A zatem, na mocy równości wzorów (C.19) i (C.28) oraz w oparciu o układ równań (6.8)–(6.10), możemy napisać, iż pole magnetyczne w miejscu jądra izolowanego atomu jednoelektronowego wynosi:

$$\mathbf{B}^{(0)}(\mathbf{0}) = \frac{16\kappa\mu}{4\kappa^2 - 1} \frac{N_{n\kappa} - 2\kappa(n + \gamma_\kappa)}{\gamma_\kappa(4\gamma_\kappa^2 - 1)} \frac{Z^3}{N_{n\kappa}^4} B_0 \mathbf{n}_z, \quad (6.11)$$

gdzie  $B_0$  to atomowa jednostka indukcji magnetycznej zdefiniowana wzorem (5.99).

Zbadamy teraz, w jaki sposób zewnętrzne jednorodne zaburzenie  $\mathbf{B}$  wpływa na zmianę pola magnetycznego w punkcie jądra. Innymi słowy, postaramy się określić, w których kierunkach wyindukuje się dodatkowe pole magnetyczne i jakie będą wartości poszczególnych jego składowych. Aby tego dokonać, w pierwszej kolejności do wzoru (6.5) wstawiamy wyrażenie na zaburzoną funkcję falową (2.32), wskutek czego dostajemy

$$\mathbf{B}^{(1)}(\mathbf{0}) = e^2 c^2 \frac{\mu_0}{4\pi} \operatorname{Re} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}' r^{-3} \Psi^{(0)\dagger}(\mathbf{r})(\mathbf{r} \times \boldsymbol{\alpha}) \bar{G}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{B} \cdot (\mathbf{r}' \times \boldsymbol{\alpha}) \Psi^{(0)}(\mathbf{r}'), \quad (6.12)$$

lub równoważnie

$$\mathbf{B}^{(1)}(\mathbf{0}) = \left[ \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \operatorname{Re} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}' \Psi^{(0)\dagger}(\mathbf{r})(\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\alpha}) r^{-2} \bar{G}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') r' (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\alpha}) \Psi^{(0)}(\mathbf{r}') \right] \cdot \mathbf{B}, \quad (6.13)$$

przy czym skorzystano tutaj z zależności  $\mu_0 \epsilon_0 c^2 = 1$ . Warto w tym miejscu przypomnieć założenie, poczynione już w rozdziale 2 rozprawy, którego zakres obowiązywania dotyczy jednak całej pracy. Mianowicie, przyjmujemy, iż zewnętrzne pole magnetyczne jest skierowane wzdłuż osi  $z$  kartezjańskiego układu współrzędnych, tj.  $\mathbf{B} = B_z \mathbf{n}_z$ . W związku z tym rozpiszmy iloczyn skalarny z równania (6.13) w następujący sposób:

$$\mathbf{B}^{(1)}(\mathbf{0}) = -\mathbf{n}_x \sigma_{xz} B_z - \mathbf{n}_y \sigma_{yz} B_z - \mathbf{n}_z \sigma_{zz} B_z. \quad (6.14)$$

Pojawiające się tutaj współczynniki liczbowe  $\sigma_{xz}$ ,  $\sigma_{yz}$  i  $\sigma_{zz}$  określają składowe pola magnetycznego indukowanego przez pole zaburzące  $\mathbf{B} = B_z \mathbf{n}_z$  odpowiednio w kierunkach osi  $x$ ,  $y$  oraz  $z$ . Na mocy równości wzorów (6.13) i (6.14) możemy zapisać, iż wynoszą one

$$\sigma_{xz} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \operatorname{Re} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}' \left[ \mathbf{n}_x \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\alpha}) \Psi^{(0)}(\mathbf{r}) \right]^\dagger r^{-2} \bar{G}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') r' \left[ \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\alpha}) \Psi^{(0)}(\mathbf{r}') \right], \quad (6.15)$$

$$\sigma_{yz} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \operatorname{Re} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}' \left[ \mathbf{n}_y \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\alpha}) \Psi^{(0)}(\mathbf{r}) \right]^\dagger r^{-2} \bar{G}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') r' \left[ \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\alpha}) \Psi^{(0)}(\mathbf{r}') \right], \quad (6.16)$$

$$\sigma_{zz} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \operatorname{Re} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r}' \left[ \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\alpha}) \Psi^{(0)}(\mathbf{r}) \right]^\dagger r^{-2} \bar{G}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') r' \left[ \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\alpha}) \Psi^{(0)}(\mathbf{r}') \right]. \quad (6.17)$$

<sup>12</sup>Uwzględniając jawne postacie radialnych funkcji Diraca–Coulomba (2.17)–(2.18), stwierdzamy, iż dla stanów o symetrii  $|\kappa| = 1$  całka ta będzie zbieżna, jeśli spełniona będzie nierówność  $\gamma_1 > \frac{1}{2}$ . Warunek ten automatycznie implikuje ograniczenie na liczbę atomową w postaci:  $Z < \alpha^{-1} \frac{\sqrt{3}}{2} \simeq 118.67$ .

Ponieważ prawa strona ostatniej równości reprezentuje element diagonalny macierzy operatora hermitowskiego, bez żadnych konsekwencji można tam pominąć symbol Re.

Jeżeli w wyrażeniach (6.15)–(6.17) uwzględnimy postać funkcji falowej (2.15) oraz wstawimy do nich rozwinięcie multipolowe uogólnionej funkcji Greena–Diraca–Coulomba (3.40), a następnie wszystkie całki zapiszemy we współrzędnych sferycznych, otrzymamy wówczas następujący zestaw wzorów:

$$\begin{aligned}
\sigma_{xz} = & -\text{Re} \sum_{\substack{\kappa'=-\infty \\ (\kappa' \neq 0)}}^{\infty} \sum_{m=-|\kappa'|+\frac{1}{2}}^{|\kappa'|-\frac{1}{2}} \int_0^{\infty} dr \int_0^{\infty} dr' r^{-2} r' \\
& \times \left[ Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \bar{g}_{(++)\kappa'}^{(0)}(r, r') Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \langle \mathbf{n}_x \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa\mu} | \Omega_{\kappa'm} \rangle \langle \Omega_{\kappa'm} | \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa\mu} \rangle \right. \\
& - P_{n\kappa}^{(0)}(r) \bar{g}_{(-+)\kappa'}^{(0)}(r, r') Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \langle \mathbf{n}_x \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu} | \Omega_{-\kappa'm} \rangle \langle \Omega_{\kappa'm} | \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa\mu} \rangle \\
& - Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \bar{g}_{(+-)\kappa'}^{(0)}(r, r') P_{n\kappa}^{(0)}(r') \langle \mathbf{n}_x \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa\mu} | \Omega_{\kappa'm} \rangle \langle \Omega_{-\kappa'm} | \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu} \rangle \\
& \left. + P_{n\kappa}^{(0)}(r) \bar{g}_{(--)\kappa'}^{(0)}(r, r') P_{n\kappa}^{(0)}(r') \langle \mathbf{n}_x \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu} | \Omega_{-\kappa'm} \rangle \langle \Omega_{-\kappa'm} | \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu} \rangle \right], \tag{6.18}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{yz} = & -\text{Re} \sum_{\substack{\kappa'=-\infty \\ (\kappa' \neq 0)}}^{\infty} \sum_{m=-|\kappa'|+\frac{1}{2}}^{|\kappa'|-\frac{1}{2}} \int_0^{\infty} dr \int_0^{\infty} dr' r^{-2} r' \\
& \times \left[ Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \bar{g}_{(++)\kappa'}^{(0)}(r, r') Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \langle \mathbf{n}_y \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa\mu} | \Omega_{\kappa'm} \rangle \langle \Omega_{\kappa'm} | \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa\mu} \rangle \right. \\
& - P_{n\kappa}^{(0)}(r) \bar{g}_{(-+)\kappa'}^{(0)}(r, r') Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \langle \mathbf{n}_y \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu} | \Omega_{-\kappa'm} \rangle \langle \Omega_{\kappa'm} | \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa\mu} \rangle \\
& - Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \bar{g}_{(+-)\kappa'}^{(0)}(r, r') P_{n\kappa}^{(0)}(r') \langle \mathbf{n}_y \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa\mu} | \Omega_{\kappa'm} \rangle \langle \Omega_{-\kappa'm} | \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu} \rangle \\
& \left. + P_{n\kappa}^{(0)}(r) \bar{g}_{(--)\kappa'}^{(0)}(r, r') P_{n\kappa}^{(0)}(r') \langle \mathbf{n}_y \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu} | \Omega_{-\kappa'm} \rangle \langle \Omega_{-\kappa'm} | \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu} \rangle \right], \tag{6.19}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{zz} = & - \sum_{\substack{\kappa'=-\infty \\ (\kappa' \neq 0)}}^{\infty} \sum_{m=-|\kappa'|+\frac{1}{2}}^{|\kappa'|-\frac{1}{2}} \int_0^{\infty} dr \int_0^{\infty} dr' r^{-2} r' \\
& \times \left[ Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \bar{g}_{(++)\kappa'}^{(0)}(r, r') Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \langle \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa\mu} | \Omega_{\kappa'm} \rangle \langle \Omega_{\kappa'm} | \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa\mu} \rangle \right. \\
& - P_{n\kappa}^{(0)}(r) \bar{g}_{(-+)\kappa'}^{(0)}(r, r') Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \langle \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu} | \Omega_{-\kappa'm} \rangle \langle \Omega_{\kappa'm} | \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa\mu} \rangle \\
& - Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \bar{g}_{(+-)\kappa'}^{(0)}(r, r') P_{n\kappa}^{(0)}(r') \langle \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa\mu} | \Omega_{\kappa'm} \rangle \langle \Omega_{-\kappa'm} | \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu} \rangle \\
& \left. + P_{n\kappa}^{(0)}(r) \bar{g}_{(--)\kappa'}^{(0)}(r, r') P_{n\kappa}^{(0)}(r') \langle \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu} | \Omega_{-\kappa'm} \rangle \langle \Omega_{-\kappa'm} | \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}'_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu} \rangle \right]. \tag{6.20}
\end{aligned}$$

Obecne powyżej całki kątowe pojawiły się już przy rozpatrywaniu podatności magnetycznej atomu (patrz str. 28). Powtarzamy zatem rozumowanie przeprowadzone w rozdziale 4, czyli stosujemy po kolei relacje (A.12)–(A.14) oraz (A.37)–(A.38), a następnie wykonujemy całkowania po

zmiennych kątowych. Uwzględniając przy ostatniej z wymienionych operacji wzór (A.34), wykonując następnie sumowania po  $m$ , dochodzimy do następujących rezultatów:

$$\sigma_{xz} = 0, \quad (6.21)$$

$$\sigma_{yz} = 0, \quad (6.22)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{zz} \equiv \sigma = & - \sum_{\kappa'} \int_0^\infty dr \int_0^\infty dr' \left( \begin{array}{cc} Q_{n\kappa}^{(0)}(r) & P_{n\kappa}^{(0)}(r) \end{array} \right) r^{-2} \bar{G}_{\kappa'}^{(0)}(r, r') r' \left( \begin{array}{c} Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \\ P_{n\kappa}^{(0)}(r') \end{array} \right) \\ & \times \left[ \frac{16\kappa^2\mu^2}{(4\kappa^2 - 1)^2} \delta_{\kappa', \kappa} + \frac{\left(\kappa + \frac{1}{2}\right)^2 - \mu^2}{(2\kappa + 1)^2} \delta_{\kappa', -\kappa-1} + \frac{\left(\kappa - \frac{1}{2}\right)^2 - \mu^2}{(2\kappa - 1)^2} \delta_{\kappa', -\kappa+1} \right], \end{aligned} \quad (6.23)$$

przy czym w równaniu (6.23)  $\bar{G}_{\kappa'}^{(0)}(r, r')$  oznacza uogólnioną radialną funkcję Greena (3.41).

Analizując otrzymany układ równań (6.21)–(6.23) pod kątem własności fizycznych układu, biorąc pod uwagę również wzór (6.14), wnioskujemy, iż w miejscu położenia jądra jednoelektronowego atomu Diraca poddanego działaniu jednorodnego pola zaburzającego  $\mathcal{B}$ , powstanie dodatkowe pole magnetyczne, o kierunku zgodnym kierunkiem przyłożonego pola, lecz o przeciwnym zwrocie:

$$\mathbf{B}^{(1)}(\mathbf{0}) = -\sigma \mathcal{B}. \quad (6.24)$$

Występujący w powyższej zależności współczynnik proporcjonalności  $\sigma$  to tzw. *stała ekranowania magnetycznego* jądra atomowego. Jej definicję stanowi wzór (6.17), a jako punkt wyjścia w dalszych obliczeniach tej wielkości, przeprowadzonych w kolejnym podrozdziale, obierzemy równanie (6.23).

## 6.2 Stała ekranowania magnetycznego

Przejdziemy teraz do ilościowego wyznaczenia stałej ekranowania magnetycznego jednoelektronowego atomu Diraca, znajdującego się w dowolnym dyskretnym stanie energetycznym. W pierwszej kolejności, wyrażenie (6.23) przepiszmy w postaci sumy trzech składników

$$\sigma = \sigma_\kappa + \sigma_{-\kappa+1} + \sigma_{-\kappa-1}, \quad (6.25)$$

przy czym pierwszy z nich wynosi

$$\sigma_\kappa = - \frac{16\kappa^2\mu^2}{(4\kappa^2 - 1)^2} \int_0^\infty dr \int_0^\infty dr' \left( \begin{array}{cc} Q_{n\kappa}^{(0)}(r) & P_{n\kappa}^{(0)}(r) \end{array} \right) r^{-2} \bar{G}_\kappa^{(0)}(r, r') r' \left( \begin{array}{c} Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \\ P_{n\kappa}^{(0)}(r') \end{array} \right), \quad (6.26)$$

zaś suma dwóch pozostałych dana jest poniższym wyrażeniem:

$$\begin{aligned} \sigma_{-\kappa+1} + \sigma_{-\kappa-1} = & - \sum_{\kappa'} \int_0^\infty dr \int_0^\infty dr' \left( \begin{array}{cc} Q_{n\kappa}^{(0)}(r) & P_{n\kappa}^{(0)}(r) \end{array} \right) r^{-2} \bar{G}_{\kappa'}^{(0)}(r, r') r' \left( \begin{array}{c} Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \\ P_{n\kappa}^{(0)}(r') \end{array} \right) \\ & \times \left[ \frac{(2\kappa - 1)^2 - 4\mu^2}{4(2\kappa - 1)^2} \delta_{\kappa', -\kappa+1} + \frac{(2\kappa + 1)^2 - 4\mu^2}{4(2\kappa + 1)^2} \delta_{\kappa', -\kappa-1} \right]. \end{aligned} \quad (6.27)$$

Jako pierwszy wyznaczmy składnik  $\sigma_\kappa$ . Na podstawie (6.26) możemy zapisać go w następującej postaci:

$$\sigma_\kappa = - \frac{16\kappa^2\mu^2}{(4\kappa^2 - 1)^2} I_{\kappa\sigma}, \quad (6.28)$$



gdzie

$$I_{\kappa\sigma} = \int_0^\infty dr \int_0^\infty dr' \begin{pmatrix} Q_{n\kappa}^{(0)}(r) & P_{n\kappa}^{(0)}(r) \end{pmatrix} r^{-2} \bar{G}_\kappa^{(0)}(r, r') r' \begin{pmatrix} Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \\ P_{n\kappa}^{(0)}(r') \end{pmatrix}. \quad (6.29)$$

Wstawienie do powyższego wzoru rozwinięcia sturmowskiego uogólnionej radialnej funkcji Greena (3.43) sugeruje zapisanie całki  $I_{\kappa\sigma}$  w postaci sumy czterech składników:

$$I_{\kappa\sigma} = \tilde{I}_{\kappa\sigma}^{(\infty)} + \tilde{I}_\kappa^{(a)}(-2, 1) + \tilde{I}_\kappa^{(b)}(-2, 1) + \tilde{I}_\kappa^{(c)}(-2, 1), \quad (6.30)$$

w której

$$\begin{aligned} \tilde{I}_{\kappa\sigma}^{(\infty)} &= \sum_{\substack{n'=-\infty \\ (n' \neq n)}}^\infty \frac{1}{\mu_{n'\kappa}^{(0)} - 1} \int_0^\infty dr r^{-2} \left( Q_{n\kappa}^{(0)}(r) S_{n'\kappa}^{(0)}(2\lambda r) + P_{n\kappa}^{(0)}(r) T_{n'\kappa}^{(0)}(2\lambda r) \right) \\ &\quad \times \int_0^\infty dr' r' \left( \mu_{n'\kappa}^{(0)} Q_{n\kappa}^{(0)}(r') S_{n'\kappa}^{(0)}(2\lambda r') + P_{n\kappa}^{(0)}(r') T_{n'\kappa}^{(0)}(2\lambda r') \right), \end{aligned} \quad (6.31)$$

zaś  $\tilde{I}_\kappa^{(a)}(-2, 1)$ ,  $\tilde{I}_\kappa^{(b)}(-2, 1)$  oraz  $\tilde{I}_\kappa^{(c)}(-2, 1)$  to całki radialne określone za pomocą wzorów (C.29)–(C.31). Analiza tego typu całek, przeprowadzona szczegółowo w załączniku C, a zwłaszcza wzór (C.39), pozwala nam zapisać, iż

$$\tilde{I}_\kappa^{(a)}(-2, 1) + \tilde{I}_\kappa^{(c)}(-2, 1) = 0. \quad (6.32)$$

Uwzględniając powyższy wniosek w równaniu (6.30), otrzymujemy związek

$$I_{\kappa\sigma} = \tilde{I}_\kappa^{(b)}(-2, 1) + \tilde{I}_{\kappa\sigma}^{(\infty)}, \quad (6.33)$$

z którego wynika, iż wystarczy obliczyć dwa składniki, zamiast czterech. Pierwszy z nich, czyli całkę  $\tilde{I}_\kappa^{(b)}(-2, 1)$  uzyskać można poprzez wstawienie do wzoru (C.40) odpowiednich wartości parametrów  $k$  oraz  $t$ , a mianowicie  $k = -2$  i  $t = 1$ . Postępując w ten sposób, otrzymamy następujące wyrażenie:

$$\tilde{I}_\kappa^{(b)}(-2, 1) = 2\epsilon_{n\kappa} \frac{a_0 N_{n\kappa}^2}{Z^2} \int_0^\infty dr r^{-2} P_{n\kappa}(r) Q_{n\kappa}(r) \int_0^\infty dr' r' P_{n\kappa}(r') Q_{n\kappa}(r'). \quad (6.34)$$

Obie całki radialne występujące po prawej stronie znaku równości w powyższym wzorze zostały wyznaczone w załączniku C. Wykorzystując zatem wzory (C.18)–(C.19), (C.26) oraz (C.28), uwzględniając dodatkowo relację (2.20), dostajemy:

$$\tilde{I}_\kappa^{(b)}(-2, 1) = \frac{\alpha^2 Z}{N_{n\kappa}^4} \frac{(n + \gamma_\kappa) [2\kappa(n + \gamma_\kappa) - N_{n\kappa}]^2}{2\gamma_\kappa(4\gamma_\kappa^2 - 1)}. \quad (6.35)$$

Zajmiemy się teraz wyznaczeniem drugiego ze składników we wzorze (6.33), czyli  $\tilde{I}_{\kappa\sigma}^{(\infty)}$ . Proces ten będzie wymagał przeprowadzenia znacznie większej ilości rachunków, toteż podzielimy go na kilka etapów. W pierwszej kolejności przepiszymy definicję (6.31) w postaci

$$\tilde{I}_{\kappa\sigma}^{(\infty)} = \sum_{\substack{n'=-\infty \\ (n' \neq n)}}^\infty \frac{\mathcal{J}_1(1, \mu_{n'\kappa}^{(0)}) \mathcal{J}_1(-2, 1)}{\mu_{n'\kappa}^{(0)} - 1}, \quad (6.36)$$

przy czym  $\mathcal{J}_1(1, \mu_{n'\kappa}^{(0)})$  oraz  $\mathcal{J}_1(-2, 1)$  to całki zdefiniowane zależnością (C.10). Wykorzystując w niej postacie funkcji radialnych (2.17) i (2.18) oraz radialnych sturmianów (3.48)–(3.49) (przy uwzględnieniu w nich warunku  $\kappa' = \kappa$ ), dokonując następnie standardowej transformacji zmiennej całkowania  $x = 2\lambda r$ , możemy zapisać, że

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_1(-2, 1) &= 4A_1 \lambda \sqrt{\frac{\alpha Z}{N_{n\kappa}}} \int_0^\infty dx x^{2\gamma_\kappa - 2} e^{-x} \\ &\quad \times \left[ L_{n-1}^{(2\gamma_\kappa)}(x) L_{|n'|-1}^{(2\gamma_\kappa)}(x) - \frac{(\kappa - N_{n\kappa})(\kappa - N_{n'\kappa})}{(n + 2\gamma_\kappa)(|n'| + 2\gamma_\kappa)} L_n^{(2\gamma_\kappa)}(x) L_{|n'|}^{(2\gamma_\kappa)}(x) \right], \end{aligned} \quad (6.37)$$

gdzie  $A_1$  jest dane poprzez (C.15), natomiast całkę  $\mathcal{J}_1(1, \mu_{n'\kappa}^{(0)})$  opisuje wzór (C.14). Wstawiamy zatem (6.37) i (C.14) do wyrażenia (6.36) i otrzymujemy równanie

$$\begin{aligned}
\tilde{I}_{\kappa\sigma}^{(\infty)} &= \frac{\alpha^2 Z}{N_{n\kappa}} \frac{n + 2\gamma_\kappa}{4(N_{n\kappa} - \kappa)} \sum_{\substack{n'=-\infty \\ (n' \neq n)}}^{\infty} \frac{|n'|!}{N_{n'\kappa}(N_{n'\kappa} - \kappa)\Gamma(|n'| + 2\gamma_\kappa)} \\
&\times \int_0^\infty dx x^{2\gamma_\kappa-2} e^{-x} \left[ L_{n-1}^{(2\gamma_\kappa)}(x) L_{|n'|-1}^{(2\gamma_\kappa)}(x) - \frac{(\kappa - N_{n\kappa})(\kappa - N_{n'\kappa})}{(n + 2\gamma_\kappa)(|n'| + 2\gamma_\kappa)} L_n^{(2\gamma_\kappa)}(x) L_{|n'|}^{(2\gamma_\kappa)}(x) \right] \\
&\times \left\{ -n(n-1)(\kappa - N_{n'\kappa})\delta_{|n'|, n-2} + n \left( (\kappa - N_{n'\kappa})(2n + 2\gamma_\kappa - 1) \right. \right. \\
&+ \left. \left. \frac{\mu_{n'\kappa}^{(0)} + 1}{\mu_{n'\kappa}^{(0)} - 1} [(\kappa - N_{n\kappa})(\kappa - N_{n'\kappa}) - (n-1)(n + 2\gamma_\kappa - 1)] \right) \delta_{|n'|, n-1} + (N_{n\kappa} - \kappa) \right. \\
&\times \left. \left( \frac{\mu_{n'\kappa}^{(0)} + 1}{\mu_{n'\kappa}^{(0)} - 1} [2(n + \gamma_\kappa)(2\kappa + N_{n\kappa} - N_{n'\kappa}) - (N_{n\kappa} + N_{n'\kappa})] + (N_{n\kappa} + \kappa)(N_{n'\kappa} - N_{n\kappa}) \right) \delta_{|n'|, n} \right. \\
&+ (n + 2\gamma_\kappa + 1)(\kappa - N_{n\kappa}) \left( \frac{\mu_{n'\kappa}^{(0)} + 1}{\mu_{n'\kappa}^{(0)} - 1} (2\kappa + N_{n\kappa} - N_{n'\kappa}) - (2n + 2\gamma_\kappa + 1) \right) \delta_{|n'|, n+1} \\
&\left. + (\kappa - N_{n\kappa})(n + 2\gamma_\kappa + 1)(n + 2\gamma_\kappa + 2) \delta_{|n'|, n+2} \right\}, \tag{6.38}
\end{aligned}$$

które warto przepisać w symbolicznej postaci

$$\tilde{I}_{\kappa\sigma}^{(\infty)} = \tilde{I}_{\kappa\sigma}^{(\infty)}[n-2] + \tilde{I}_{\kappa\sigma}^{(\infty)}[n-1] + \tilde{I}_{\kappa\sigma}^{(\infty)}[n] + \tilde{I}_{\kappa\sigma}^{(\infty)}[n+1] + \tilde{I}_{\kappa\sigma}^{(\infty)}[n+2]. \tag{6.39}$$

Taka forma przedstawienia całki  $\tilde{I}_{\kappa\sigma}^{(\infty)}$  jest konsekwencją występowania pięciu delt Kroneckera we wzorze (6.38). Każda z nich wytnie z nieskończonej sumy jeden wyraz, którego identyfikację umożliwiają symbole zawarte w nawiasach kwadratowych odpowiednich składników wzoru (6.39). We wszystkich otrzymanych w ten sposób wyrażeniach pojawiają się całki typu (D.26), w oparciu o które możemy napisać

$$\begin{aligned}
\tilde{I}_{\kappa\sigma}^{(\infty)}[n-2] &= \frac{\alpha^2 Z}{N_{n\kappa}} \frac{n!(n + 2\gamma_\kappa)}{4(N_{n\kappa} - \kappa)\Gamma(n + 2\gamma_\kappa - 2)} \sum_{\substack{n'=-\infty \\ (n' \neq n)}}^{\infty} \frac{1}{N_{n'\kappa}} \\
&\times \left[ \mathbf{I}(n-1, n-3) - \frac{(\kappa - N_{n\kappa})(\kappa - N_{n'\kappa})}{(n + 2\gamma_\kappa)(n + 2\gamma_\kappa - 2)} \mathbf{I}(n, n-2) \right] \delta_{|n'|, n-2}, \tag{6.40}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{I}_{\kappa\sigma}^{(\infty)}[n-1] &= \frac{\alpha^2 Z}{N_{n\kappa}} \frac{n!(n + 2\gamma_\kappa)}{4(N_{n\kappa} - \kappa)\Gamma(n + 2\gamma_\kappa - 1)} \sum_{\substack{n'=-\infty \\ (n' \neq n)}}^{\infty} \frac{1}{N_{n'\kappa}(N_{n'\kappa} - \kappa)} \\
&\times \left[ \mathbf{I}(n-1, n-2) - \frac{(\kappa - N_{n\kappa})(\kappa - N_{n'\kappa})}{(n + 2\gamma_\kappa)(n + 2\gamma_\kappa - 1)} \mathbf{I}(n, n-1) \right] \\
&\times \left\{ (\kappa - N_{n'\kappa})(2n + 2\gamma_\kappa - 1) + \frac{2n + 2\gamma_\kappa + N_{n'\kappa} + N_{n\kappa} - 1}{N_{n'\kappa} - N_{n\kappa} - 1} \right. \\
&\left. \times [(\kappa - N_{n\kappa})(\kappa - N_{n'\kappa}) - (n-1)(n + 2\gamma_\kappa - 1)] \right\} \delta_{|n'|, n-1}, \tag{6.41}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{I}_{\kappa\sigma}^{(\infty)}[n] &= \frac{\alpha^2 Z}{N_{n\kappa}} \frac{n!(n+2\gamma_\kappa)}{4\Gamma(n+2\gamma_\kappa)} \sum_{\substack{n'=-\infty \\ (n' \neq n)}}^{\infty} \frac{1}{N_{n'\kappa}(N_{n'\kappa}-\kappa)} \\
&\times \left[ \mathbf{I}(n-1, n-1) - \frac{(\kappa - N_{n\kappa})(\kappa - N_{n'\kappa})}{(n+2\gamma_\kappa)^2} \mathbf{I}(n, n) \right] \\
&\times \left\{ (N_{n\kappa} + \kappa)(N_{n'\kappa} - N_{n\kappa}) + \frac{2n+2\gamma_\kappa + N_{n'\kappa} + N_{n\kappa}}{N_{n'\kappa} - N_{n\kappa}} \right. \\
&\quad \left. \times \left[ 2(n+\gamma_\kappa)(2\kappa + N_{n\kappa} - N_{n'\kappa}) - (N_{n\kappa} + N_{n'\kappa}) \right] \right\} \delta_{|n'|,n}, \quad (6.42)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{I}_{\kappa\sigma}^{(\infty)}[n+1] &= \frac{\alpha^2 Z}{N_{n\kappa}} \frac{(n+1)!(n+2\gamma_\kappa+1)}{4\Gamma(n+2\gamma_\kappa)} \sum_{\substack{n'=-\infty \\ (n' \neq n)}}^{\infty} \frac{1}{N_{n'\kappa}(N_{n'\kappa}-\kappa)} \\
&\times \left[ \mathbf{I}(n-1, n) - \frac{(\kappa - N_{n\kappa})(\kappa - N_{n'\kappa})}{(n+2\gamma_\kappa)(n+2\gamma_\kappa+1)} \mathbf{I}(n, n+1) \right] \\
&\times \left\{ (2n+2\gamma_\kappa+1) - (2\kappa + N_{n\kappa} - N_{n'\kappa}) \frac{2n+2\gamma_\kappa + N_{n'\kappa} + N_{n\kappa} + 1}{N_{n'\kappa} - N_{n\kappa} + 1} \right\} \delta_{|n'|,n+1}, \quad (6.43)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{I}_{\kappa\sigma}^{(\infty)}[n+2] &= -\frac{\alpha^2 Z}{N_{n\kappa}} \frac{(n+2)!(n+2\gamma_\kappa+2)}{4\Gamma(n+2\gamma_\kappa)} \sum_{\substack{n'=-\infty \\ (n' \neq n)}}^{\infty} \frac{1}{N_{n'\kappa}(N_{n'\kappa}-\kappa)} \\
&\times \left[ \mathbf{I}(n-1, n+1) - \frac{(\kappa - N_{n\kappa})(\kappa - N_{n'\kappa})}{(n+2\gamma_\kappa)(n+2\gamma_\kappa+2)} \mathbf{I}(n, n+2) \right] \delta_{|n'|,n+2}. \quad (6.44)
\end{aligned}$$

Pojawiający się tutaj symbol  $\mathbf{I}(m, n)$  określa, wspomnianą przed chwilą, nową klasę całek radialnych, zdefiniowanych zależnością (D.26). Uwzględniając w powyższych pięciu wyrażeniach wartości tychże całek, czyli wzory (D.27)–(D.29) wzięte dla odpowiednich wartości parametrów  $n$  i  $m$ , wykorzystując ponadto własności (4.41) i (4.64) pozornej liczby kwantowej, po wielu prostych, acz żmudnych rachunkach, otrzymujemy ostatecznie następujące postacie poszczególnych składników wzoru (6.39):

$$\tilde{I}_{\kappa\sigma}^{(\infty)}[n] = -\frac{\alpha^2 Z}{N_{n\kappa}^4} \frac{n(n+\gamma_\kappa)(n+2\gamma_\kappa)}{\gamma_\kappa(4\gamma_\kappa^2-1)} \left[ N_{n\kappa}^2 + 2(n+\gamma_\kappa)^2 \right], \quad (6.45)$$

$$\tilde{I}_{\kappa\sigma}^{(\infty)}[n \pm 1] = \frac{\alpha^2 Z}{N_{n\kappa}^2} \frac{(N_{n\kappa} \mp \kappa)}{\gamma_\kappa(4\gamma_\kappa^2-1)} \left[ 2\kappa^3 + (N_{n\kappa} \pm 2\kappa)(2n+2\gamma_\kappa \mp 2\kappa^2 \pm 1) \right], \quad (6.46)$$

$$\tilde{I}_{\kappa\sigma}^{(\infty)}[n \pm 2] = -\frac{\alpha^2 Z}{N_{n\kappa}^2} \frac{n(n \pm 1)(2n+6\gamma_\kappa \pm 1)}{4\gamma_\kappa(4\gamma_\kappa^2-1)}. \quad (6.47)$$

W ostatnim etapie obliczeń dla omawianej symetrii  $\kappa' = \kappa$  do wyrażenia (6.33) wstawiamy wzory (6.35) oraz (6.39), uwzględniając jednocześnie zależności (6.45)–(6.47). Wykonanie kilku nieskomplikowanych przekształceń algebraicznych na otrzymanym w ten sposób wyrażeniu doprowadza nas do następującego rezultatu:

$$I_{\kappa\sigma} = -\frac{\alpha^2 Z}{N_{n\kappa}^4} \frac{4\kappa(\kappa^2 - \gamma_\kappa^2)[2\kappa(n+\gamma_\kappa) - N_{n\kappa}] + \gamma_\kappa N_{n\kappa}^2(4\gamma_\kappa^2 - 1)}{2\gamma_\kappa(4\gamma_\kappa^2 - 1)}, \quad (6.48)$$

który po zastosowaniu zależności (2.13) przyjmuje jeszcze prostszą postać, a mianowicie:

$$I_{\kappa\sigma} = -\frac{\alpha^2 Z}{2N_{n\kappa}^2} - \frac{\alpha^4 Z^3}{N_{n\kappa}^4} \frac{2\kappa[2\kappa(n + \gamma_\kappa) - N_{n\kappa}]}{\gamma_\kappa(4\gamma_\kappa^2 - 1)}. \quad (6.49)$$

W związku z powyższym, a także w oparciu o wzór (6.28), możemy zapisać, iż pierwszy składnik stałej ekranowania magnetycznego dla jądra jednoelektronowego atomu Diraca, odpowiadający symetrii  $\kappa' = \kappa$ , wynosi:

$$\sigma_\kappa = \frac{\alpha^2 Z}{N_{n\kappa}^2} \frac{8\kappa^2 \mu^2}{(4\kappa^2 - 1)^2} + \frac{\alpha^4 Z^3}{N_{n\kappa}^4} \frac{32\kappa^3 \mu^2 [2\kappa(n + \gamma_\kappa) - N_{n\kappa}]}{(4\kappa^2 - 1)^2 \gamma_\kappa (4\gamma_\kappa^2 - 1)}. \quad (6.50)$$

Warto zatrzymać się na chwilę w tym miejscu i przeanalizować powyższy rezultat dla przypadku szczególnego, jakim jest stan podstawowy atomu. Uwzględniając w równaniu (6.50) wartości liczb kwantowych odpowiadających temu stanowi, czyli  $\kappa = -1$ ,  $n = 0$ ,  $\mu = \pm 1/2$  oraz  $N_{0,-1} = 1$ , otrzymujemy wyrażenie

$$\sigma_{-1,g} = -\frac{2\alpha^2 Z}{9} \frac{2\gamma_1^2 + \gamma_1 - 4}{\gamma_1(2\gamma_1 - 1)}, \quad (6.51)$$

[indeks dolny  $g$  oznacza, iż mamy do czynienia ze stanem podstawowym] identyczne z wynikiem opublikowanym przez Chenga i jego współpracowników w pracy [47]<sup>13</sup>.

Przejdziemy teraz do jednoczesnego wyznaczenia dwóch pozostałych składników wzoru (6.25). Dokładniej rzecz ujmując, obliczymy ich sumę, która, na podstawie definicji (6.27), wynosi

$$\sigma_{-\kappa+1} + \sigma_{-\kappa-1} = \sum_{\kappa'} \left[ \frac{(2\kappa - 1)^2 - 4\mu^2}{4(2\kappa - 1)^2} \delta_{\kappa', -\kappa+1} + \frac{(2\kappa + 1)^2 - 4\mu^2}{4(2\kappa + 1)^2} \delta_{\kappa', -\kappa-1} \right] I_{\kappa'\sigma}, \quad (6.52)$$

gdzie

$$I_{\kappa'\sigma} = -\int_0^\infty dr \int_0^\infty dr' \begin{pmatrix} Q_{n\kappa}^{(0)}(r) & P_{n\kappa}^{(0)}(r) \end{pmatrix} r^{-2} \bar{G}_{\kappa'}^{(0)}(r, r') r' \begin{pmatrix} Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \\ P_{n\kappa}^{(0)}(r') \end{pmatrix}. \quad (6.53)$$

W pierwszej kolejności do wyrażenia (6.53) wstawiamy rozwinięcie Sturmowskie uogólnionej radialnej funkcji Greena (3.42). Rezultatem tego podstawienia będzie pojawienie się całek radialnych typu (C.5), w oparciu o które możemy zapisać równanie

$$I_{\kappa'\sigma} = -\sum_{n'=-\infty}^{\infty} \frac{\mathcal{I}_1(-2, 1) \mathcal{I}_1(1, \mu_{n'\kappa'}^{(0)})}{\mu_{n'\kappa'}^{(0)} - 1}, \quad (6.54)$$

gdzie  $\mu_{n'\kappa'}^{(0)}$  to wartość własna zagadnienia (3.22)–(3.24), określona wzorem (3.47). W dalszej kolejności będziemy potrzebować jawnych postaci całek występujących w liczniku w powyższym wzorze. Całka  $\mathcal{I}_1(1, \mu_{n'\kappa'}^{(0)})$  pojawiła się już dwukrotnie w niniejszej rozprawie; jej postać określa wzór (4.51). Aby otrzymać podobne wyrażenie dla całki  $\mathcal{I}_1(-2, 1)$ , musimy przyjąć we wzorze (C.7) odpowiednie wartości parametrów  $L$  i  $C$ , a konkretnie  $L = -2$  oraz  $C = 1$ . Czyniąc to, otrzymujemy

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_1(-2, 1) &= 4\lambda A_0 \sqrt{\frac{\alpha Z}{N_{n\kappa}}} \frac{\Gamma(n + 2\gamma_\kappa)}{(|n'| - 1)!(N_{n'\kappa'} + \kappa')} \\ &\times \sum_{k=0}^n \frac{(-)^k}{k!} \frac{\Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + k - 1) \Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k + 1)}{\Gamma(n - k + 1) \Gamma(k + 2\gamma_\kappa + 1) \Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k + 2)} \\ &\times \left[ (n - k)(N_{n'\kappa'} + \kappa') + (\kappa - N_{n\kappa})(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k + 1) \right]. \end{aligned} \quad (6.55)$$

<sup>13</sup>Autorzy pracy [47] przedstawili wyrażenie na stałą ekranowania dla stanu podstawowego atomu w postaci sumy dwóch składników:  $\sigma = \sigma_{-1} + \sigma_{+2}$ , a zatem w niniejszej rozprawie odniesiemy się do obu wyników cząstkowych, zawartych w tej publikacji.

Uwzględniając we wzorze (6.54) wyrażenia (4.51), (6.55) oraz (C.9), dostajemy następującą postać omawianej całki radialnej:

$$\begin{aligned}
I_{\kappa'\sigma} &= -\frac{\alpha^2 Z}{N_{n\kappa}^2} \frac{n! \Gamma(n + 2\gamma_\kappa + 1)}{4(N_{n\kappa} - \kappa)} \sum_{k=0}^n \sum_{p=0}^n \frac{(-)^{k+p}}{k! p!} f_\sigma(k, p) \\
&\times \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k + 1) \Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 2)}{|n'|! \Gamma(|n'| + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \frac{N_{n'\kappa'} - \kappa'}{N_{n'\kappa'}} \\
&\times \left[ (n - k)(N_{n'\kappa'} + \kappa') + (\kappa - N_{n\kappa})(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k + 1) \right] \\
&\times \left\{ \frac{\mu_{n'\kappa'}^{(0)} + 1}{\mu_{n'\kappa'}^{(0)} - 1} \left[ (n - p)(N_{n'\kappa'} + \kappa') + (\kappa - N_{n\kappa})(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 2) \right] \right. \\
&\quad \left. - \left[ (\kappa - N_{n\kappa})(N_{n'\kappa'} + \kappa') + (n - p)(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 2) \right] \right\}. \quad (6.56)
\end{aligned}$$

Podczas wyprowadzania powyższego wzoru wykorzystano własność (4.41) pozornej głównej liczby kwantowej; wprowadzono ponadto tymczasowe oznaczenie

$$\begin{aligned}
f_\sigma(k, p) &= \frac{\Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + k - 1)}{\Gamma(k + 2\gamma_\kappa + 1) \Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k + 2) \Gamma(n - k + 1)} \\
&\times \frac{\Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + p + 2)}{\Gamma(p + 2\gamma_\kappa + 1) \Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 1) \Gamma(n - p + 1)}. \quad (6.57)
\end{aligned}$$

Przepiszmy teraz równanie (6.56) w następującej postaci:

$$I_{\kappa'\sigma} = -\frac{\alpha^2 Z}{N_{n\kappa}^2} \frac{n! \Gamma(n + 2\gamma_\kappa + 1)}{4(N_{n\kappa} - \kappa)} \sum_{k=0}^n \sum_{p=0}^n \frac{(-)^{k+p}}{k! p!} f_\sigma(k, p) \sum_{i=1}^8 S_i^{(\sigma)}. \quad (6.58)$$

Rozłożenie szeregu z równania (6.56) na sumę ośmiu składników ma na celu zapewnienie maksymalnej przejrzystości przeprowadzanych tutaj obliczeń. Poszczególne elementy wyrażenia  $\sum_{i=1}^8 S_i^{(\sigma)}$  wynoszą:

$$\begin{aligned}
S_1^{(\sigma)} &= (n - k)(n - p) \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k + 1) \Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 2)}{|n'|! \Gamma(|n'| + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \\
&\times \frac{|n'| + \gamma_{\kappa'} + N_{n'\kappa'} + n + \gamma_\kappa + N_{n\kappa}}{|n'| + \gamma_{\kappa'} + N_{n'\kappa'} - n - \gamma_\kappa - N_{n\kappa}} \frac{(N_{n'\kappa'} - \kappa')(N_{n'\kappa'} + \kappa')^2}{N_{n'\kappa'}}, \quad (6.59)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S_2^{(\sigma)} &= (n - k)(\kappa - N_{n\kappa}) \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k + 1) \Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 1)}{|n'|! \Gamma(|n'| + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \\
&\times \frac{|n'| + \gamma_{\kappa'} + N_{n'\kappa'} + n + \gamma_\kappa + N_{n\kappa}}{|n'| + \gamma_{\kappa'} + N_{n'\kappa'} - n - \gamma_\kappa - N_{n\kappa}} \frac{(N_{n'\kappa'} - \kappa')(N_{n'\kappa'} + \kappa')}{N_{n'\kappa'}}, \quad (6.60)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S_3^{(\sigma)} &= (n - p)(\kappa - N_{n\kappa}) \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k + 2) \Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 2)}{|n'|! \Gamma(|n'| + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \\
&\times \frac{|n'| + \gamma_{\kappa'} + N_{n'\kappa'} + n + \gamma_\kappa + N_{n\kappa}}{|n'| + \gamma_{\kappa'} + N_{n'\kappa'} - n - \gamma_\kappa - N_{n\kappa}} \frac{(N_{n'\kappa'} - \kappa')(N_{n'\kappa'} + \kappa')}{N_{n'\kappa'}}, \quad (6.61)
\end{aligned}$$

$$S_4^{(\sigma)} = (\kappa - N_{n\kappa})^2 \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k + 2)\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{|n'|!\Gamma(|n'| + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \\ \times \frac{|n'| + \gamma_{\kappa'} + N_{n'\kappa'} + n + \gamma_{\kappa} + N_{n\kappa}}{|n'| + \gamma_{\kappa'} + N_{n'\kappa'} - n - \gamma_{\kappa} - N_{n\kappa}} \frac{N_{n'\kappa'} - \kappa'}{N_{n'\kappa'}}, \quad (6.62)$$

$$S_5^{(\sigma)} = (n - k)(N_{n\kappa} - \kappa) \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k + 1)\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 2)}{|n'|!\Gamma(|n'| + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \\ \times \frac{(N_{n'\kappa'} - \kappa')(N_{n'\kappa'} + \kappa')^2}{N_{n'\kappa'}}, \quad (6.63)$$

$$S_6^{(\sigma)} = -(n - k)(n - p) \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k + 1)\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{|n'|!\Gamma(|n'| + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \\ \times \frac{(N_{n'\kappa'} - \kappa')(N_{n'\kappa'} + \kappa')}{N_{n'\kappa'}}, \quad (6.64)$$

$$S_7^{(\sigma)} = -(\kappa - N_{n\kappa})^2 \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k + 2)\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 2)}{|n'|!\Gamma(|n'| + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \\ \times \frac{(N_{n'\kappa'} - \kappa')(N_{n'\kappa'} + \kappa')}{N_{n'\kappa'}}, \quad (6.65)$$

$$S_8^{(\sigma)} = (n - p)(N_{n\kappa} - \kappa) \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k + 2)\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{|n'|!\Gamma(|n'| + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \frac{N_{n'\kappa'} - \kappa'}{N_{n'\kappa'}}, \quad (6.66)$$

przy czym podczas formowania wzorów (6.59)–(6.62) skorzystano z zależności (3.47).

Przejdziemy teraz do wyznaczenia każdego z osobna z tych ośmiu składników. Jako pierwszy weźmy pod uwagę wyraz  $S_5^{(\sigma)}$ . W szeregu występującym w wyrażeniu (6.63) dokonamy zamiany sumowania z  $\sum_{n'=-\infty}^{\infty}(\dots)$  na  $\sum_{n'=0}^{\infty}(\dots)$ . Tę czynność wykonamy w dwóch krokach. Najpierw wykorzystamy schemat opisany wzorami (4.63)–(4.64), w efekcie czego otrzymamy

$$S_5^{(\sigma)} = (n - k)(N_{n\kappa} - \kappa) \left[ \sum_{n'=1}^{\infty} \frac{\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k + 1)\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 2)}{n'!\Gamma(n' + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \frac{(N_{n'\kappa'} + \kappa')(N_{n'\kappa'} - \kappa')^2}{-N_{n'\kappa'}} \right. \\ \left. + \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k + 1)\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 2)}{n'!\Gamma(n' + 2\gamma_{\kappa'} + 1)} \frac{(N_{n'\kappa'} - \kappa')(N_{n'\kappa'} + \kappa')^2}{N_{n'\kappa'}} \right]. \quad (6.67)$$

W następnym kroku do szeregu rozpoczynającego się od 1, włączymy wyraz z  $n' = 0$ , który i tak nie wnosi żadnego wkładu do jego sumy. Po prostych przekształceniach dostaniemy

$$S_5^{(\sigma)} = -2(n - k)(\kappa - N_{n\kappa}) \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k + 1)\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 2)}{(n' - 1)!\Gamma(n' + 2\gamma_{\kappa'})}, \quad (6.68)$$

lub równoważnie

$$S_5^{(\sigma)} = -2(n - k)(\kappa - N_{n\kappa}) \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k + 2)\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{n'!\Gamma(n' + 2\gamma_{\kappa'} + 1)}. \quad (6.69)$$

Powyższy rezultat można jeszcze przekształcić, korzystając z uogólnionych funkcji hipergeometrycznych, których definicja i najważniejsze spełniane przezeń relacje zostały przedstawione w uzupełnieniu E. Uwzględniając zatem we wzorze (6.69) definicję (E.6), znajdujemy w nim funkcję  ${}_2F_1$  z jednostkowym argumentem:

$$S_5^{(\sigma)} = -2(n-k)(\kappa - N_{n\kappa}) \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k + 2)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)} \times {}_2F_1 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k + 2, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1 \\ 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix}; 1 \right). \quad (6.70)$$

W ostatnim kroku do funkcji  ${}_2F_1$  zastosujemy tożsamość Gaussa (E.9), w konsekwencji czego dostajemy ostateczne wyrażenie na składnik  $S_5^{(\sigma)}$  w postaci

$$S_5^{(\sigma)} = -2(n-k)(\kappa - N_{n\kappa}) \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k + 2)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)\Gamma(2\gamma_{\kappa} + k + p)}{\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + k - 1)\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + p + 2)}. \quad (6.71)$$

Postępując analogicznie, dla składnika  $S_8^{(\sigma)}$  dostajemy

$$S_8^{(\sigma)} = -2(n-p)(\kappa - N_{n\kappa}) \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k + 2)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)\Gamma(2\gamma_{\kappa} + k + p)}{\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + k - 1)\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + p + 2)}. \quad (6.72)$$

Wyznaczenie wyrazów  $S_6^{(\sigma)}$  i  $S_7^{(\sigma)}$  przebiega w podobny sposób; otrzymujemy

$$S_6^{(\sigma)} = 0, \quad (6.73)$$

$$S_7^{(\sigma)} = 0. \quad (6.74)$$

Przejdziemy teraz do obliczenia pozostałych składników wyrażenia (6.58), czyli  $S_1^{(\sigma)}$  do  $S_4^{(\sigma)}$ . Przyjrzyjmy się najpierw równaniu na  $S_1^{(\sigma)}$ , czyli wyrażeniu (6.59). Obecny tam szereg przekształcimy zgodnie ze schematem (4.63)–(4.64), po czym do sumy rozpoczynającej się od 1 włączymy (zerowy) wyraz z  $n' = 0$ . Dostaniemy wówczas wzór zawierający sumę dwóch szeregów o jednakowych granicach sumowania. Dodając je do siebie, otrzymujemy

$$S_1^{(\sigma)} = (n-k)(n-p) \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k + 1)\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 2)}{(n' - 1)!\Gamma(n' + 2\gamma_{\kappa'})} \times \left\{ \frac{(N_{n'\kappa'} + \kappa')(n' + \gamma_{\kappa'} + N_{n'\kappa'} + n + \gamma_{\kappa} + N_{n\kappa})}{N_{n'\kappa'}(n' + \gamma_{\kappa'} + N_{n'\kappa'} - n - \gamma_{\kappa} - N_{n\kappa})} - \frac{(N_{n'\kappa'} - \kappa')(n' + \gamma_{\kappa'} - N_{n'\kappa'} + n + \gamma_{\kappa} + N_{n\kappa})}{N_{n'\kappa'}(n' + \gamma_{\kappa'} - N_{n'\kappa'} - n - \gamma_{\kappa} - N_{n\kappa})} \right\}. \quad (6.75)$$

Dalsze przekształcenia algebraiczne transformują wzór (6.75) do postaci

$$S_1^{(\sigma)} = 2(n-k)(n-p)(N_{n\kappa} + \kappa') \times \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k + 2)\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1)}{n'!\Gamma(n' + 2\gamma_{\kappa'} + 1)\Gamma(n' + \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 2)}, \quad (6.76)$$

którą, w oparciu o definicję (E.7), możemy przepisać z użyciem funkcji hipergeometrycznej  ${}_3F_2$  z jednostkowym argumentem:

$$S_1^{(\sigma)} = 2(n-k)(n-p)(N_{n\kappa} + \kappa') \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k + 2)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1)} \\ \times {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k + 2, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 2, 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix} ; 1 \right). \quad (6.77)$$

Analogicznie otrzymuje się

$$S_2^{(\sigma)} = 2(n-k)(\kappa - N_{n\kappa}) \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k + 2)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p)}{\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1)} \\ \times {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k + 2, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 2, 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix} ; 1 \right), \quad (6.78)$$

$$S_3^{(\sigma)} = 2(n-p)(\kappa - N_{n\kappa}) \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k + 3)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1)} \\ \times {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k + 3, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 2, 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix} ; 1 \right), \quad (6.79)$$

$$S_4^{(\sigma)} = 2(\kappa - N_{n\kappa})^2(N_{n\kappa} - \kappa') \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k + 2)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n)} \\ \times {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k + 2, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1, 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix} ; 1 \right). \quad (6.80)$$

Mając na celu uzyskanie jak najprostszego wyrażenia dla sumy  $\sum_{i=1}^8 S_i^{(\sigma)}$ , funkcje hipergeometryczne obecne w wyrażeniach (6.78)–(6.80) przekształcimy do postaci funkcji<sup>14</sup>  ${}_3F_2(1)$  obecnej w równaniu (6.77), którą tymczasowo oznaczymy symbolicznie przez

$${}_3F_2(\dots) \equiv {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k + 2, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 2, 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix} ; 1 \right). \quad (6.81)$$

Przechodząc do konkretów, do funkcji  ${}_3F_2$  występujących w równaniach (6.78)–(6.79) zastosujemy relację (E.10), która efektywnie obniży jeden z ich górnych parametrów o 1, natomiast tę widoczną we wzorze (6.80) przekształcimy według transformacji (E.12), podwyższającej trzeci górny i pierwszy dolny parametr o 1. Wykonanie tych przekształceń skutkuje otrzymaniem składników  $S_2^{(\sigma)}$  do  $S_4^{(\sigma)}$  w następujących postaciach:

$$S_2^{(\sigma)} = 2(n-k)(\kappa - N_{n\kappa}) \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k + 2)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)\Gamma(2\gamma_{\kappa} + k + p)}{\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + k - 1)\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + p + 2)} \\ + 2(n-k)(n-p-2)(\kappa - N_{n\kappa}) \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k + 2)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1)} {}_3F_2(\dots), \quad (6.82)$$

<sup>14</sup>Zapis  ${}_3F_2(1)$  używany jest często w literaturze do oznaczania uogólnionych funkcji hipergeometrycznych z jednostkowym argumentem.



$$S_3^{(\sigma)} = 2(n-p)(\kappa - N_{n\kappa}) \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k + 2)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)\Gamma(2\gamma_{\kappa} + k + p)}{\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + k - 1)\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + p + 2)} \\ + 2(n-p)(n-k+1)(\kappa - N_{n\kappa}) \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k + 2)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1)} {}_3F_2(\dots), \quad (6.83)$$

$$S_4^{(\sigma)} = -2 \frac{(N_{n\kappa} - \kappa)^2}{N_{n\kappa} + \kappa'} \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k + 2)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)\Gamma(2\gamma_{\kappa} + k + p + 1)}{\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + k - 1)\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + p + 2)} \\ + 2 \frac{(N_{n\kappa} - \kappa)^2}{N_{n\kappa} + \kappa'} (n-k+1)(n-p-2) \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k + 2)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1)} {}_3F_2(\dots). \quad (6.84)$$

Uzyskanie wyrażenia na  $S_4^{(\sigma)}$  w postaci (6.84) wymagało użycia wzoru (4.88) oraz zastosowania relacji

$$(n-k+1)(n-p-2) + (n + \gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'}) (\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + k + p - n + 1) \\ = (\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + k - 1)(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + p + 2). \quad (6.85)$$

W celu wyznaczenia sumy  $\sum_{i=1}^8 S_i^{(\sigma)}$  dodajemy do siebie wyrażenia zawarte we wzorach (6.71), (6.72)–(6.74), (6.77) oraz (6.82)–(6.84) i dostajemy:

$$\sum_{i=1}^8 S_i^{(\sigma)} = \frac{-2}{N_{n\kappa} + \kappa'} \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k + 2)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1)}{\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + k - 1)\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + p + 2)} \\ \times \left\{ (N_{n\kappa} - \kappa)^2 \Gamma(2\gamma_{\kappa} + k + p + 1) + \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + k - 1)\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + p + 2)}{\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1)} \right. \\ \left. \times \left[ (N_{n\kappa} - \kappa) - (n-k)(\kappa + \kappa') \right] \left[ 2(N_{n\kappa} - \kappa) + (n-p)(\kappa + \kappa') \right] {}_3F_2(\dots) \right\}. \quad (6.86)$$

Uwzględniając w równaniu (6.58) wzory (6.57), (6.81) i (6.86), otrzymujemy rozpatrywaną całkę radialną w postaci

$$I_{\kappa'\sigma} = A_{\sigma} + \sum_{k=0}^n \sum_{p=0}^n B_{\sigma}(k, p) {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - k + 2, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - p - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 2, 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix}; 1 \right), \quad (6.87)$$

gdzie

$$A_{\sigma} = \frac{\alpha^2 Z}{N_{n\kappa}^2} \frac{N_{n\kappa} - \kappa}{2(N_{n\kappa} + \kappa')} n! \Gamma(n + 2\gamma_{\kappa} + 1) \\ \times \sum_{k=0}^n \sum_{p=0}^n \frac{(-)^{k+p}}{k!p!} \frac{\Gamma(2\gamma_{\kappa} + k + p + 1)}{\Gamma(k + 2\gamma_{\kappa} + 1)\Gamma(p + 2\gamma_{\kappa} + 1)\Gamma(n - k + 1)\Gamma(n - p + 1)}, \quad (6.88)$$

zaś współczynnik przy funkcji  ${}_3F_2$  stojący pod znakiem podwójnej sumy dany jest wyrażeniem

$$B_{\sigma}(k, p) = \frac{\alpha^2 Z}{N_{n\kappa}^2} \frac{n! \Gamma(n + 2\gamma_{\kappa} + 1)}{2(N_{n\kappa} - \kappa)(N_{n\kappa} + \kappa')} \frac{(-)^{k+p}}{k!p!} \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + k - 1)\Gamma(\gamma_{\kappa} + \gamma_{\kappa'} + p + 2)}{\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1)} \\ \times \frac{\left[ (N_{n\kappa} - \kappa) - (n-k)(\kappa + \kappa') \right] \left[ 2(N_{n\kappa} - \kappa) + (n-p)(\kappa + \kappa') \right]}{\Gamma(n - k + 1)\Gamma(k + 2\gamma_{\kappa} + 1)\Gamma(n - p + 1)\Gamma(p + 2\gamma_{\kappa} + 1)}. \quad (6.89)$$

Spróbujmy jeszcze nieco uprościć formułę dla  $A_\sigma$ . Przepiszmy ją w następującej formie:

$$A_\sigma = \frac{\alpha^2 Z}{2N_{n\kappa}^2} \frac{N_{n\kappa} - \kappa}{N_{n\kappa} + \kappa'} \tilde{f}(1, 1), \quad (6.90)$$

przy czym  $\tilde{f}(1, 1)$  to wyrażenie zdefiniowane poprzez wzór (F.1). Posługując się kilkoma elementarnymi własnościami funkcji gamma Eulera, można czynnik  $\tilde{f}(1, 1)$  doprowadzić do znacznie prostszej postaci. Szczegóły tych przekształceń zostały przedstawione w uzupełnieniu F. W oparciu o wzór (F.10), możemy zapisać, iż

$$A_\sigma = (-)^n \frac{\alpha^2 Z}{2N_{n\kappa}^2} \frac{N_{n\kappa} - \kappa}{N_{n\kappa} + \kappa'} \left[ \frac{(-)^k \Gamma(k+1)}{k! \Gamma(k-n+1) \Gamma(n-k+1)} \right]_{k=n}. \quad (6.91)$$

Ponieważ wyrażenie w nawiasie kwadratowym dla warunku  $k = n$  wynosi  $(-)^n$ , dostajemy

$$A_\sigma = \frac{\alpha^2 Z}{2N_{n\kappa}^2} \frac{N_{n\kappa} - \kappa}{N_{n\kappa} + \kappa'}. \quad (6.92)$$

Konsekwencją formuły (6.92) jest następująca postać omawianej całki radialnej:

$$\begin{aligned} I_{\kappa'\sigma} &= \frac{\alpha^2 Z}{2N_{n\kappa}^2} \frac{N_{n\kappa} - \kappa}{N_{n\kappa} + \kappa'} \left\{ 1 + \frac{n! \Gamma(n + 2\gamma_\kappa + 1)}{(N_{n\kappa} - \kappa)^2 (\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1) \Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)} \right. \\ &\quad \times \sum_{k=0}^n \sum_{p=0}^n \frac{(-)^{k+p}}{k! p!} \frac{\Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + k - 1) \Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + p + 2)}{\Gamma(n - k + 1) \Gamma(k + 2\gamma_\kappa + 1) \Gamma(n - p + 1) \Gamma(p + 2\gamma_\kappa + 1)} \\ &\quad \times \left[ (N_{n\kappa} - \kappa) - (n - k)(\kappa + \kappa') \right] \left[ 2(N_{n\kappa} - \kappa) + (n - p)(\kappa + \kappa') \right] \\ &\quad \left. \times {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k + 2, \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2, 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix} ; 1 \right) \right\}. \quad (6.93) \end{aligned}$$

W dalszej kolejności, do funkcji  ${}_3F_2$  występującej w powyższym wyrażeniu zastosujemy relację (E.17), tj.:

$$\begin{aligned} &{}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k + 2, \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2, 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix} ; 1 \right) \\ &= \frac{\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1) \Gamma(2\gamma_\kappa + k + p + 1)}{\Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + n) \Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + k + p - n + 2)} \\ &\quad \times {}_3F_2 \left( \begin{matrix} k - n, p - n + 3, \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1 \\ \gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + k + p - n + 2, \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2 \end{matrix} ; 1 \right). \quad (6.94) \end{aligned}$$

Uwzględnivszy powyższą równość we wzorze (6.93), dostajemy

$$\begin{aligned}
I_{\kappa'\sigma} &= \frac{\alpha^2 Z}{2N_{n\kappa}^2} \frac{N_{n\kappa} - \kappa}{N_{n\kappa} + \kappa'} \left\{ 1 + \frac{n! \Gamma(n + 2\gamma_\kappa + 1)}{(N_{n\kappa} - \kappa)^2 (\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1) \Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + n)} \right. \\
&\quad \times \sum_{k=0}^n \sum_{p=0}^n \frac{(-)^{k+p}}{k! p!} \frac{\Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + k - 1) \Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + p + 2) \Gamma(2\gamma_\kappa + k + p + 1)}{\Gamma(n - k + 1) \Gamma(k + 2\gamma_\kappa + 1) \Gamma(n - p + 1) \Gamma(p + 2\gamma_\kappa + 1)} \\
&\quad \times \frac{\left[ (N_{n\kappa} - \kappa) - (n - k)(\kappa + \kappa') \right] \left[ 2(N_{n\kappa} - \kappa) + (n - p)(\kappa + \kappa') \right]}{\Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + k + p - n + 2)} \\
&\quad \left. \times {}_3F_2 \left( \begin{matrix} k - n, & p - n + 3, & \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1 \\ \gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + k + p - n + 2, & \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2 \end{matrix} ; 1 \right) \right\}. \tag{6.95}
\end{aligned}$$

Ponieważ w granicach sumy  $\sum_{k=0}^n$  wyrażenie  $k - n$  jest liczbą całkowitą niedodatnią, stwierdzamy, iż szereg obecny w powyższym wzorze w postaci funkcji  ${}_3F_2$  urywa się, tzn. staje się sumą skończoną ze względu na pierwszy z jej górnych parametrów. Całe wyrażenie na  $I_{\kappa'\sigma}$  wyraża się więc de facto poprzez potrójną, ale skończoną sumę funkcji elementarnych.

Okazuje się, iż uzyskany wynik (6.95) możemy jeszcze uprościć, w tym sensie, że po wykonaniu pewnej ilości operacji na funkcjach hipergeometrycznych będziemy w stanie pozbyć się z wyrażenia przynajmniej jednego symbolu sumy, co w znacznym stopniu skróci czas obliczeń numerycznych, których wyniki zostały zaprezentowane w rozdziale 7. Wykorzystując fakt, iż jeden z górnych parametrów funkcji  ${}_3F_2$  występującej w równaniu (6.95) należy do zbioru liczb  $\mathbb{Z}_- \cup \{0\}$ , a także w oparciu o relację (E.19), mamy:

$$\begin{aligned}
&{}_3F_2 \left( \begin{matrix} k - n, & p - n + 3, & \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1 \\ \gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + k + p - n + 2, & \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2 \end{matrix} ; 1 \right) \\
&= \frac{\Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + n - 1) \Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + k + p - n + 2)}{\Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + k - 1) \Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + p + 2)} \\
&\quad \times {}_3F_2 \left( \begin{matrix} k - n, & p - n + 3, & 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2, & -\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2 \end{matrix} ; 1 \right). \tag{6.96}
\end{aligned}$$

W związku z powyższym, wyrażenie na omawianą całkę radialną przyjmuje następującą formę:

$$\begin{aligned}
I_{\kappa'\sigma} &= \frac{\alpha^2 Z}{2N_{n\kappa}^2} \frac{N_{n\kappa} - \kappa}{N_{n\kappa} + \kappa'} \left\{ 1 + \frac{n! \Gamma(n + 2\gamma_\kappa + 1)}{(N_{n\kappa} - \kappa)^2 (\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1) (\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + n - 1)} \right. \\
&\quad \times \sum_{k=0}^n \sum_{p=0}^n \frac{(-)^{k+p}}{k! p!} \frac{\Gamma(2\gamma_\kappa + k + p + 1)}{\Gamma(n - k + 1) \Gamma(k + 2\gamma_\kappa + 1) \Gamma(n - p + 1) \Gamma(p + 2\gamma_\kappa + 1)} \\
&\quad \times \left[ (N_{n\kappa} - \kappa) - (n - k)(\kappa + \kappa') \right] \left[ 2(N_{n\kappa} - \kappa) + (n - p)(\kappa + \kappa') \right] \\
&\quad \left. \times {}_3F_2 \left( \begin{matrix} k - n, & p - n + 3, & 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2, & -\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2 \end{matrix} ; 1 \right) \right\}. \tag{6.97}
\end{aligned}$$

Jeżeli funkcję  ${}_3F_2$  z powyższego wyrażenia rozpiszemy zgodnie z definicją (E.7), tj.:

$$\begin{aligned} & {}_3F_2 \left( \begin{matrix} k-n, & p-n+3, & 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 2, & -\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 2 \end{matrix} ; 1 \right) \\ &= \frac{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 2)\Gamma(-\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 2)}{\Gamma(k-n)\Gamma(p-n+3)} \\ & \quad \times \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\Gamma(m+k-n)\Gamma(m+p-n+3)\Gamma(m+1)}{m!\Gamma(m+\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 2)\Gamma(m-\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 2)}, \end{aligned} \quad (6.98)$$

po czym wzór (6.98) uwzględnimy w równaniu (6.97), gdzie następnie dokonamy zamiany kolejności pomiędzy sumowaniami po indeksach  $p$  oraz  $m$ , otrzymamy wówczas

$$\begin{aligned} I_{\kappa'\sigma} &= \frac{\alpha^2 Z}{2N_{n\kappa}^2} \frac{N_{n\kappa} - \kappa}{N_{n\kappa} + \kappa'} \left\{ 1 - \frac{n!\Gamma(n+2\gamma_{\kappa}+1)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1)\Gamma(-\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1)}{(N_{n\kappa} - \kappa)^2} \right. \\ & \quad \times \sum_{k=0}^n \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-)^k \Gamma(m+k-n) [(N_{n\kappa} - \kappa) - (n-k)(\kappa + \kappa')]}{k!\Gamma(n-k+1)\Gamma(k+2\gamma_{\kappa}+1)\Gamma(k-n)\Gamma(m+\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 2)\Gamma(m-\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 2)} \\ & \quad \left. \times \sum_{p=0}^n \frac{(-)^p \Gamma(2\gamma_{\kappa} + k + p + 1)\Gamma(m+p-n+3)}{p!\Gamma(n-p+1)\Gamma(p+2\gamma_{\kappa}+1)\Gamma(p-n+3)} [2(N_{n\kappa} - \kappa) + (n-p)(\kappa + \kappa')] \right\}. \end{aligned} \quad (6.99)$$

W kolejnym kroku zapiszemy powstałe wyrażenie w symbolicznej postaci

$$\begin{aligned} I_{\kappa'\sigma} &= \frac{\alpha^2 Z}{2N_{n\kappa}^2} \frac{N_{n\kappa} - \kappa}{N_{n\kappa} + \kappa'} \left\{ 1 - \frac{n!\Gamma(n+2\gamma_{\kappa}+1)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1)\Gamma(-\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 1)}{(N_{n\kappa} - \kappa)^2} \right. \\ & \quad \times \sum_{k=0}^n \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-)^k}{k!} [(N_{n\kappa} - \kappa) - (n-k)(\kappa + \kappa')] [2(N_{n\kappa} - \kappa)\mathcal{S}_1(k, m) + (\kappa + \kappa')\mathcal{S}_2(k, m)] \\ & \quad \left. \times \frac{\Gamma(m+k-n)}{\Gamma(n-k+1)\Gamma(k+2\gamma_{\kappa}+1)\Gamma(k-n)\Gamma(m+\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 2)\Gamma(m-\gamma_{\kappa'} - \gamma_{\kappa} - n + 2)}, \end{aligned} \quad (6.100)$$

gdzie

$$\mathcal{S}_1(k, m) = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(-)^p \Gamma(2\gamma_{\kappa} + k + p + 1)\Gamma(m+p-n+3)}{p!\Gamma(n-p+1)\Gamma(p+2\gamma_{\kappa}+1)\Gamma(p-n+3)} \quad (6.101)$$

oraz

$$\mathcal{S}_2(k, m) = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(-)^p \Gamma(2\gamma_{\kappa} + k + p + 1)\Gamma(m+p-n+3)}{p!\Gamma(n-p)\Gamma(p+2\gamma_{\kappa}+1)\Gamma(p-n+3)}. \quad (6.102)$$

Górne granice sumowania we wzorach (6.101)–(6.102) zostały rozciągnięte od  $n$  do nieskończoności, gdyż wyrazy z  $p \in [n+1; \infty)$  nie wnoszą żadnego wkładu do tych sum.

Przejdziemy teraz do wyznaczenia składników  $\mathcal{S}_1(k, m)$  oraz  $\mathcal{S}_2(k, m)$ . Zaczniemy od pierwszego z nich. Jeżeli w wyrażeniu po prawej stronie równania (6.101) zastosujemy relację (F.3), a następnie

wykorzystamy definicję (E.7), wówczas będzie możliwe przepisanie wzoru na  $\mathcal{S}_1(k, m)$  z użyciem funkcji hipergeometrycznej z jednostkowym argumentem, tj.:

$$\mathcal{S}_1(k, m) = \frac{\Gamma(2\gamma_\kappa + k + 1)\Gamma(m - n + 3)}{\Gamma(n + 1)\Gamma(3 - n)\Gamma(2\gamma_\kappa + 1)} {}_3F_2 \left( \begin{matrix} -n, 2\gamma_\kappa + k + 1, m - n + 3 \\ 2\gamma_\kappa + 1, 3 - n \end{matrix}; 1 \right). \quad (6.103)$$

Dalej, funkcję  ${}_3F_2$  z powyższego wzoru poddamy transformacji (E.19) i dostajemy:

$$\mathcal{S}_1(k, m) = \frac{(-)^n \Gamma(2\gamma_\kappa + k + 1)\Gamma(m - n + 3)m!}{2n!\Gamma(2\gamma_\kappa + 1)\Gamma(m - n + 1)} {}_3F_2 \left( \begin{matrix} -n, -k, m - n + 3 \\ 2\gamma_\kappa + 1, m - n + 1 \end{matrix}; 1 \right). \quad (6.104)$$

Do wyznaczenia składnika  $\mathcal{S}_2(k, m)$  wykorzystujemy identyczny schemat, jak ten przedstawiony powyżej. Pomijając zatem szczegółowe przekształcenia, zaprezentujemy tutaj tylko wynik końcowy tego etapu obliczeń:

$$\mathcal{S}_2(k, m) = \frac{(-)^{n-1} \Gamma(2\gamma_\kappa + k + 1)\Gamma(m - n + 3)m!}{2(n - 1)!\Gamma(2\gamma_\kappa + 1)\Gamma(m - n + 2)} {}_3F_2 \left( \begin{matrix} -n + 1, -k, m - n + 3 \\ 2\gamma_\kappa + 1, m - n + 2 \end{matrix}; 1 \right). \quad (6.105)$$

Jeżeli do funkcji hipergeometrycznych, obecnych we wzorach (6.104)–(6.105), zastosujemy odpowiednio relacje (E.15)–(E.16), otrzymamy wówczas

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_1(k, m) = \frac{(-)^n m! \Gamma(m - n + 3) \Gamma(n + k + 2\gamma_\kappa + 1)}{2n! \Gamma(n + 2\gamma_\kappa + 1) \Gamma(m - n + 1)} & \left[ 1 + \frac{2nk}{(m - n + 1)(n + k + 2\gamma_\kappa)} \right. \\ & \left. + \frac{n(n - 1)k(k - 1)}{(m - n + 1)(m - n + 2)(n + k + 2\gamma_\kappa - 1)(n + k + 2\gamma_\kappa)} \right] \end{aligned} \quad (6.106)$$

oraz

$$\mathcal{S}_2(k, m) = \frac{(-)^{n+1} m! \Gamma(m - n + 3) \Gamma(n + k + 2\gamma_\kappa)}{(n - 1)! \Gamma(n + 2\gamma_\kappa) \Gamma(m - n + 2)} \left[ 1 + \frac{k(n - 1)}{(m - n + 2)(n + k + 2\gamma_\kappa - 1)} \right]. \quad (6.107)$$

Wstawienie dwóch powyższych rezultatów do równania (6.100) skutkuje otrzymaniem wyrażenia

$$\begin{aligned} I_{\kappa'\sigma} = \frac{\alpha^2 Z}{2N_{n\kappa}^2} \frac{N_{n\kappa} - \kappa}{N_{n\kappa} + \kappa'} & \left\{ 1 - \frac{(-)^n \Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1) \Gamma(-\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1)}{N_{n\kappa} - \kappa} \right. \\ & \times \sum_{k=0}^n \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-)^k \Gamma(m + k - n) \Gamma(m + 1) [(N_{n\kappa} - \kappa) - (n - k)(\kappa + \kappa')]}{k! \Gamma(n - k + 1) \Gamma(k + 2\gamma_\kappa + 1) \Gamma(k - n) \Gamma(m + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2) \Gamma(m - \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2)} \\ & \times \left[ (m - n + 1)(m - n + 2) \Gamma(n + k + 2\gamma_\kappa + 1) + [2nk - (\kappa + \kappa')(N_{n\kappa} + \kappa)] (m - n + 2) \right. \\ & \left. \left. \times \Gamma(n + k + 2\gamma_\kappa) + k(n - 1) [n(k - 1) - (\kappa + \kappa')(N_{n\kappa} + \kappa)] \Gamma(n + k + 2\gamma_\kappa - 1) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (6.108)$$

Na potrzeby dalszych rachunków zapiszemy je nieco inaczej, a mianowicie:

$$I_{\kappa'\sigma} = \frac{\alpha^2 Z}{2N_{n\kappa}^2} \frac{N_{n\kappa} - \kappa}{N_{n\kappa} + \kappa'} \left\{ 1 - \frac{(-)^n \Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1) \Gamma(-\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1)}{N_{n\kappa} - \kappa} \sum_{i=1}^3 M_i \right\}, \quad (6.109)$$

gdzie poszczególne składniki  $M_i$  (dla  $i = 1, 2, 3$ ) wynoszą:

$$M_1 = \sum_{k=0}^n \frac{(-)^k \Gamma(n+k+2\gamma_\kappa+1) \left[ (N_{n\kappa} - \kappa) - (n-k)(\kappa + \kappa') \right]}{k! \Gamma(n-k+1) \Gamma(k+2\gamma_\kappa+1) \Gamma(k-n)} \\ \times \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\Gamma(m+k-n) \Gamma(m+1) \Gamma(m+1) [m^2 + m(3-2n) + (n-1)(n-2)]}{m! \Gamma(m+\gamma_{\kappa'}-\gamma_\kappa-n+1) \Gamma(m-\gamma_{\kappa'}-\gamma_\kappa-n+1)}, \quad (6.110)$$

$$M_2 = \sum_{k=0}^n \frac{(-)^k \Gamma(n+k+2\gamma_\kappa) \left[ (N_{n\kappa} - \kappa) - (n-k)(\kappa + \kappa') \right] \left[ 2nk - (\kappa + \kappa')(N_{n\kappa} + \kappa) \right]}{k! \Gamma(n-k+1) \Gamma(k+2\gamma_\kappa+1) \Gamma(k-n)} \\ \times \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\Gamma(m+k-n) \Gamma(m+1) \Gamma(m+1) [m + (2-n)]}{m! \Gamma(m+\gamma_{\kappa'}-\gamma_\kappa-n+1) \Gamma(m-\gamma_{\kappa'}-\gamma_\kappa-n+1)}, \quad (6.111)$$

$$M_3 = (n-1) \sum_{k=0}^n \frac{(-)^k \Gamma(n+k+2\gamma_\kappa-1) \left[ n(k-1) - (\kappa + \kappa')(N_{n\kappa} + \kappa) \right]}{(k-1)! \Gamma(n-k+1) \Gamma(k+2\gamma_\kappa+1) \Gamma(k-n)} \\ \times \left[ (N_{n\kappa} - \kappa) - (n-k)(\kappa + \kappa') \right] \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\Gamma(m+k-n) \Gamma(m+1) \Gamma(m+1)}{m! \Gamma(m+\gamma_{\kappa'}-\gamma_\kappa-n+1) \Gamma(m-\gamma_{\kappa'}-\gamma_\kappa-n+1)}. \quad (6.112)$$

Każde z otrzymanych wyżej wyrażeń zawiera już tylko podwójną sumę. Okazuje się jednak, iż jedną z nich, tę, w której sumowanie odbywa się po indeksie  $m$ , można wyeliminować. Specyficzny sposób zapisania wyrażenia pod tą nieskończoną sumą pozwala na odnalezienie tam uogólnionych funkcji  ${}_3F_2$  z jednostkowym argumentem. A zatem, wykorzystując definicję (E.7), możemy zapisać

$$M_1 = \sum_{k=0}^n \frac{(-)^k \Gamma(n+k+2\gamma_\kappa+1) \left[ (N_{n\kappa} - \kappa) - (n-k)(\kappa + \kappa') \right]}{k! \Gamma(n-k+1) \Gamma(k+2\gamma_\kappa+1)} \\ \times \left\{ \frac{(n-1)(n-2)}{\Gamma(\gamma_{\kappa'}-\gamma_\kappa-n+2) \Gamma(-\gamma_{\kappa'}-\gamma_\kappa-n+2)} {}_3F_2 \left( \begin{matrix} k-n, & 1, & 1 \\ \gamma_{\kappa'}-\gamma_\kappa-n+2, & -\gamma_{\kappa'}-\gamma_\kappa-n+2 \end{matrix} ; 1 \right) \right. \\ + \frac{2(n-2)(n-k)}{\Gamma(\gamma_{\kappa'}-\gamma_\kappa-n+3) \Gamma(-\gamma_{\kappa'}-\gamma_\kappa-n+3)} {}_3F_2 \left( \begin{matrix} k-n+1, & 2, & 2 \\ \gamma_{\kappa'}-\gamma_\kappa-n+3, & -\gamma_{\kappa'}-\gamma_\kappa-n+3 \end{matrix} ; 1 \right) \\ \left. + \frac{4(n-k)(n-k-1)}{\Gamma(\gamma_{\kappa'}-\gamma_\kappa-n+4) \Gamma(-\gamma_{\kappa'}-\gamma_\kappa-n+4)} {}_3F_2 \left( \begin{matrix} k-n+2, & 3, & 3 \\ \gamma_{\kappa'}-\gamma_\kappa-n+4, & -\gamma_{\kappa'}-\gamma_\kappa-n+4 \end{matrix} ; 1 \right) \right\}, \quad (6.113)$$

$$\begin{aligned}
M_2 &= \sum_{k=0}^n \frac{(-)^k \Gamma(n+k+2\gamma_\kappa) [(N_{n\kappa} - \kappa) - (n-k)(\kappa + \kappa')] [2nk - (\kappa + \kappa')(N_{n\kappa} + \kappa)]}{k! \Gamma(n-k+1) \Gamma(k+2\gamma_\kappa + 1)} \\
&\times \left\{ \frac{(2-n)}{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2) \Gamma(-\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2)} {}_3F_2 \left( \begin{matrix} k-n, & 1, & 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2, & -\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2 \end{matrix} ; 1 \right) \right. \\
&\left. + \frac{(k-n)}{\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 3) \Gamma(-\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 3)} {}_3F_2 \left( \begin{matrix} k-n+1, & 2, & 2 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 3, & -\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 3 \end{matrix} ; 1 \right) \right\}, \tag{6.114}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
M_3 &= (n-1) \sum_{k=0}^n \frac{(-)^k \Gamma(n+k+2\gamma_\kappa) [(N_{n\kappa} - \kappa) - (n-k-1)(\kappa + \kappa')]}{k! \Gamma(n-k) \Gamma(k+2\gamma_\kappa + 2) \Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2) \Gamma(-\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2)} \\
&\times [nk - (\kappa + \kappa')(N_{n\kappa} + \kappa)] {}_3F_2 \left( \begin{matrix} k-n+1, & 1, & 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2, & -\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2 \end{matrix} ; 1 \right). \tag{6.115}
\end{aligned}$$

Jeśli ostatnie trzy wyrażenia uwzględnimy w równaniu (6.109), przekonamy się, iż udało się nam uzyskać zamierzony efekt, czyli ograniczyć liczbę sum w końcowym wzorze na  $I_{\kappa'\sigma}$ . Mamy bowiem już tylko pojedynczą sumę po indeksie  $k$ , a pod nią kilka funkcji  ${}_3F_2$ . Niestety, nie każdy z szeregów obecnych pod postaciami tychże funkcji, występujących w wyrażeniach (6.113)–(6.115), urywa się. By uzyskać taki efekt dla funkcji hipergeometrycznych nie posiadających tej własności, należy je przekształcić odpowiednio za pomocą relacji (E.13) i (E.14).

Zapisanie wyrażenia na  $\sum_{i=1}^3 M_i$  – a w konsekwencji również na całkę radialną  $I_{\kappa'\sigma}$  – w jak najbardziej zwartej postaci, wymaga przeprowadzenia bardzo długich rachunków, toteż w rozprawie ograniczymy się do podania ostatecznego wyniku dla omawianej całki. A zatem, podstawiając do wzoru (6.109) zależności (6.113)–(6.115), uwzględniając przy tym relacje (E.13)–(E.14), otrzymujemy:

$$\begin{aligned}
I_{\kappa'\sigma} &= \frac{\alpha^2 Z}{2N_{n\kappa}^2} \frac{N_{n\kappa} - \kappa}{N_{n\kappa} + \kappa'} \left\{ 1 + \frac{(-)^n}{(N_{n\kappa} - \kappa)(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1)(\gamma_{\kappa'} + \gamma_\kappa + n - 1)} \right. \\
&\times \sum_{k=0}^n \frac{(-)^k \Gamma(2\gamma_\kappa + k + n)}{k! \Gamma(2\gamma_\kappa + k + 3) \Gamma(n - k + 1)} \\
&\times \left[ \mathcal{W}_1(\kappa, \kappa', k, n) {}_3F_2 \left( \begin{matrix} k-n, & 1, & 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1, & -\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1 \end{matrix} ; 1 \right) \right. \\
&\quad + \mathcal{W}_2(\kappa, \kappa', k, n) {}_3F_2 \left( \begin{matrix} k-n, & 1, & 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1, & -\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2 \end{matrix} ; 1 \right) \\
&\quad \left. \left. + \mathcal{W}_3(\kappa, \kappa', k, n) {}_3F_2 \left( \begin{matrix} k-n, & 1, & 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2, & -\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2 \end{matrix} ; 1 \right) \right] \right\}, \tag{6.116}
\end{aligned}$$

gdzie  $\mathcal{W}_i(\kappa, \kappa', k, n)$  (dla  $i = 1, 2, 3$ ) to wyrażenia będące wielomianami względem liczb  $\kappa, \kappa', k$  oraz

$n$ ; ich jawne postacie są następujące:

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_1(\kappa, \kappa', k, n) &= (2\gamma_\kappa + k + n)(2\gamma_\kappa + k + n + 1)(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + n - 1)(\gamma_\kappa - \gamma_{\kappa'} + n - 1) \\ &\times \left[ (2\gamma_\kappa + k + n + 2) [(N_{n\kappa} - \kappa) - (n - k)(\kappa + \kappa')] + 2n(\kappa + \kappa') \right], \end{aligned} \quad (6.117)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_2(\kappa, \kappa', k, n) &= (\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1) \left\{ (2\gamma_\kappa + k + 1)(2\gamma_\kappa + k + 2) [(N_{n\kappa} - \kappa) - (n - k)(\kappa + \kappa')] \right. \\ &\times [(2\gamma_\kappa + 1)(2\gamma_\kappa + k + n) - (\kappa + \kappa')(N_{n\kappa} + \kappa)] \\ &+ (2\gamma_\kappa + k + 2) [(N_{n\kappa} - \kappa) - (n - k - 1)(\kappa + \kappa')] \\ &\times [2n(2\gamma_\kappa + k)(2\gamma_\kappa + k + n) - (n - 1)(\kappa + \kappa')(N_{n\kappa} + \kappa)] \\ &\left. + n(n - 1)(2\gamma_\kappa + k + n)(2\gamma_\kappa + 2k - 1) [(N_{n\kappa} - \kappa) - (n - k - 2)(\kappa + \kappa')] \right\}, \end{aligned} \quad (6.118)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_3(\kappa, \kappa', k, n) &= (\gamma_\kappa - \gamma_{\kappa'} + k - 1)(2\gamma_\kappa + k + 2) [(N_{n\kappa} - \kappa) - (n - k - 1)(\kappa + \kappa')] \\ &\times [2n(\gamma_\kappa - \gamma_{\kappa'} + 1)(2\gamma_\kappa + k + n) - (n - 1)(\kappa + \kappa')(N_{n\kappa} + \kappa)] \\ &+ (\gamma_\kappa - \gamma_{\kappa'} + 1)(2\gamma_\kappa + k + 1)(2\gamma_\kappa + k + 2) [(N_{n\kappa} - \kappa) - (n - k)(\kappa + \kappa')] \\ &\times [(\gamma_\kappa - \gamma_{\kappa'})(2\gamma_\kappa + k + n) - (\kappa + \kappa')(N_{n\kappa} + \kappa)] + n(n - 1)(\gamma_\kappa - \gamma_{\kappa'} + k - 1) \\ &\times (\gamma_\kappa - \gamma_{\kappa'} + k)(2\gamma_\kappa + k + n) [(N_{n\kappa} - \kappa) - (n - k - 2)(\kappa + \kappa')]. \end{aligned} \quad (6.119)$$

Uwzględniając cztery ostatnie wzory w równaniu (6.52), możemy zapisać wyrażenie na sumę dwóch pozostałych składników stałej ekranowania magnetycznego jądra atomu jednoelektronowego, czyli:

$$\begin{aligned} \sigma_{-\kappa+1} + \sigma_{-\kappa-1} &= \frac{\alpha^2 Z}{8N_{n\kappa}^2} \sum_{\kappa'} \frac{N_{n\kappa} - \kappa}{N_{n\kappa} + \kappa'} \left[ \frac{(2\kappa - 1)^2 - 4\mu^2}{(2\kappa - 1)^2} \delta_{\kappa', -\kappa+1} + \frac{(2\kappa + 1)^2 - 4\mu^2}{(2\kappa + 1)^2} \delta_{\kappa', -\kappa-1} \right] \\ &\times \left\{ 1 + \frac{(-)^n}{(N_{n\kappa} - \kappa)(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1)(\gamma_{\kappa'} + \gamma_\kappa + n - 1)} \sum_{k=0}^n \frac{(-)^k \Gamma(2\gamma_\kappa + k + n)}{k! \Gamma(2\gamma_\kappa + k + 3) \Gamma(n - k + 1)} \right. \\ &\times \left[ \mathcal{W}_1(\kappa, \kappa', k, n) {}_3F_2 \left( \begin{matrix} k - n, & 1, & 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1, & -\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1 \end{matrix} ; 1 \right) \right. \\ &+ \mathcal{W}_2(\kappa, \kappa', k, n) {}_3F_2 \left( \begin{matrix} k - n, & 1, & 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1, & -\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2 \end{matrix} ; 1 \right) \\ &\left. \left. + \mathcal{W}_3(\kappa, \kappa', k, n) {}_3F_2 \left( \begin{matrix} k - n, & 1, & 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2, & -\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2 \end{matrix} ; 1 \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (6.120)$$

Zanim wyznaczymy całkowitą stałą ekranowania, podobnie jak w przypadku obliczania składnika  $\sigma_\kappa$ , sprawdzimy zgodność powyższego wyrażenia dla przypadku stanu podstawowego z danymi literaturowymi. Dla tego szczególnego przypadku wzór (6.120) ma postać

$$\sigma_{2,g} = \frac{2\alpha^2 Z}{27} \frac{\gamma_1 + 2}{\gamma_1 + 1}. \quad (6.121)$$



Wynik na  $\sigma_{2,g}$  przedstawiony w publikacji [47] w formie szeregu, po pewnych przekształceniach opisanych w pracy [48], przyjmuje postać identyczną z wyrażeniem (6.121).

Przejdziemy wreszcie do wyznaczenia całkowitej stałej ekranowania magnetycznego dla jądra relatywistycznego atomu wodoropodobnego. Do równania (6.25) wstawiamy wzory (6.50) oraz (6.120) i otrzymujemy ostatecznie:

$$\begin{aligned}
\sigma &= \frac{\alpha^4 Z^3}{N_{n\kappa}^4} \frac{32\kappa^3 \mu^2 [2\kappa(\gamma_\kappa + n) - N_{n\kappa}]}{(4\kappa^2 - 1)^2 \gamma_\kappa (4\gamma_\kappa^2 - 1)} + \frac{\alpha^2 Z}{N_{n\kappa}^2 (4\kappa^2 - 1)^2} \left[ 8\kappa^2 \mu^2 + \frac{1}{8} \sum_{\kappa'} \frac{N_{n\kappa} - \kappa}{N_{n\kappa} + \kappa'} \right. \\
&\times \left[ \left( (4\kappa^2 - 1)^2 - 4\mu^2 (2\kappa + 1)^2 \right) \delta_{\kappa', -\kappa+1} + \left( (4\kappa^2 - 1)^2 - 4\mu^2 (2\kappa - 1)^2 \right) \delta_{\kappa', -\kappa-1} \right] \\
&\times \left\{ 1 + \frac{(-)^n}{(N_{n\kappa} - \kappa)(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1)(\gamma_{\kappa'} + \gamma_\kappa + n - 1)} \sum_{k=0}^n \frac{(-)^k \Gamma(2\gamma_\kappa + k + n)}{k! \Gamma(2\gamma_\kappa + k + 3) \Gamma(n - k + 1)} \right. \\
&\times \left[ \mathcal{W}_1(\kappa, \kappa', k, n) {}_3F_2 \left( \begin{matrix} k - n, & 1, & 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1, & -\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1 \end{matrix} ; 1 \right) \right. \\
&+ \mathcal{W}_2(\kappa, \kappa', k, n) {}_3F_2 \left( \begin{matrix} k - n, & 1, & 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1, & -\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2 \end{matrix} ; 1 \right) \\
&+ \left. \left. \mathcal{W}_3(\kappa, \kappa', k, n) {}_3F_2 \left( \begin{matrix} k - n, & 1, & 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2, & -\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2 \end{matrix} ; 1 \right) \right] \right\}, \tag{6.122}
\end{aligned}$$

gdzie, dla przypomnienia,  $\mathcal{W}_i(\kappa, \kappa', k, n)$  (dla  $i = 1, 2, 3$ ) dane są wzorami (6.117)–(6.119).

Autorce rozprawy nie są znane inne prace, w których stała ekranowania magnetycznego jądra jednoelektronowego atomu Diraca została wyznaczona dla całego dyskretnego spektrum stanów energetycznych układu. Testem poprawności uzyskanego tutaj wyniku może być sprawdzenie jego zgodności z danymi literaturowymi dla przypadków szczególnych stanu atomu, na przykład dla stanu podstawowego. Uwzględniając w równaniu (6.122) wartości liczb kwantowych, odpowiadających temu stanowi, tj.:  $\kappa = -1$ ,  $n = 0$ ,  $\mu = \pm 1/2$  oraz  $N_{0,-1} = 1$ , alternatywnie, dodając do siebie wyrażenia (6.51) i (6.121), otrzymuje się następującą zależność:

$$\sigma_g = \sigma_{-1,g} + \sigma_{2,g} = -\frac{2\alpha^2 Z}{27} \frac{4\gamma_1^3 + 6\gamma_1^2 - 7\gamma_1 - 12}{\gamma_1(\gamma_1 + 1)(2\gamma_1 - 1)}, \tag{6.123}$$

przy czym indeks dolny  $g$  oznacza, iż mamy do czynienia ze stanem podstawowym. Powyższy wynik został uzyskany również bezpośrednim rachunkiem w pracy [49]. Wyrażenie (6.123) pokrywa się z rezultatami uzyskanymi przez Moore'a [43] oraz Pypera i Zhanga [44]. Jest zgodny także z wynikiem opublikowanym przez Ivanova i jego współpracowników w pracy [46], jeśli uwzględni się w nim fakt, iż autorzy tej pracy zdefiniowali  $\sigma_g$  z przeciwnym znakiem. Ponadto, nasz rezultat zgadza się z wynikiem Zapryagaeva i współpracowników, zawartym w pracach [32, 33, 42], po dokonaniu w nich korekty, polegającej na zamianie  $\lambda_2$  na  $\lambda_1$  w ich końcowym wyniku (wielkość  $\lambda_1$  jest odpowiednikiem naszego  $\gamma_1$ ).

W pracy [46] podano również wyrażenie na stałą ekranowania magnetycznego dla stanów  $\mathcal{N}s_{1/2}$ , gdzie  $\mathcal{N}$  jest główną liczbą kwantową. Wynik uzyskany przez autorów tej publikacji, przepisany w notacji używanej w niniejszej rozprawie, prezentuje się następująco:

$$\sigma_s = \frac{8}{9} \frac{\alpha^4 Z^3}{N_{n,-1}^4} \frac{2(\gamma_1 + n) + N_{n,-1}}{\gamma_1(4\gamma_1^2 - 1)} + \frac{2}{27} \frac{\alpha^2 Z}{N_{n,-1}^2} \left[ 5 + \frac{(\gamma_1 + n)(\gamma_1 + n - N_{n,-1})}{1 - \gamma_1^2} \right], \tag{6.124}$$

przy czym indeks dolny  $s$  oznacza, iż rozpatrujemy stany typu  $s$ , natomiast – dla przypomnienia –  $n$  to radialna liczba kwantowa, powiązana z główną liczbą kwantową  $\mathcal{N}$  zależnością:

$$\mathcal{N} = n + |\kappa|. \quad (6.125)$$

Pokazaliśmy już, że otrzymany przez nas wzór (6.122) sprawdza się dla stanu podstawowego atomu. W oparciu o pracę [46] możemy zweryfikować, czy obowiązuje on również stanów wzbudzonych typu  $\mathcal{N}_{s_{1/2}}$ , gdzie  $\mathcal{N} = 2, 3, 4 \dots$ . Uwzględnienie w wyrażeniu (6.122) wartości liczb kwantowych, charakterystycznych dla tej klasy stanów, czyli  $\kappa = -1$ ,  $\mu = \pm 1/2$ , skutkuje otrzymaniem następującego równania:

$$\begin{aligned} \sigma_s = & \frac{8 \alpha^4 Z^3}{9 N_{n,-1}^4} \frac{2(\gamma_1 + n) + N_{n,-1}}{\gamma_1(4\gamma_1^2 - 1)} + \frac{1}{9} \frac{\alpha^2 Z}{N_{n,-1}^2} \left\{ \frac{3N_{n,-1} + 5}{N_{n,-1} + 2} + \frac{(-)^n}{N_{n,-1} + 2} \right. \\ & \times \frac{1}{(\gamma_2 - \gamma_1 - n + 1)(\gamma_2 + \gamma_1 + n - 1)} \sum_{k=0}^n \frac{(-)^k \Gamma(2\gamma_1 + k + n)}{k! \Gamma(2\gamma_1 + k + 3) \Gamma(n - k + 1)} \\ & \times \left[ \mathcal{W}_1(-1, +2, k, n) {}_3F_2 \left( \begin{matrix} k - n, & 1, & 1 \\ \gamma_2 - \gamma_1 - n + 1, & -\gamma_2 - \gamma_1 - n + 1 \end{matrix} ; 1 \right) \right. \\ & + \mathcal{W}_2(-1, +2, k, n) {}_3F_2 \left( \begin{matrix} k - n, & 1, & 1 \\ \gamma_2 - \gamma_1 - n + 1, & -\gamma_2 - \gamma_1 - n + 2 \end{matrix} ; 1 \right) \\ & \left. \left. + \mathcal{W}_3(-1, +2, k, n) {}_3F_2 \left( \begin{matrix} k - n, & 1, & 1 \\ \gamma_2 - \gamma_1 - n + 2, & -\gamma_2 - \gamma_1 - n + 2 \end{matrix} ; 1 \right) \right] \right\}. \quad (6.126) \end{aligned}$$

Wzory (6.124) oraz (6.126) porównano ze sobą dla dwunastu różnych stanów typu  $\mathcal{N}_{s_{1/2}}$  (włączając stan podstawowy) i stwierdzono, iż są one sobie tożsame dla *wszystkich* rozpatrywanych wartości  $n$  ze zbioru  $\{0, 1, 2, \dots, 10, 11\}$ , czyli do jedenastego stanu wzbudzonego włącznie.

## 7 Wyniki obliczeń numerycznych

### 7.1 Wprowadzenie

W niniejszym rozdziale zostaną przedstawione wyniki obliczeń numerycznych dla rozważanych w rozprawie parametrów atomowych. Wszystkie obliczenia wykonano przy pomocy programu *Mathematica* 9, wykorzystując wyrażenia zawierające funkcję hipergeometryczną  ${}_3F_2$  z jednostkowym argumentem. Każdą ze znalezionych wielkości fizycznych wyznaczono dla kilku wybranych stanów atomu (scharakteryzowanych za pomocą zestawu liczb kwantowych  $n$ ,  $\kappa$  oraz  $\mu$ ), a otrzymane wyniki zaprezentowano w formie graficznej – na wspólnych wykresach. Przyjęta w obliczeniach wartość odwrotności stałej struktury subtelnej Sommerfelda wynosi [95]:

$$\alpha^{-1} = 137.0359895. \quad (7.1)$$

Spośród trzech wielkości omawianych tej pracy magnetyzowalność jest najczęściej wykorzystywana do opisu własności magnetycznych układów. Dlatego też w niniejszym rozdziale dla wybranych stanów atomu przedstawiono dodatkowo zależność  $\chi(Z)$  w formie tablicowanej.

### 7.2 Magnetyzowalność

Na początek przypomnimy wyrażenie (4.98) opisujące dipolową podatność magnetyczną relatywistycznego atomu jednoelektronowego, znajdującego się w dowolnym dyskretnym stanie energetycznym:

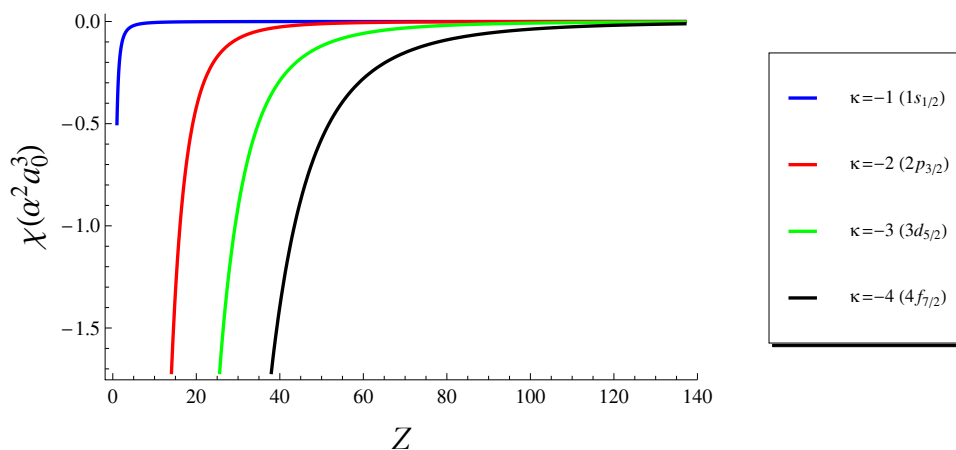
$$\begin{aligned} \chi = & \frac{\alpha^2 a_0^3}{Z^2} \frac{1}{(4\kappa^2 - 1)^2} \left[ \frac{-2\kappa^2 \mu^2}{N_{n\kappa}} \left[ N_{n\kappa}^2 (n + \gamma_\kappa)(5n^2 + 10n\gamma_\kappa + 2\gamma_\kappa^2 - 2\kappa^2 + 1) \right. \right. \\ & \left. \left. + 2\kappa^2 (n + \gamma_\kappa)^3 - \kappa N_{n\kappa} (3n^2 + 6n\gamma_\kappa + 4\gamma_\kappa^2 - \kappa^2) \right] + \frac{N_{n\kappa}(N_{n\kappa} - \kappa)}{128} \right. \\ & \times \sum_{\kappa'} \left[ \left( (2\kappa - 1)^2 - 4\mu^2 \right) (2\kappa + 1)^2 \delta_{\kappa', -\kappa+1} + \left( (2\kappa + 1)^2 - 4\mu^2 \right) (2\kappa - 1)^2 \delta_{\kappa', -\kappa-1} \right] \\ & \times \frac{1}{N_{n\kappa} + \kappa'} \left\{ 2(2n + 2\gamma_\kappa + 1) \left[ 3(\gamma_\kappa^2 - 1) - 5(n + \gamma_\kappa)(n + \gamma_\kappa + 1) \right] \right. \\ & \left. + \frac{n! \Gamma(n + 2\gamma_\kappa + 1)}{(N_{n\kappa} - \kappa)^2 (\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1) \Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)} \right. \\ & \times \sum_{k=0}^n \sum_{p=0}^n \frac{(-)^{k+p}}{k! p!} \frac{\Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + k + 2) \Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + p + 2)}{\Gamma(n - k + 1) \Gamma(k + 2\gamma_\kappa + 1) \Gamma(n - p + 1) \Gamma(p + 2\gamma_\kappa + 1)} \\ & \times \left[ 2(N_{n\kappa} - \kappa) + (n - k)(\kappa + \kappa') \right] \left[ 2(N_{n\kappa} - \kappa) + (n - p)(\kappa + \kappa') \right] \\ & \left. \times {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2, 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix} ; 1 \right) \right\}. \quad (7.2) \end{aligned}$$

Wykorzystując powyższy wzór, obliczono wartości magnetyzowalności (w jednostkach  $\alpha^2 a_0^3$ ) dla  $Z$  od 1 do 137 dla wybranych stanów atomu<sup>15</sup>. Na ich podstawie sporządzono kilka zestawów

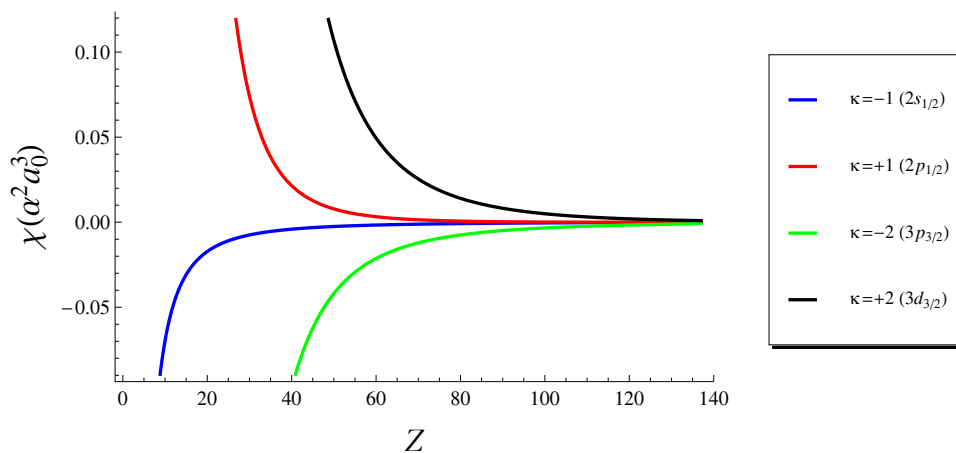
<sup>15</sup>Do każdego z rysunków prezentowanych w niniejszym rozdziale dołączona jest legenda, w której dodatkowo w nawiasach podano nazwy rozpatrywanych stanów atomu; zastosowana tutaj notacja obowiązuje w wielu publikacjach poświęconych fizyce atomowej (patrz np. Tabela 1 w pracy [96]).

wykresów zależności  $\chi(Z)$ . Zostały one pogrupowane ze względu na wartości przyjmowane przez poszczególne liczby kwantowe.

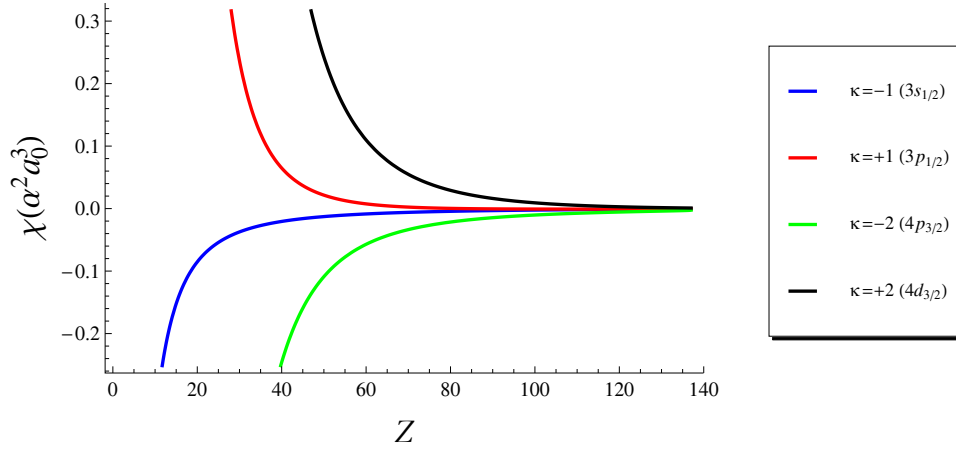
Pierwszą grupę stanowią wykresy funkcji  $\chi(Z)$  dla stanów o określonej radialnej liczbie kwantowej  $n$  oraz magnetycznej liczbie kwantowej  $\mu$ ; zmieniać będziemy liczbę kwantową  $\kappa$ .



Rys. 1: Magnetyzowalność  $\chi$  dla stanów z  $n = 0$  oraz  $\mu = \pm 1/2$  jako funkcja liczby  $Z$ .



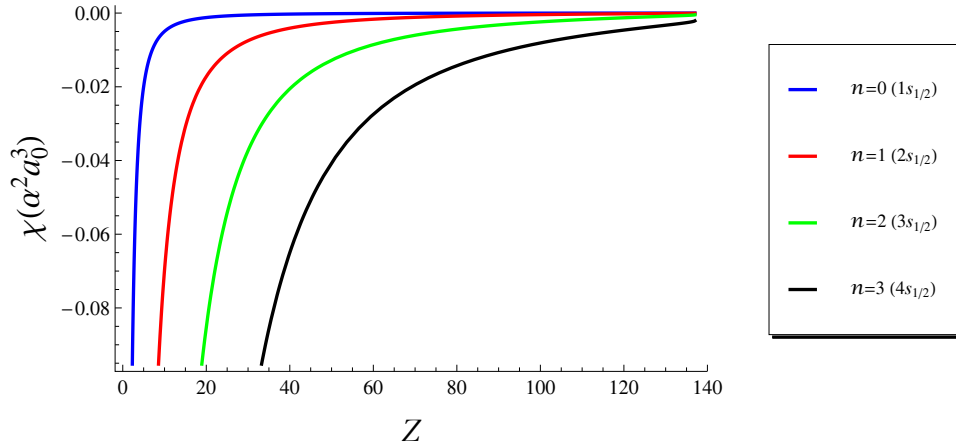
Rys. 2: Magnetyzowalność  $\chi$  dla stanów z  $n = 1$  oraz  $\mu = \pm 1/2$  jako funkcja liczby  $Z$ .



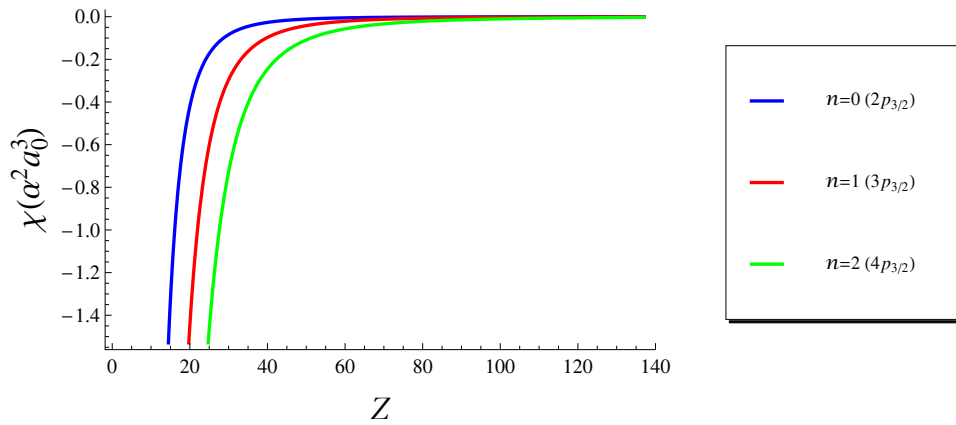
Rys. 3: Magnetyzowalność  $\chi$  dla stanów z  $n = 2$  oraz  $\mu = \pm 1/2$  jako funkcja liczby  $Z$ .

Widać, iż dla stanów z symetrią  $\kappa > 0$  magnetyzowalność przyjmuje wartości dodatnie, zaś dla tych z symetrią  $\kappa < 0$  – wartości ujemne. Jednak w przypadku stanu podstawowego istnieje pewna granica krytyczna  $Z_c = 130$ , taka że dla  $Z < Z_c$  magnetyzowalność jest ujemna, zaś dla  $Z \geq Z_c$  przyjmuje ona wartości dodatnie. Zmianę znaku  $\chi$  dla stanu podstawowego, wskazaną również przez Rutkowskiego i Poszwę w pracy [72], można zaobserwować, analizując Tabelę 1.

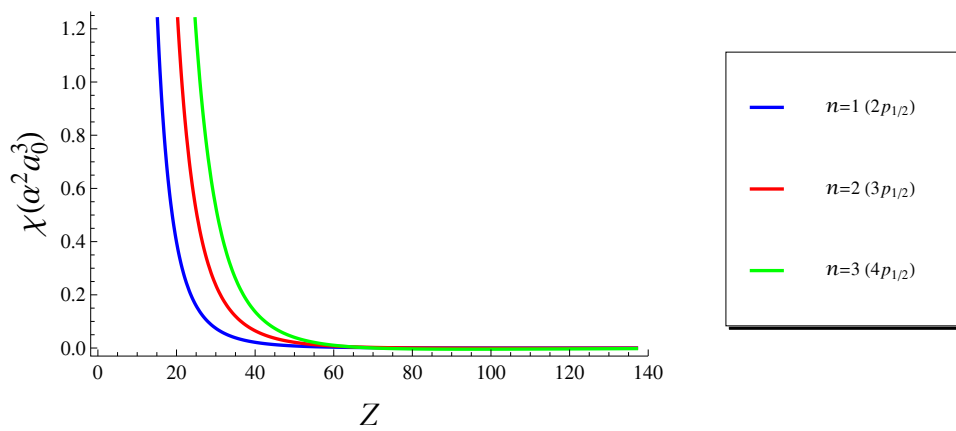
Kolejny zestaw (rysunki 4–7) tworzą wykresy  $\chi(Z)$  dla stanów o określonych liczbach kwantowych  $\kappa$  oraz  $\mu$ ; tym razem zmieniać będziemy radialną liczbę kwantową  $n$ .



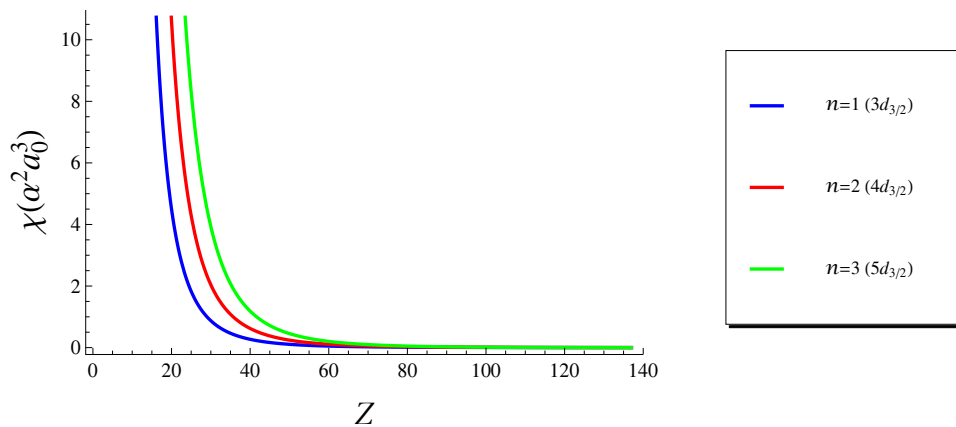
Rys. 4: Magnetyzowalność  $\chi$  dla stanów z  $\kappa = -1$  oraz  $\mu = \pm 1/2$  jako funkcja liczby  $Z$ .



Rys. 5: Magnetyzowalność  $\chi$  dla stanów  $z \kappa = -2$  oraz  $\mu = \pm 1/2$  jako funkcja liczby  $Z$ .



Rys. 6: Magnetyzowalność  $\chi$  dla stanów  $z \kappa = +1$  oraz  $\mu = \pm 1/2$  jako funkcja liczby  $Z$ .



Rys. 7: Magnetyzowalność  $\chi$  dla stanów  $z \kappa = +2$  oraz  $\mu = \pm 1/2$  jako funkcja liczby  $Z$ .

Można zauważyć, że im wyższy stan wzbudzony, tym łagodniej magnetyzowalność dąży do zera wraz ze wzrostem liczby  $Z$ .

Tabela 1: Zależność magnetyzowalności  $\chi$  od liczby atomowej  $Z$  dla atomu znajdującego się w stanie podstawowym  $1s_{1/2}$ ,  $\mu = \pm 1/2$ . Notacja  $a(b)$  oznacza  $a \times 10^b$ . Wartości  $\chi(Z)$  dla tego stanu, podane w pracach [50, 51, 54], całkowicie pokrywają się z odpowiednimi liczbami zawartymi w niniejszej tabeli.

$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$	$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$	$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$
1	-4.99964499362(-1)	47	-1.91453971331(-4)	93	-2.48592058683(-5)
2	-1.24964500171(-1)	48	-1.82147815930(-4)	94	-2.36968643155(-5)
3	-5.55200570764(-2)	49	-1.73407823157(-4)	95	-2.25739395421(-5)
4	-3.12145034101(-2)	50	-1.65189208158(-4)	96	-2.14888558849(-5)
5	-1.99645058396(-2)	51	-1.57451533715(-4)	97	-2.04401201647(-5)
6	-1.38533976983(-2)	52	-1.50158213498(-4)	98	-1.94263167646(-5)
7	-1.01685939527(-2)	53	-1.43276080303(-4)	99	-1.84461030637(-5)
8	-7.77701637169(-3)	54	-1.36775009730(-4)	100	-1.74982051981(-5)
9	-6.13736047103(-3)	55	-1.30627591309(-4)	101	-1.65814141261(-5)
10	-4.96452610002(-3)	56	-1.24808840374(-4)	102	-1.56945819724(-5)
11	-4.09676318267(-3)	57	-1.19295944994(-4)	103	-1.48366186354(-5)
12	-3.43676022076(-3)	58	-1.14068043191(-4)	104	-1.40064886344(-5)
13	-2.92312464481(-3)	59	-1.09106026358(-4)	105	-1.32032081847(-5)
14	-2.51557248044(-3)	60	-1.04392365416(-4)	106	-1.24258424832(-5)
15	-2.18678214892(-3)	61	-9.99109567617(-5)	107	-1.16735031923(-5)
16	-1.91769332724(-3)	62	-9.56469854587(-5)	108	-1.09453461110(-5)
17	-1.69468108103(-3)	63	-9.15868035163(-5)	109	-1.02405690227(-5)
18	-1.50779664689(-3)	64	-8.77178213712(-5)	110	-9.55840971165(-6)
19	-1.34963836614(-3)	65	-8.40284109676(-5)	111	-8.89814414051(-6)
20	-1.21460740953(-3)	66	-8.05078190388(-5)	112	-8.25908478477(-6)
21	-1.09840540346(-3)	67	-7.71460893813(-5)	113	-7.64057911961(-6)
22	-9.97688104926(-4)	68	-7.39339930713(-5)	114	-7.04200825810(-6)
23	-9.09822089819(-4)	69	-7.08629657100(-5)	115	-6.46278574124(-6)
24	-8.32710868316(-4)	70	-6.79250509002(-5)	116	-5.90235648315(-6)
25	-7.64668676278(-4)	71	-6.51128492570(-5)	117	-5.36019587800(-6)
26	-7.04327568136(-4)	72	-6.24194723422(-5)	118	-4.83580907924(-6)
27	-6.50568134873(-4)	73	-5.98385009867(-5)	119	-4.32873046698(-6)
28	-6.02467222658(-4)	74	-5.73639475301(-5)	120	-3.83852332624(-6)
29	-5.59258046402(-4)	75	-5.49902215618(-5)	121	-3.36477976821(-6)
30	-5.20299450152(-4)	76	-5.27120987985(-5)	122	-2.90712093935(-6)
31	-4.85051993326(-4)	77	-5.05246927740(-5)	123	-2.46519758161(-6)
32	-4.53059183950(-4)	78	-4.84234290551(-5)	124	-2.03869103337(-6)
33	-4.23932630700(-4)	79	-4.64040217292(-5)	125	-1.62731479968(-6)
34	-3.97340205698(-4)	80	-4.44624519384(-5)	126	-1.23081688055(-6)
35	-3.72996540023(-4)	81	-4.25949482592(-5)	127	-8.48983139756(-7)
36	-3.50655340993(-4)	82	-4.07979687491(-5)	128	-4.81642150621(-7)
37	-3.30103142805(-4)	83	-3.90681845003(-5)	129	-1.28672216194(-7)
38	-3.11154192860(-4)	84	-3.74024645589(-5)	130	2.09988272644(-7)
39	-2.93646243879(-4)	85	-3.57978620809(-5)	131	5.34325095226(-7)
40	-2.77437072986(-4)	86	-3.42516016111(-5)	132	8.44223233198(-7)
41	-2.62401587691(-4)	87	-3.27610673842(-5)	133	1.13942482211(-6)
42	-2.48429408332(-4)	88	-3.13237925528(-5)	134	1.41945202662(-6)
43	-2.35422839411(-4)	89	-2.99374492630(-5)	135	1.68344632581(-6)
44	-2.23295159922(-4)	90	-2.85998395009(-5)	136	1.92975529439(-6)
45	-2.11969176620(-4)	91	-2.73088866435(-5)	137	2.15458533468(-6)
46	-2.01375994997(-4)	92	-2.60626276544(-5)		

Tabela 2: Zależność magnetyzowalności  $\chi$  od liczby atomowej  $Z$  dla atomu znajdującego się w stanie  $2s_{1/2}$ ,  $\mu = \pm 1/2$ . Notacja  $a(b)$  oznacza  $a \times 10^b$ .

$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$	$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$	$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$
1	-6.99972264911	47	-2.89130004015(-3)	93	-5.29513201222(-4)
2	-1.74972264896	48	-2.76062625107(-3)	94	-5.12260852453(-4)
3	-7.77500426498(-1)	49	-2.63786941928(-3)	95	-4.95540444229(-4)
4	-4.37222648379(-1)	50	-2.52240247365(-3)	96	-4.79329336280(-4)
5	-2.79722647937(-1)	51	-2.41365920696(-3)	97	-4.63606007686(-4)
6	-1.94167091838(-1)	52	-2.31112732135(-3)	98	-4.48349984904(-4)
7	-1.42579789603(-1)	53	-2.21434238352(-3)	99	-4.33541774415(-4)
8	-1.09097645990(-1)	54	-2.12288255604(-3)	100	-4.19162799559(-4)
9	-8.61423982104(-2)	55	-2.03636399312(-3)	101	-4.05195341137(-4)
10	-6.97226441433(-2)	56	-1.95443680656(-3)	102	-3.91622481425(-4)
11	-5.75738827134(-2)	57	-1.87678152279(-3)	103	-3.78428051200(-4)
12	-4.83337529323(-2)	58	-1.80310596370(-3)	104	-3.65596579447(-4)
13	-4.11427588131(-2)	59	-1.73314249430(-3)	105	-3.53113245383(-4)
14	-3.54369246987(-2)	60	-1.66664558883(-3)	106	-3.40963832458(-4)
15	-3.08337484699(-2)	61	-1.60338967379(-3)	107	-3.29134683957(-4)
16	-2.70663855862(-2)	62	-1.54316721251(-3)	108	-3.17612659856(-4)
17	-2.39440869468(-2)	63	-1.48578700074(-3)	109	-3.06385094497(-4)
18	-2.13275698432(-2)	64	-1.43107264729(-3)	110	-2.95439754668(-4)
19	-1.91132110313(-2)	65	-1.37886121685(-3)	111	-2.84764797575(-4)
20	-1.72226268778(-2)	66	-1.32900201577(-3)	112	-2.74348728128(-4)
21	-1.55956401273(-2)	67	-1.28135550358(-3)	113	-2.64180354860(-4)
22	-1.41854313509(-2)	68	-1.23579231577(-3)	114	-2.54248743655(-4)
23	-1.29551325831(-2)	69	-1.19219238498(-3)	115	-2.44543168233(-4)
24	-1.18753929367(-2)	70	-1.15044414929(-3)	116	-2.35053056109(-4)
25	-1.09226116827(-2)	71	-1.11044383814(-3)	117	-2.25767928339(-4)
26	-1.00776375505(-2)	72	-1.07209482696(-3)	118	-2.16677330840(-4)
27	-9.32479877975(-3)	73	-1.03530705340(-3)	119	-2.07770754343(-4)
28	-8.65117118089(-3)	74	-9.99996488232(-4)	120	-1.99037538972(-4)
29	-8.04601972531(-3)	75	-9.66084655322(-4)	121	-1.90466757879(-4)
30	-7.50036819058(-3)	76	-9.33498195451(-4)	122	-1.82047072095(-4)
31	-7.00666436775(-3)	77	-9.02168469483(-4)	123	-1.73766545255(-4)
32	-6.55851732667(-3)	78	-8.72031196858(-4)	124	-1.65612401458(-4)
33	-6.15048954453(-3)	79	-8.43026125847(-4)	125	-1.57570700884(-4)
34	-5.77793118490(-3)	80	-8.15096732424(-4)	126	-1.49625893615(-4)
35	-5.43684703489(-3)	81	-7.88189944915(-4)	127	-1.41760187791(-4)
36	-5.12378894709(-3)	82	-7.62255891938(-4)	128	-1.33952625163(-4)
37	-4.83576834840(-3)	83	-7.37247671389(-4)	129	-1.26177676331(-4)
38	-4.57018464857(-3)	84	-7.13121138462(-4)	130	-1.18403008041(-4)
39	-4.32476632976(-3)	85	-6.89834710937(-4)	131	-1.10585733878(-4)
40	-4.09752221369(-3)	86	-6.67349190096(-4)	132	-1.02665664295(-4)
41	-3.88670094524(-3)	87	-6.45627595864(-4)	133	-9.45519851476(-5)
42	-3.69075714668(-3)	88	-6.24635014834(-4)	134	-8.60933661414(-5)
43	-3.50832301624(-3)	89	-6.04338460050(-4)	135	-7.69963822053(-5)
44	-3.33818439269(-3)	90	-5.84706741463(-4)	136	-6.65087093457(-5)
45	-3.17926050093(-3)	91	-5.65710346116(-4)	137	-4.90325647932(-5)
46	-3.03058674572(-3)	92	-5.47321327207(-4)		



Tabela 3: Zależność magnetyzowalności  $\chi$  od liczby atomowej  $Z$  dla atomu znajdującego się w stanie  $2p_{1/2}$ ,  $\mu = \pm 1/2$ . Notacja  $a(b)$  oznacza  $a \times 10^b$ .

$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$	$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$	$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$
1	6.67616221345(+4)	47	1.04149246031(-2)	93	2.07509007952(-4)
2	4.17116407371(+3)	48	9.45288711286(-3)	94	1.88873521788(-4)
3	8.23460556052(+2)	49	8.59152764779(-3)	95	1.71586427206(-4)
4	2.60338569906(+2)	50	7.81880207625(-3)	96	1.55553099892(-4)
5	1.06524398074(+2)	51	7.12429573833(-3)	97	1.40686134950(-4)
6	5.13067528254(+1)	52	6.49897765079(-3)	98	1.26904743335(-4)
7	2.76526902462(+1)	53	5.93499552509(-3)	99	1.14134203900(-4)
8	1.61815071564(+1)	54	5.42550421880(-3)	100	1.02305365512(-4)
9	1.00822466516(+1)	55	4.96452168094(-3)	101	9.13541942773(-5)
10	6.60046515782	56	4.54680759047(-3)	102	8.12213614507(-5)
11	4.49727432952	57	4.16776079246(-3)	103	7.18518681010(-5)
12	3.16693176311	58	3.82333235852(-3)	104	6.31947029985(-5)
13	2.29261644553	59	3.50995167689(-3)	105	5.52025305864(-5)
14	1.69914665968	60	3.22446344293(-3)	106	4.78314062235(-5)
15	1.28502838648	61	2.96407379704(-3)	107	4.10405161847(-5)
16	9.89073498695(-1)	62	2.72630416153(-3)	108	3.47919401744(-5)
17	7.73105802264(-1)	63	2.50895157596(-3)	109	2.90504343507(-5)
18	6.12583724035(-1)	64	2.31005453306(-3)	110	2.37832330726(-5)
19	4.91310409018(-1)	65	2.12786348269(-3)	111	1.89598677874(-5)
20	3.98344275277(-1)	66	1.96081530806(-3)	112	1.45520016564(-5)
21	3.26138514721(-1)	67	1.80751119020(-3)	113	1.05332786936(-5)
22	2.69389662318(-1)	68	1.66669736980(-3)	114	6.87918635611(-6)
23	2.24307336137(-1)	69	1.53724839247(-3)	115	3.56693069148(-6)
24	1.88140755516(-1)	70	1.41815248741(-3)	116	5.75323314454(-7)
25	1.58865543641(-1)	71	1.30849878296(-3)	117	-2.11532033360(-6)
26	1.34972745219(-1)	72	1.20746610704(-3)	118	-4.52327178707(-6)
27	1.15324312092(-1)	73	1.11431315789(-3)	119	-6.66546952311(-6)
28	9.90525905629(-2)	74	1.02836986218(-3)	120	-8.55758789370(-6)
29	8.54894202826(-2)	75	9.49029763704(-4)	121	-1.02140944229(-5)
30	7.41154649290(-2)	76	8.75743308574(-4)	122	-1.16482943151(-5)
31	6.45235612912(-2)	77	8.08011911482(-4)	123	-1.28723602183(-5)
32	5.63919088292(-2)	78	7.45382703905(-4)	124	-1.38973440830(-5)
33	4.94642511446(-2)	79	6.87443878613(-4)	125	-1.47331660764(-5)
34	4.35350818619(-2)	80	6.33820556550(-4)	126	-1.53885724657(-5)
35	3.84384994491(-2)	81	5.84171112083(-4)	127	-1.58710492502(-5)
36	3.40397384432(-2)	82	5.38183901095(-4)	128	-1.61866692627(-5)
37	3.02286821128(-2)	83	4.95574343704(-4)	129	-1.63398336747(-5)
38	2.69148549524(-2)	84	4.56082319638(-4)	130	-1.63328357974(-5)
39	2.40235295513(-2)	85	4.19469839669(-4)	131	-1.61651051665(-5)
40	2.14926792043(-2)	86	3.85518961163(-4)	132	-1.58318280186(-5)
41	1.92705771370(-2)	87	3.54029919812(-4)	133	-1.53212187860(-5)
42	1.73138935735(-2)	88	3.24819453061(-4)	134	-1.46084291919(-5)
43	1.55861786486(-2)	89	2.97719293769(-4)	135	-1.36390908592(-5)
44	1.40566462551(-2)	90	2.72574815243(-4)	136	-1.22662850197(-5)
45	1.26991940091(-2)	91	2.49243811034(-4)	137	-9.39848208226(-6)
46	1.14916095387(-2)	92	2.27595394892(-4)		

Tabela 4: Zależność magnetyzowalności  $\chi$  od liczby atomowej  $Z$  dla atomu znajdującego się w stanie  $2p_{3/2}$ ,  $\mu = \pm 1/2$ . Notacja  $a(b)$  oznacza  $a \times 10^b$ .

$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$	$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$	$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$
1	-6.67706218447(+4)	47	-1.41985781452(-2)	93	-9.52024617784(-4)
2	-4.17341378393(+3)	48	-1.30685053821(-2)	94	-9.11096662009(-4)
3	-8.24460266274(+2)	49	-1.20492888027(-2)	95	-8.72196518921(-4)
4	-2.60900780126(+2)	50	-1.11280780225(-2)	96	-8.35200183716(-4)
5	-1.06884108291(+2)	51	-1.02937303811(-2)	97	-7.99992286964(-4)
6	-5.15564630388(+1)	52	-9.53655620611(-3)	98	-7.66465395955(-4)
7	-2.78360739252(+1)	53	-8.84810605905(-3)	99	-7.34519377235(-4)
8	-1.63218423616(+1)	54	-8.22099241257(-3)	100	-7.04060814202(-4)
9	-1.01930679630(+1)	55	-7.64873967608(-3)	101	-6.75002474170(-4)
10	-6.69017535244	56	-7.12565764760(-3)	102	-6.47262819943(-4)
11	-4.57136468320	57	-6.64673439456(-3)	103	-6.20765561357(-4)
12	-3.22914194466	58	-6.20754530380(-3)	104	-5.95439242711(-4)
13	-2.34558105747	59	-5.80417563293(-3)	105	-5.71216862326(-4)
14	-1.74477519297	60	-5.43315437140(-3)	106	-5.48035520798(-4)
15	-1.32473854365	61	-5.09139760514(-3)	107	-5.25836094742(-4)
16	-1.02393989641	62	-4.77615989052(-3)	108	-5.04562933029(-4)
17	-8.03957808364(-1)	63	-4.48499239843(-3)	109	-4.84163572629(-4)
18	-6.40071628579(-1)	64	-4.21570679637(-3)	110	-4.64588471291(-4)
19	-5.15951272176(-1)	65	-3.96634400762(-3)	111	-4.45790754261(-4)
20	-4.20554378259(-1)	66	-3.73514712598(-3)	112	-4.27725972197(-4)
21	-3.46256767975(-1)	67	-3.52053788074(-3)	113	-4.10351867258(-4)
22	-2.87694779879(-1)	68	-3.32109614199(-3)	114	-3.93628144043(-4)
23	-2.41030630364(-1)	69	-3.13554203572(-3)	115	-3.77516241621(-4)
24	-2.03475801908(-1)	70	-2.96272030456(-3)	116	-3.61979102159(-4)
25	-1.72975573895(-1)	71	-2.80158660488(-3)	117	-3.46980930692(-4)
26	-1.47996367967(-1)	72	-2.65119547745(-3)	118	-3.32486939060(-4)
27	-1.27379986552(-1)	73	-2.51068976727(-3)	119	-3.18463064955(-4)
28	-1.10242159130(-1)	74	-2.37929130131(-3)	120	-3.04875653836(-4)
29	-9.59009231666(-2)	75	-2.25629265969(-3)	121	-2.91691086866(-4)
30	-8.38254014740(-2)	76	-2.14104989983(-3)	122	-2.78875330960(-4)
31	-7.35987208507(-2)	77	-2.03297611227(-3)	123	-2.66393376236(-4)
32	-6.48908638385(-2)	78	-1.93153570367(-3)	124	-2.54208509090(-4)
33	-5.74385829294(-2)	79	-1.83623931710(-3)	125	-2.42281341440(-4)
34	-5.10303933778(-2)	80	-1.74663931133(-3)	126	-2.30568470440(-4)
35	-4.54952569401(-2)	81	-1.66232573168(-3)	127	-2.19020562738(-4)
36	-4.06939748108(-2)	82	-1.58292271354(-3)	128	-2.07579512156(-4)
37	-3.65125877972(-2)	83	-1.50808526763(-3)	129	-1.96174043565(-4)
38	-3.28572767667(-2)	84	-1.43749640225(-3)	130	-1.84712577912(-4)
39	-2.96503937745(-2)	85	-1.37086454376(-3)	131	-1.73070961278(-4)
40	-2.68273520170(-2)	86	-1.30792122124(-3)	132	-1.61069773468(-4)
41	-2.43341729651(-2)	87	-1.24841898552(-3)	133	-1.48428183314(-4)
42	-2.21255399157(-2)	88	-1.19212953639(-3)	134	-1.34656847602(-4)
43	-2.01632443876(-2)	89	-1.13884203507(-3)	135	-1.18753971243(-4)
44	-1.84149391951(-2)	90	-1.08836158171(-3)	136	-9.79667715907(-5)
45	-1.68531323712(-2)	91	-1.04050784000(-3)	137	-4.90305759039(-5)
46	-1.54543713347(-2)	92	-9.95113793208(-4)		

Tabela 5: Zależność magnetyzowalności  $\chi$  od liczby atomowej  $Z$  dla atomu znajdującego się w stanie  $2p_{3/2}$ ,  $\mu = \pm 3/2$ . Notacja  $a(b)$  oznacza  $a \times 10^b$ .

$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$	$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$	$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$
1	-5.99986154687	47	-2.57863122521(-3)	93	-5.58950797138(-4)
2	-1.49986154812	48	-2.46667670391(-3)	94	-5.44350939049(-4)
3	-6.66528216866(-1)	49	-2.36150963845(-3)	95	-5.30213230496(-4)
4	-3.74861553109(-1)	50	-2.26259256980(-3)	96	-5.16518559311(-4)
5	-2.39861556850(-1)	51	-2.16944020922(-3)	97	-5.03248793612(-4)
6	-1.66528228089(-1)	52	-2.08161347731(-3)	98	-4.90386722098(-4)
7	-1.22310546419(-1)	53	-1.99871432279(-3)	99	-4.77915998546(-4)
8	-9.36115730630(-2)	54	-1.92038120656(-3)	100	-4.65821090171(-4)
9	-7.39356542054(-2)	55	-1.84628515523(-3)	101	-4.54087229546(-4)
10	-5.98615880319(-2)	56	-1.77612630354(-3)	102	-4.42700369812(-4)
11	-4.94483736246(-2)	57	-1.70963085747(-3)	103	-4.31647142910(-4)
12	-4.15282729978(-2)	58	-1.64654842084(-3)	104	-4.20914820615(-4)
13	-3.53645753102(-2)	59	-1.58664963621(-3)	105	-4.10491278152(-4)
14	-3.04738728609(-2)	60	-1.52972409878(-3)	106	-4.00364960209(-4)
15	-2.65283066962(-2)	61	-1.47557850767(-3)	107	-3.90524849154(-4)
16	-2.32991529304(-2)	62	-1.42403502417(-3)	108	-3.80960435313(-4)
17	-2.06229123406(-2)	63	-1.37492981098(-3)	109	-3.71661689140(-4)
18	-1.83801997550(-2)	64	-1.32811172997(-3)	110	-3.62619035155(-4)
19	-1.64821952576(-2)	65	-1.28344117906(-3)	111	-3.53823327514(-4)
20	-1.48617128850(-2)	66	-1.24078905150(-3)	112	-3.45265827104(-4)
21	-1.34671721407(-2)	67	-1.20003580311(-3)	113	-3.36938180043(-4)
22	-1.22584420948(-2)	68	-1.16107061477(-3)	114	-3.28832397507(-4)
23	-1.12039216432(-2)	69	-1.12379063930(-3)	115	-3.20940836763(-4)
24	-1.02784528927(-2)	70	-1.08810032306(-3)	116	-3.13256183360(-4)
25	-9.46180665719(-3)	71	-1.05391079400(-3)	117	-3.05771434365(-4)
26	-8.73756757303(-3)	72	-1.02113930875(-3)	118	-2.98479882598(-4)
27	-8.09230271419(-3)	73	-9.89708752423(-4)	119	-2.91375101791(-4)
28	-7.51493421610(-3)	74	-9.59547185299(-4)	120	-2.84450932603(-4)
29	-6.99626063833(-3)	75	-9.30587431657(-4)	121	-2.77701469449(-4)
30	-6.52858808922(-3)	76	-9.02766706151(-4)	122	-2.71121048074(-4)
31	-6.10544326072(-3)	77	-8.76026273946(-4)	123	-2.64704233837(-4)
32	-5.72134822723(-3)	78	-8.50311141164(-4)	124	-2.58445810651(-4)
33	-5.37164227011(-3)	79	-8.25569772577(-4)	125	-2.52340770541(-4)
34	-5.05233983115(-3)	80	-8.01753833846(-4)	126	-2.46384303779(-4)
35	-4.76001645872(-3)	81	-7.78817955900(-4)	127	-2.40571789563(-4)
36	-4.49171661517(-3)	82	-7.56719519304(-4)	128	-2.34898787200(-4)
37	-4.24487868445(-3)	83	-7.35418456697(-4)	129	-2.29361027772(-4)
38	-4.01727360797(-3)	84	-7.14877071605(-4)	130	-2.23954406240(-4)
39	-3.80695439002(-3)	85	-6.95059872075(-4)	131	-2.18674973979(-4)
40	-3.61221432676(-3)	86	-6.75933417781(-4)	132	-2.13518931698(-4)
41	-3.43155227790(-3)	87	-6.57466179353(-4)	133	-2.08482622740(-4)
42	-3.26364365608(-3)	88	-6.39628408836(-4)	134	-2.03562526721(-4)
43	-3.10731608282(-3)	89	-6.22392020280(-4)	135	-1.98755253510(-4)
44	-2.96152887247(-3)	90	-6.05730479561(-4)	136	-1.94057537507(-4)
45	-2.82535567134(-3)	91	-5.89618702636(-4)	137	-1.89466232216(-4)
46	-2.69796970950(-3)	92	-5.74032961491(-4)		

Tabela 6: Zależność magnetyzowalności  $\chi$  od liczby atomowej  $Z$  dla atomu znajdującego się w stanie  $3s_{1/2}$ ,  $\mu = \pm 1/2$ . Notacja  $a(b)$  oznacza  $a \times 10^b$ .

$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$	$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$	$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$
1	-3.44989970462(+1)	47	-1.46058958137(-2)	93	-2.93878700417(-3)
2	-8.62399703486	48	-1.39615028997(-2)	94	-2.85287537012(-3)
3	-3.83233034921	49	-1.33561207875(-2)	95	-2.76956829449(-3)
4	-2.15524698929	50	-1.27866588439(-2)	96	-2.68875371900(-3)
5	-1.37899695508	51	-1.22503264053(-2)	97	-2.61032507344(-3)
6	-9.57330246581(-1)	52	-1.17445985016(-2)	98	-2.53418091841(-3)
7	-7.03078496418(-1)	53	-1.12671860640(-2)	99	-2.46022461061(-3)
8	-5.38059306614(-1)	54	-1.08160099579(-2)	100	-2.38836398846(-3)
9	-4.24922667696(-1)	55	-1.03891782902(-2)	101	-2.31851107586(-3)
10	-3.43996669207(-1)	56	-9.98496652749(-3)	102	-2.25058180236(-3)
11	-2.84120555836(-1)	57	-9.60180003376(-3)	103	-2.18449573769(-3)
12	-2.38579834130(-1)	58	-9.23823869748(-3)	104	-2.12017583888(-3)
13	-2.03138416712(-1)	59	-8.89296336644(-3)	105	-2.05754820815(-3)
14	-1.75016709261(-1)	60	-8.56476385189(-3)	106	-1.99654185973(-3)
15	-1.52329522744(-1)	61	-8.25252829762(-3)	107	-1.93708849370(-3)
16	-1.33761694771(-1)	62	-7.95523373940(-3)	108	-1.87912227477(-3)
17	-1.18373104755(-1)	63	-7.67193770478(-3)	109	-1.82257961392(-3)
18	-1.05477287902(-1)	64	-7.40177072430(-3)	110	-1.76739895034(-3)
19	-9.45635296338(-2)	65	-7.14392964270(-3)	111	-1.71352053100(-3)
20	-8.52455105946(-2)	66	-6.89767163396(-3)	112	-1.66088618453(-3)
21	-7.72266428623(-2)	67	-6.66230883682(-3)	113	-1.60943908551(-3)
22	-7.02761735153(-2)	68	-6.43720353810(-3)	114	-1.55912350452(-3)
23	-6.42123961287(-2)	69	-6.22176384106(-3)	115	-1.50988453788(-3)
24	-5.88906527346(-2)	70	-6.01543976349(-3)	116	-1.46166780974(-3)
25	-5.41946254284(-2)	71	-5.81771971759(-3)	117	-1.41441913670(-3)
26	-5.00299257783(-2)	72	-5.62812732943(-3)	118	-1.36808414223(-3)
27	-4.63193143652(-2)	73	-5.44621856112(-3)	119	-1.32260780384(-3)
28	-4.29990933689(-2)	74	-5.27157910296(-3)	120	-1.27793390973(-3)
29	-4.00163544031(-2)	75	-5.10382200720(-3)	121	-1.23400439278(-3)
30	-3.73268574821(-2)	76	-4.94258553794(-3)	122	-1.19075849631(-3)
31	-3.48933809710(-2)	77	-4.78753121491(-3)	123	-1.14813170602(-3)
32	-3.26844266791(-2)	78	-4.63834203131(-3)	124	-1.10605435111(-3)
33	-3.06731953502(-2)	79	-4.49472082824(-3)	125	-1.06444972799(-3)
34	-2.88367698955(-2)	80	-4.35638880996(-3)	126	-1.02323151749(-3)
35	-2.71554595833(-2)	81	-4.22308418639(-3)	127	-9.82300127029(-4)
36	-2.56122699316(-2)	82	-4.09456093016(-3)	128	-9.41537339868(-4)
37	-2.41924715019(-2)	83	-3.97058763740(-3)	129	-9.00798188899(-4)
38	-2.28832470548(-2)	84	-3.85094648238(-3)	130	-8.59898050602(-4)
39	-2.16734012065(-2)	85	-3.73543225705(-3)	131	-8.18590992412(-4)
40	-2.05531202447(-2)	86	-3.62385148765(-3)	132	-7.76530831351(-4)
41	-1.95137724409(-2)	87	-3.51602162130(-3)	133	-7.33194367179(-4)
42	-1.85477412394(-2)	88	-3.41177027606(-3)	134	-6.87709333256(-4)
43	-1.76482852779(-2)	89	-3.31093454879(-3)	135	-6.38385440164(-4)
44	-1.68094204208(-2)	90	-3.21336037558(-3)	136	-5.80895728560(-4)
45	-1.60258199336(-2)	91	-3.11890193999(-3)	137	-4.83147083491(-4)
46	-1.52927296802(-2)	92	-3.02742112493(-3)		

Tabela 7: Zależność magnetyzowalności  $\chi$  od liczby atomowej  $Z$  dla atomu znajdującego się w stanie  $3p_{1/2}$ ,  $\mu = \pm 1/2$ . Notacja  $a(b)$  oznacza  $a \times 10^b$ .

$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$	$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$	$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$
1	2.25307933172(+5)	47	2.96150100251(-2)	93	-5.82166806982(-4)
2	1.40745434671(+4)	48	2.66025551015(-2)	94	-6.13495744261(-4)
3	2.77778599319(+3)	49	2.39157107088(-2)	95	-6.41217806804(-4)
4	8.77858954325(+2)	50	2.15149514368(-2)	96	-6.65611738920(-4)
5	3.59018311920(+2)	51	1.93661422958(-2)	97	-6.86933929621(-4)
6	1.72812046276(+2)	52	1.74397216178(-2)	98	-7.05420321763(-4)
7	9.30720123608(+1)	53	1.57100200733(-2)	99	-7.21288141887(-4)
8	5.44167583188(+1)	54	1.41546911340(-2)	100	-7.34737468813(-4)
9	3.38728823189(+1)	55	1.27542331379(-2)	101	-7.45952657011(-4)
10	2.21512885609(+1)	56	1.14915869219(-2)	102	-7.55103629019(-4)
11	1.50747861099(+1)	57	1.03517960165(-2)	103	-7.62347049633(-4)
12	1.06014352505(+1)	58	9.32171881341(-3)	104	-7.67827393163(-4)
13	7.66350499388	59	8.38978405073(-3)	105	-7.71677913849(-4)
14	5.67076750132	60	7.54578251687(-3)	106	-7.74021528414(-4)
15	4.28136577468	61	6.78068913042(-3)	107	-7.74971618711(-4)
16	3.28926798099	62	6.08651057141(-3)	108	-7.74632761578(-4)
17	2.56597122416	63	5.45615446689(-3)	109	-7.73101392141(-4)
18	2.02889724297	64	4.88331680928(-3)	110	-7.70466406095(-4)
19	1.62356731015	65	4.36238483898(-3)	111	-7.66809705780(-4)
20	1.31319402403	66	3.88835307701(-3)	112	-7.62206694221(-4)
21	1.07241472488	67	3.45675056778(-3)	113	-7.56726720652(-4)
22	8.83414103061(-1)	68	3.06357770116(-3)	114	-7.50433480420(-4)
23	7.33465674657(-1)	69	2.70525123989(-3)	115	-7.43385371519(-4)
24	6.13338141957(-1)	70	2.37855639091(-3)	116	-7.35635809301(-4)
25	5.16241517864(-1)	71	2.08060493741(-3)	117	-7.27233500153(-4)
26	4.37117390977(-1)	72	1.80879859627(-3)	118	-7.18222674014(-4)
27	3.72152927346(-1)	73	1.56079689067(-3)	119	-7.08643274517(-4)
28	3.18442951599(-1)	74	1.33448893131(-3)	120	-6.98531104154(-4)
29	2.73751656165(-1)	75	1.12796858849(-3)	121	-6.87917920028(-4)
30	2.36342363373(-1)	76	9.39512610939(-4)	122	-6.76831473244(-4)
31	2.04854428444(-1)	77	7.67561310548(-4)	123	-6.65295481513(-4)
32	1.78213224992(-1)	78	6.10701485165(-4)	124	-6.53329519430(-4)
33	1.55563629918(-1)	79	4.67651297054(-4)	125	-6.40948803366(-4)
34	1.36220390182(-1)	80	3.37246863105(-4)	126	-6.28163836322(-4)
35	1.19630746222(-1)	81	2.18430345794(-4)	127	-6.14979859844(-4)
36	1.05346042554(-1)	82	1.10239362042(-4)	128	-6.01396030330(-4)
37	9.29999897564(-2)	83	1.17975512010(-5)	129	-5.87404186731(-4)
38	8.22918924116(-2)	84	-7.76938358938(-5)	130	-5.72986988021(-4)
39	7.29736153351(-2)	85	-1.58963447088(-4)	131	-5.58115035625(-4)
40	6.48393859475(-2)	86	-2.32676543235(-4)	132	-5.42742280094(-4)
41	5.77177642548(-2)	87	-2.99441008405(-4)	133	-5.26798369944(-4)
42	5.14652810900(-2)	88	-3.59812736252(-4)	134	-5.10175272115(-4)
43	4.59613688295(-2)	89	-4.14300462924(-4)	135	-4.92703237724(-4)
44	4.11042997602(-2)	90	-4.63370108285(-4)	136	-4.74119624289(-4)
45	3.68079147531(-2)	91	-5.07448679762(-4)	137	-4.55336155403(-4)
46	3.29989753145(-2)	92	-5.46927786646(-4)		

Tabela 8: Zależność magnetyzowalności  $\chi$  od liczby atomowej  $Z$  dla atomu znajdującego się w stanie  $3p_{3/2}$ ,  $\mu = \pm 1/2$ . Notacja  $a(b)$  oznacza  $a \times 10^b$ .

$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$	$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$	$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$
1	-2.25361931953(+5)	47	-5.28300194599(-2)	93	-4.38298405987(-3)
2	-1.40880422477(+4)	48	-4.88090960922(-2)	94	-4.21758637818(-3)
3	-2.78378477370(+3)	49	-4.51748474187(-2)	95	-4.05988055424(-3)
4	-8.81232734796(+2)	50	-4.18829105647(-2)	96	-3.90941259652(-3)
5	-3.61177092350(+2)	51	-3.88947825948(-2)	97	-3.76575945674(-3)
6	-1.74310826656(+2)	52	-3.61769497659(-2)	98	-3.62852656044(-3)
7	-9.41728334975(+1)	53	-3.37001599109(-2)	99	-3.49734555170(-3)
8	-5.52592885705(+1)	54	-3.14388122587(-2)	100	-3.37187223067(-3)
9	-3.45383291595(+1)	55	-2.93704439799(-2)	101	-3.25178466441(-3)
10	-2.26900686477(+1)	56	-2.74752966996(-2)	102	-3.13678145376(-3)
11	-1.55198470920(+1)	57	-2.57359493611(-2)	103	-3.02658014055(-3)
12	-1.09752151351(+1)	58	-2.41370063301(-2)	104	-2.92091574063(-3)
13	-7.98181139057	59	-2.26648316487(-2)	105	-2.81953938984(-3)
14	-5.94505735023	60	-2.13073219626(-2)	106	-2.72221709078(-3)
15	-4.52014528534	61	-2.00537119615(-2)	107	-2.62872854914(-3)
16	-3.49898484789	62	-1.88944072338(-2)	108	-2.53886608912(-3)
17	-2.75160164872	63	-1.78208403043(-2)	109	-2.45243363784(-3)
18	-2.19434295998	64	-1.68253463309(-2)	110	-2.36924576876(-3)
19	-1.77193067509	65	-1.59010555177(-2)	111	-2.28912679458(-3)
20	-1.44697271860	66	-1.50417997804(-2)	112	-2.21190989918(-3)
21	-1.19364220624	67	-1.42420315918(-2)	113	-2.13743629817(-3)
22	-9.93762649880(-1)	68	-1.34967532655(-2)	114	-2.06555441610(-3)
23	-8.34323155583(-1)	69	-1.28014552032(-2)	115	-1.99611906692(-3)
24	-7.05866004483(-1)	70	-1.21520618584(-2)	116	-1.92899062175(-3)
25	-6.01419146696(-1)	71	-1.15448843592(-2)	117	-1.86403414425(-3)
26	-5.15776432424(-1)	72	-1.09765788874(-2)	118	-1.80111846895(-3)
27	-4.45004131257(-1)	73	-1.04441100468(-2)	119	-1.74011518977(-3)
28	-3.86097366909(-1)	74	-9.94471856227(-3)	120	-1.68089751508(-3)
29	-3.36737518704(-1)	75	-9.47589274882(-3)	121	-1.62333892889(-3)
30	-2.95118663801(-1)	76	-9.03534326461(-3)	122	-1.56731157239(-3)
31	-2.59821897497(-1)	77	-8.62098073400(-3)	123	-1.51268422155(-3)
32	-2.29723291912(-1)	78	-8.23089588092(-3)	124	-1.45931967518(-3)
33	-2.03925777314(-1)	79	-7.86334186292(-3)	125	-1.40707126869(-3)
34	-1.81708230465(-1)	80	-7.51671853762(-3)	126	-1.35577806330(-3)
35	-1.62487071557(-1)	81	-7.18955842869(-3)	127	-1.30525797288(-3)
36	-1.45787045076(-1)	82	-6.88051418940(-3)	128	-1.25529757103(-3)
37	-1.31218806859(-1)	83	-6.58834738743(-3)	129	-1.20563633226(-3)
38	-1.18461599754(-1)	84	-6.31191845762(-3)	130	-1.15594106466(-3)
39	-1.07249765401(-1)	85	-6.05017768851(-3)	131	-1.10576195353(-3)
40	-9.73621706619(-2)	86	-5.80215712521(-3)	132	-1.05445130436(-3)
41	-8.86138650475(-2)	87	-5.56696328589(-3)	133	-1.00099835403(-3)
42	-8.08494578620(-2)	88	-5.34377060153(-3)	134	-9.43645995371(-4)
43	-7.39378298229(-2)	89	-5.13181549940(-3)	135	-8.78803457610(-4)
44	-6.77678867839(-2)	90	-4.93039106058(-3)	136	-7.96617212887(-4)
45	-6.22451321592(-2)	91	-4.73884218958(-3)	137	-6.13921032712(-4)
46	-5.72888862415(-2)	92	-4.55656124170(-3)		

Tabela 9: Zależność magnetyzowalności  $\chi$  od liczby atomowej  $Z$  dla atomu znajdującego się w stanie  $3p_{3/2}$ ,  $\mu = \pm 3/2$ . Notacja  $a(b)$  oznacza  $a \times 10^b$ .

$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$	$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$	$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$
1	-3.59995154131(+1)	47	-1.58134431031(-2)	93	-3.68190771219(-3)
2	-8.99951541453	48	-1.51415218951(-2)	94	-3.59390852517(-3)
3	-3.99951541694	49	-1.45103212069(-2)	95	-3.50867739077(-3)
4	-2.24951542031	50	-1.39166162760(-2)	96	-3.42609961549(-3)
5	-1.43951542464	51	-1.33574953615(-2)	97	-3.34606638719(-3)
6	-9.99515429935(-1)	52	-1.28303239782(-2)	98	-3.26847441684(-3)
7	-7.34209313744(-1)	53	-1.23327138095(-2)	99	-3.19322560550(-3)
8	-5.62015443414(-1)	54	-1.18624956115(-2)	100	-3.12022673449(-3)
9	-4.43959896042(-1)	55	-1.14176955347(-2)	101	-3.04938917688(-3)
10	-3.59515460744(-1)	56	-1.09965143779(-2)	102	-2.98062862876(-3)
11	-2.97036132010(-1)	57	-1.05973093671(-2)	103	-2.91386485861(-3)
12	-2.49515481924(-1)	58	-1.02185781153(-2)	104	-2.84902147350(-3)
13	-2.12533245438(-1)	59	-9.85894446760(-3)	105	-2.78602570080(-3)
14	-1.83188976344(-1)	60	-9.51714598487(-3)	106	-2.72480818423(-3)
15	-1.59515520917(-1)	61	-9.19202285106(-3)	107	-2.66530279314(-3)
16	-1.40140535840(-1)	62	-8.88250802304(-3)	108	-2.60744644421(-3)
17	-1.24083025775(-1)	63	-8.58761846598(-3)	109	-2.55117893444(-3)
18	-1.10626679686(-1)	64	-8.30644733973(-3)	110	-2.49644278475(-3)
19	-9.92385780769(-2)	65	-8.03815702022(-3)	111	-2.44318309343(-3)
20	-8.95156051619(-2)	66	-7.78197285518(-3)	112	-2.39134739867(-3)
21	-8.11482779610(-2)	67	-7.53717756747(-3)	113	-2.34088554958(-3)
22	-7.38958108898(-2)	68	-7.30310623013(-3)	114	-2.29174958510(-3)
23	-6.75685973210(-2)	69	-7.07914174751(-3)	115	-2.24389362023(-3)
24	-6.20156898911(-2)	70	-6.86471078504(-3)	116	-2.19727373916(-3)
25	-5.71157134809(-2)	71	-6.65928009741(-3)	117	-2.15184789463(-3)
26	-5.27701759037(-2)	72	-6.46235321118(-3)	118	-2.10757581341(-3)
27	-4.88984795992(-2)	73	-6.27346742339(-3)	119	-2.06441890716(-3)
28	-4.54341573758(-2)	74	-6.09219108203(-3)	120	-2.02234018857(-3)
29	-4.23220005865(-2)	75	-5.91812111873(-3)	121	-1.98130419231(-3)
30	-3.95158458765(-2)	76	-5.75088080709(-3)	122	-1.94127690041(-3)
31	-3.69768533928(-2)	77	-5.59011772355(-3)	123	-1.90222567203(-3)
32	-3.46721555768(-2)	78	-5.43550188998(-3)	124	-1.86411917704(-3)
33	-3.25737881114(-2)	79	-5.28672407990(-3)	125	-1.82692733336(-3)
34	-3.06578376420(-2)	80	-5.14349427188(-3)	126	-1.79062124778(-3)
35	-2.89037574534(-2)	81	-5.00554023581(-3)	127	-1.75517315998(-3)
36	-2.72938143139(-2)	82	-4.87260623910(-3)	128	-1.72055638966(-3)
37	-2.58126385213(-2)	83	-4.74445186133(-3)	129	-1.68674528648(-3)
38	-2.44468557180(-2)	84	-4.62085090708(-3)	130	-1.65371518269(-3)
39	-2.31847839235(-2)	85	-4.50159040779(-3)	131	-1.62144234834(-3)
40	-2.20161829083(-2)	86	-4.38646970433(-3)	132	-1.58990394875(-3)
41	-2.09320458240(-2)	87	-4.27529960302(-3)	133	-1.55907800430(-3)
42	-1.99244251398(-2)	88	-4.16790159832(-3)	134	-1.52894335228(-3)
43	-1.89862865777(-2)	89	-4.06410715643(-3)	135	-1.49947961071(-3)
44	-1.81113860166(-2)	90	-3.96375705418(-3)	136	-1.47066714402(-3)
45	-1.72941653271(-2)	91	-3.86670076853(-3)	137	-1.44248703046(-3)
46	-1.65296638820(-2)	92	-3.77279591232(-3)		

Tabela 10: Zależność magnetyzowalności  $\chi$  od liczby atomowej  $Z$  dla atomu znajdującego się w stanie  $3d_{3/2}$ ,  $\mu = \pm 1/2$ . Notacja  $a(b)$  oznacza  $a \times 10^b$ .

$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$	$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$	$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$
1	7.30096461051(+5)	47	1.38215235623(-1)	93	7.01486054407(-3)
2	4.56262084060(+4)	48	1.26610621143(-1)	94	6.66896498062(-3)
3	9.01099752373(+3)	49	1.16172669036(-1)	95	6.34226800377(-3)
4	2.85043308441(+3)	50	1.06764469967(-1)	96	6.03354867286(-3)
5	1.16716730295(+3)	51	9.82674382697(-2)	97	5.74167441553(-3)
6	5.62651935512(+2)	52	9.05785664298(-2)	98	5.46559384265(-3)
7	3.03566402398(+2)	53	8.36081334140(-2)	99	5.20433021139(-3)
8	1.77850993984(+2)	54	7.72777850386(-2)	100	4.95697547231(-3)
9	1.10964969875(+2)	55	7.15189204991(-2)	101	4.72268484317(-3)
10	7.27553466950(+1)	56	6.62713317868(-2)	102	4.50067185834(-3)
11	4.96560769412(+1)	57	6.14820527338(-2)	103	4.29020384798(-3)
12	3.50320549678(+1)	58	5.71043824289(-2)	104	4.09059780608(-3)
13	2.54117061108(+1)	59	5.30970541595(-2)	105	3.90121661066(-3)
14	1.88747352814(+1)	60	4.94235261932(-2)	106	3.72146556310(-3)
15	1.43081292476(+1)	61	4.60513748852(-2)	107	3.55078921715(-3)
16	1.10405800750(+1)	62	4.29517739807(-2)	108	3.38866847077(-3)
17	8.65304718319	63	4.00990467301(-2)	109	3.23461789719(-3)
18	6.87601192570	64	3.74702796884(-2)	110	3.08818329331(-3)
19	5.53150125026	65	3.50449889084(-2)	111	2.94893942613(-3)
20	4.49921809437	66	3.28048307556(-2)	112	2.81648795968(-3)
21	3.69613842545	67	3.07333508193(-2)	113	2.69045554648(-3)
22	3.06388008496	68	2.88157654298(-2)	114	2.57049206926(-3)
23	2.56068911075	69	2.70387711486(-2)	115	2.45626901991(-3)
24	2.15624199914	70	2.53903783119(-2)	116	2.34747800398(-3)
25	1.82820621939	71	2.38597653032(-2)	117	2.24382935991(-3)
26	1.55992232150	72	2.24371507294(-2)	118	2.14505088351(-3)
27	1.33881561734	73	2.11136810915(-2)	119	2.05088664872(-3)
28	1.15529099688	74	1.98813318932(-2)	120	1.96109591675(-3)
29	1.00195298769	75	1.87328204271(-2)	121	1.87545212638(-3)
30	8.73048112449(-1)	76	1.76615287280(-2)	122	1.79374195871(-3)
31	7.64061331232(-1)	77	1.66614353938(-2)	123	1.71576447041(-3)
32	6.71420687667(-1)	78	1.57270551577(-2)	124	1.64133028995(-3)
33	5.92278867263(-1)	79	1.48533852439(-2)	125	1.57026087186(-3)
34	5.24350047648(-1)	80	1.40358576739(-2)	126	1.50238780447(-3)
35	4.65786921126(-1)	81	1.32702967991(-2)	127	1.43755216696(-3)
36	4.15087195520(-1)	82	1.25528814320(-2)	128	1.37560393212(-3)
37	3.71021928645(-1)	83	1.18801110305(-2)	129	1.31640141142(-3)
38	3.32580176765(-1)	84	1.12487754589(-2)	130	1.25981073967(-3)
39	2.98925934050(-1)	85	1.06559279118(-2)	131	1.20570539710(-3)
40	2.69364404698(-1)	86	1.00988606376(-2)	132	1.15396576793(-3)
41	2.43315414054(-1)	87	9.57508314342(-3)	133	1.10447873747(-3)
42	2.20292318988(-1)	88	9.08230260486(-3)	134	1.05713733773(-3)
43	1.99885182716(-1)	89	8.61840623450(-3)	135	1.01184048473(-3)
44	1.81747277418(-1)	90	8.18144539511(-3)	136	9.68493047166(-4)
45	1.65584199375(-1)	91	7.76962126782(-3)	137	9.27011600219(-4)
46	1.51145046864(-1)	92	7.38127190838(-3)		



Tabela 11: Zależność magnetyzowalności  $\chi$  od liczby atomowej  $Z$  dla atomu znajdującego się w stanie  $3d_{3/2}$ ,  $\mu = \pm 3/2$ . Notacja  $a(b)$  oznacza  $a \times 10^b$ .

$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$	$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$	$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$
1	4.86716974250(+5)	47	8.60209839917(-2)	93	3.27074312878(-3)
2	3.04139724866(+4)	48	7.85458605495(-2)	94	3.07433394533(-3)
3	6.00577634292(+3)	49	7.18326759068(-2)	95	2.88964693882(-3)
4	1.89941393893(+3)	50	6.57914112469(-2)	96	2.71591274984(-3)
5	7.77551751287(+2)	51	6.03441418019(-2)	97	2.55241864397(-3)
6	3.74712617436(+2)	52	5.54232204170(-2)	98	2.39850386097(-3)
7	2.02092103292(+2)	53	5.09697618589(-2)	99	2.25355538641(-3)
8	1.18348795296(+2)	54	4.69323735992(-2)	100	2.11700410353(-3)
9	7.38040230446(+1)	55	4.32660893755(-2)	101	1.98832128794(-3)
10	4.83637804243(+1)	56	3.99314702039(-2)	102	1.86701541176(-3)
11	3.29885647682(+1)	57	3.68938441613(-2)	103	1.75262922722(-3)
12	2.32576970348(+1)	58	3.41226615680(-2)	104	1.64473710289(-3)
13	1.68585131067(+1)	59	3.15909464524(-2)	105	1.54294258875(-3)
14	1.25119442094(+1)	60	2.92748286072(-2)	106	1.44687618837(-3)
15	9.47674652563	61	2.71531433080(-2)	107	1.35619331903(-3)
16	7.30591512172	62	2.52070880117(-2)	108	1.27057244238(-3)
17	5.72047110877	63	2.34199271757(-2)	109	1.18971334998(-3)
18	4.54101395459	64	2.17767378289(-2)	110	1.11333558980(-3)
19	3.64910220415	65	2.02641897482(-2)	111	1.04117702078(-3)
20	2.96469458301	66	1.88703550967(-2)	112	9.72992484230(-4)
21	2.43256209062	67	1.75845432070(-2)	113	9.08552581624(-4)
22	2.01387692678	68	1.63971568812(-2)	114	8.47642549495(-4)
23	1.68087685265	69	1.52995671406(-2)	115	7.90061222955(-4)
24	1.41340490085	70	1.42840038384(-2)	116	7.35620080233(-4)
25	1.19661991900	71	1.33434599356(-2)	117	6.84142361267(-4)
26	1.01945390960	72	1.24716075753(-2)	118	6.35462254082(-4)
27	8.73555090742(-1)	73	1.16627243636(-2)	119	5.89424143247(-4)
28	7.52552570746(-1)	74	1.09116284997(-2)	120	5.45881915214(-4)
29	6.51537504688(-1)	75	1.02136215930(-2)	121	5.04698315844(-4)
30	5.66692193446(-1)	76	9.56443816992(-3)	122	4.65744355812(-4)
31	4.95021714782(-1)	77	8.96020101486(-3)	123	4.28898759999(-4)
32	4.34157546277(-1)	78	8.39738160664(-3)	124	3.94047457305(-4)
33	3.82212353284(-1)	79	7.87276501480(-3)	125	3.61083107626(-4)
34	3.37671553858(-1)	80	7.38341870504(-3)	126	3.29904663060(-4)
35	2.99311599924(-1)	81	6.92666477745(-3)	127	3.00416960596(-4)
36	2.66137859620(-1)	82	6.50005522379(-3)	128	2.72530343847(-4)
37	2.37337015261(-1)	83	6.10134984462(-3)	129	2.46160311539(-4)
38	2.12240305497(-1)	84	5.72849651288(-3)	130	2.21227190701(-4)
39	1.90294936098(-1)	85	5.37961351123(-3)	131	1.97655832649(-4)
40	1.71041692176(-1)	86	5.05297370433(-3)	132	1.75375330025(-4)
41	1.54097293287(-1)	87	4.74699033735(-3)	133	1.54318753304(-4)
42	1.39140401386(-1)	88	4.46020427782(-3)	134	1.34422905300(-4)
43	1.25900460834(-1)	89	4.19127254003(-3)	135	1.15628092319(-4)
44	1.14148748021(-1)	90	3.93895795088(-3)	136	9.78779107430(-5)
45	1.03691155296(-1)	91	3.70211983274(-3)	137	8.11190478929(-5)
46	9.43623439730(-2)	92	3.47970559375(-3)		

Tabela 12: Zależność magnetyzowalności  $\chi$  od liczby atomowej  $Z$  dla atomu znajdującego się w stanie  $3d_{5/2}$ ,  $\mu = \pm 1/2$ . Notacja  $a(b)$  oznacza  $a \times 10^b$ .

$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$	$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$	$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$
1	-7.30129460687(+5)	47	-1.52790667894(-1)	93	-1.04686350576(-2)
2	-4.56344580419(+4)	48	-1.40570110670(-1)	94	-1.00420398217(-2)
3	-9.01466382631(+3)	49	-1.29553542618(-1)	95	-9.63718004866(-3)
4	-2.85249522032(+3)	50	-1.19601098369(-1)	96	-9.25272965631(-3)
5	-1.16848693887(+3)	51	-1.10591523160(-1)	97	-8.88745632177(-3)
6	-5.63568238100(+2)	52	-1.02419394527(-1)	98	-8.54021396810(-3)
7	-3.04239507711(+2)	53	-9.49928021476(-2)	99	-8.20993592207(-3)
8	-1.78366254914(+2)	54	-8.82314033605(-2)	100	-7.89562867724(-3)
9	-1.11372013217(+2)	55	-8.20647879975(-2)	101	-7.59636620333(-3)
10	-7.30849826355(+1)	56	-7.64310987797(-2)	102	-7.31128474919(-3)
11	-4.99284401604(+1)	57	-7.12758636610(-2)	103	-7.03957809235(-3)
12	-3.52608575877(+1)	58	-6.65510045397(-2)	104	-6.78049319265(-3)
13	-2.56066083434(+1)	59	-6.22139932254(-2)	105	-6.53332621235(-3)
14	-1.90427385967(+1)	60	-5.82271307473(-2)	106	-6.29741886852(-3)
15	-1.44544318909(+1)	61	-5.45569302936(-2)	107	-6.07215508719(-3)
16	-1.11691223107(+1)	62	-5.11735874837(-2)	108	-5.85695793173(-3)
17	-8.76687002962	63	-4.80505244503(-2)	109	-5.65128678081(-3)
18	-6.97749978290	64	-4.51639964755(-2)	110	-5.45463473343(-3)
19	-5.62255000871	65	-4.24927517871(-2)	111	-5.26652622099(-3)
20	-4.58135412172	66	-4.00177366501(-2)	112	-5.08651480815(-3)
21	-3.77060439662	67	-3.77218391466(-2)	113	-4.91418116609(-3)
22	-3.13169795478	68	-3.55896660876(-2)	114	-4.74913120315(-3)
23	-2.62270702794	69	-3.36073483604(-2)	115	-4.59099433952(-3)
24	-2.21316974402	70	-3.17623707415(-2)	116	-4.43942191366(-3)
25	-1.88064231174	71	-3.00434228029(-2)	117	-4.29408570929(-3)
26	-1.60837499662	72	-2.84402680477(-2)	118	-4.15467659314(-3)
27	-1.38371922941	73	-2.69436288289(-2)	119	-4.02090325393(-3)
28	-1.19701897183	74	-2.55450849658(-2)	120	-3.89249103458(-3)
29	-1.04082814351	75	-2.42369842683(-2)	121	-3.76918084987(-3)
30	-9.09350950738(-1)	76	-2.30123634349(-2)	122	-3.65072818274(-3)
31	-7.98036750376(-1)	77	-2.18648780048(-2)	123	-3.53690215289(-3)
32	-7.03283457459(-1)	78	-2.07887402275(-2)	124	-3.42748465193(-3)
33	-6.22218123539(-1)	79	-1.97786638657(-2)	125	-3.32226953983(-3)
34	-5.52533005666(-1)	80	-1.88298150839(-2)	126	-3.22106189796(-3)
35	-4.92361961654(-1)	81	-1.79377686852(-2)	127	-3.12367733415(-3)
36	-4.40186443863(-1)	82	-1.70984690563(-2)	128	-3.02994133597(-3)
37	-3.94763421213(-1)	83	-1.63081952655(-2)	129	-2.93968866836(-3)
38	-3.55069690140(-1)	84	-1.55635298269(-2)	130	-2.85276281236(-3)
39	-3.20258536327(-1)	85	-1.48613307095(-2)	131	-2.76901544188(-3)
40	-2.89625777098(-1)	86	-1.41987062194(-2)	132	-2.68830593546(-3)
41	-2.62582981515(-1)	87	-1.35729924316(-2)	133	-2.61050092075(-3)
42	-2.38636221211(-1)	88	-1.29817328867(-2)	134	-2.53547384894(-3)
43	-2.17369111314(-1)	89	-1.24226603031(-2)	135	-2.46310459728(-3)
44	-1.98429200223(-1)	90	-1.18936800839(-2)	136	-2.39327909746(-3)
45	-1.81516989266(-1)	91	-1.13928554256(-2)	137	-2.32588898797(-3)
46	-1.66377029477(-1)	92	-1.09183938569(-2)		

Tabela 13: Zależność magnetyzowalności  $\chi$  od liczby atomowej  $Z$  dla atomu znajdującego się w stanie  $3d_{5/2}$ ,  $\mu = \pm 3/2$ . Notacja  $a(b)$  oznacza  $a \times 10^b$ .

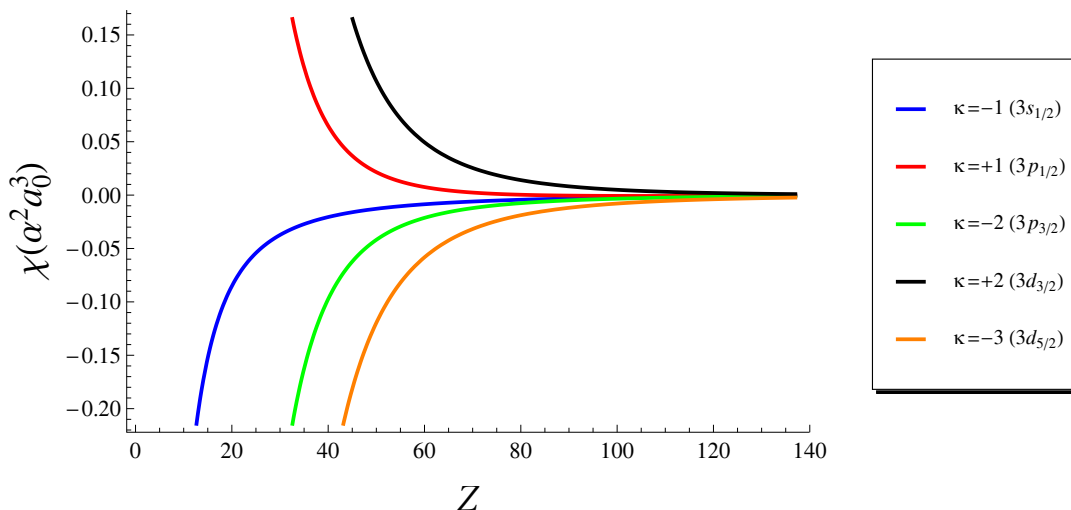
$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$	$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$	$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$
1	-4.86761973689(+5)	47	-1.05832339370(-1)	93	-7.91836083917(-3)
2	-3.04252219252(+4)	48	-9.75173246392(-2)	94	-7.61197205234(-3)
3	-6.01077578151(+3)	49	-9.00151495682(-2)	95	-7.32076568743(-3)
4	-1.90222587752(+3)	50	-8.32317643874(-2)	96	-7.04382901686(-3)
5	-7.79351189883(+2)	51	-7.70856046521(-2)	97	-6.78031328963(-3)
6	-3.75962056040(+2)	52	-7.15057301009(-2)	98	-6.52942863284(-3)
7	-2.03009909252(+2)	53	-6.64302701043(-2)	99	-6.29043940692(-3)
8	-1.19051358920(+2)	54	-6.18051205787(-2)	100	-6.06265997023(-3)
9	-7.43590172362(+1)	55	-5.75828479496(-2)	101	-5.84545081318(-3)
10	-4.88132190738(+1)	56	-5.37217642310(-2)	102	-5.63821502641(-3)
11	-3.33599042591(+1)	57	-5.01851440323(-2)	103	-5.44039507106(-3)
12	-2.35696357156(+1)	58	-4.69405596891(-2)	104	-5.25146982287(-3)
13	-1.71242239946(+1)	59	-4.39593150362(-2)	105	-5.07095186425(-3)
14	-1.27409747638(+1)	60	-4.12159618168(-2)	106	-4.89838500158(-3)
15	-9.67618526392	61	-3.86878855360(-2)	107	-4.73334198697(-3)
16	-7.48113513203	62	-3.63549498464(-2)	108	-4.57542242596(-3)
17	-5.87561923507	63	-3.41991904113(-2)	109	-4.42425085437(-3)
18	-4.67934165208	64	-3.22045507089(-2)	110	-4.27947496922(-3)
19	-3.77319477864	65	-3.03566534857(-2)	111	-4.14076400019(-3)
20	-3.07663344558	66	-2.86426025887(-2)	112	-4.00780720911(-3)
21	-2.53404179863	67	-2.70508107538(-2)	113	-3.88031250655(-3)
22	-2.10629105562	68	-2.55708496236(-2)	114	-3.75800517536(-3)
23	-1.76538196940	69	-2.41933188495(-2)	115	-3.64062669197(-3)
24	-1.49096888840	70	-2.29097316158(-2)	116	-3.52793363730(-3)
25	-1.26805894134	71	-2.17124143262(-2)	117	-3.41969668964(-3)
26	-1.08546101550	72	-2.05944185314(-2)	118	-3.31569969276(-3)
27	-9.34722581996(-1)	73	-1.95494434582(-2)	119	-3.21573879303(-3)
28	-8.09389665173(-1)	74	-1.85717677401(-2)	120	-3.11962163988(-3)
29	-7.04484409297(-1)	75	-1.76561891504(-2)	121	-3.02716664452(-3)
30	-6.16131411051(-1)	76	-1.67979713068(-2)	122	-2.93820229212(-3)
31	-5.41287198380(-1)	77	-1.59927964634(-2)	123	-2.85256650330(-3)
32	-4.77542164418(-1)	78	-1.52367236258(-2)	124	-2.77010604102(-3)
33	-4.22974019120(-1)	79	-1.45261513295(-2)	125	-2.69067595918(-3)
34	-3.76038288849(-1)	80	-1.38577845127(-2)	126	-2.61413908982(-3)
35	-3.35485742135(-1)	81	-1.32286049870(-2)	127	-2.54036556592(-3)
36	-3.00299580576(-1)	82	-1.26358450775(-2)	128	-2.46923237693(-3)
37	-2.69647274361(-1)	83	-1.20769640585(-2)	129	-2.40062295475(-3)
38	-2.42843344190(-1)	84	-1.15496270577(-2)	130	-2.33442678771(-3)
39	-2.19320393359(-1)	85	-1.10516861461(-2)	131	-2.27053906049(-3)
40	-1.98606406692(-1)	86	-1.05811633634(-2)	132	-2.20886031807(-3)
41	-1.80306845185(-1)	87	-1.01362354618(-2)	133	-2.14929615194(-3)
42	-1.64090436378(-1)	88	-9.71522017586(-3)	134	-2.09175690687(-3)
43	-1.49677831786(-1)	89	-9.31656385151(-3)	135	-2.03615740692(-3)
44	-1.36832502647(-1)	90	-8.93883028559(-3)	136	-1.98241669902(-3)
45	-1.25353393646(-1)	91	-8.58069064556(-3)	137	-1.93045781316(-3)
46	-1.15068965315(-1)	92	-8.24091435444(-3)		

Tabela 14: Zależność magnetyzowalności  $\chi$  od liczby atomowej  $Z$  dla atomu znajdującego się w stanie  $3d_{5/2}$ ,  $\mu = \pm 5/2$ . Notacja  $a(b)$  oznacza  $a \times 10^b$ .

$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$	$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$	$Z$	$\chi(\alpha^2 a_0^3)$
1	-2.69996919033(+1)	47	-1.19156823238(-2)	93	-2.81781240230(-3)
2	-6.74969190474	48	-1.14117525783(-2)	94	-2.75183651367(-3)
3	-2.99969190712	49	-1.09383634685(-2)	95	-2.68793696498(-3)
4	-1.68719191045	50	-1.04930964231(-2)	96	-2.62602773796(-3)
5	-1.07969191473	51	-1.00737676372(-2)	97	-2.56602722536(-3)
6	-7.49691919970(-1)	52	-9.67840124762(-3)	98	-2.50785796234(-3)
7	-5.50712334321(-1)	53	-9.30520601764(-3)	99	-2.45144637663(-3)
8	-4.21566933298(-1)	54	-8.95255501521(-3)	100	-2.39672255620(-3)
9	-3.33025274725(-1)	55	-8.61896785392(-3)	101	-2.34362003290(-3)
10	-2.69691950437(-1)	56	-8.30309513361(-3)	102	-2.29207558084(-3)
11	-2.22832456302(-1)	57	-8.00370477479(-3)	103	-2.24202902850(-3)
12	-1.87191971385(-1)	58	-7.71966998792(-3)	104	-2.19342308333(-3)
13	-1.59455296898(-1)	59	-7.44995865777(-3)	105	-2.14620316806(-3)
14	-1.37447098187(-1)	60	-7.19362395583(-3)	106	-2.10031726769(-3)
15	-1.19692009956(-1)	61	-6.94979602099(-3)	107	-2.05571578654(-3)
16	-1.05160774719(-1)	62	-6.71767457182(-3)	108	-2.01235141443(-3)
17	-9.31176459731(-2)	63	-6.49652233315(-3)	109	-1.97017900148(-3)
18	-8.30253904414(-2)	64	-6.28565917585(-3)	110	-1.92915544081(-3)
19	-7.44843185009(-2)	65	-6.08445688283(-3)	111	-1.88923955861(-3)
20	-6.71920933136(-2)	66	-5.89233446593(-3)	112	-1.85039201103(-3)
21	-6.09166026442(-2)	67	-5.70875396830(-3)	113	-1.81257518748(-3)
22	-5.54772573050(-2)	68	-5.53321669578(-3)	114	-1.77575311978(-3)
23	-5.07318523256(-2)	69	-5.36525982773(-3)	115	-1.73989139687(-3)
24	-4.65671771838(-2)	70	-5.20445336430(-3)	116	-1.70495708460(-3)
25	-4.28922005406(-2)	71	-5.05039737262(-3)	117	-1.67091865034(-3)
26	-3.96330532560(-2)	72	-4.90271949878(-3)	118	-1.63774589199(-3)
27	-3.67292871604(-2)	73	-4.76107271672(-3)	119	-1.60540987121(-3)
28	-3.41310518604(-2)	74	-4.62513328861(-3)	120	-1.57388285049(-3)
29	-3.17969408710(-2)	75	-4.49459891441(-3)	121	-1.54313823383(-3)
30	-2.96923316766(-2)	76	-4.36918705055(-3)	122	-1.51315051088(-3)
31	-2.77880943879(-2)	77	-4.24863338061(-3)	123	-1.48389520413(-3)
32	-2.60595783362(-2)	78	-4.13269042232(-3)	124	-1.45534881922(-3)
33	-2.44858102842(-2)	79	-4.02112625711(-3)	125	-1.42748879788(-3)
34	-2.30488552165(-2)	80	-3.91372337026(-3)	126	-1.40029347356(-3)
35	-2.17333030970(-2)	81	-3.81027759056(-3)	127	-1.37374202945(-3)
36	-2.05258540024(-2)	82	-3.71059711996(-3)	128	-1.34781445883(-3)
37	-1.94149806566(-2)	83	-3.61450164457(-3)	129	-1.32249152753(-3)
38	-1.83906522920(-2)	84	-3.52182151930(-3)	130	-1.29775473841(-3)
39	-1.74441074236(-2)	85	-3.43239701919(-3)	131	-1.27358629772(-3)
40	-1.65676658799(-2)	86	-3.34607765141(-3)	132	-1.24996908329(-3)
41	-1.57545725251(-2)	87	-3.26272152224(-3)	133	-1.22688661431(-3)
42	-1.49988667117(-2)	88	-3.18219475410(-3)	134	-1.20432302274(-3)
43	-1.42952727318(-2)	89	-3.10437094825(-3)	135	-1.18226302618(-3)
44	-1.36391074952(-2)	90	-3.02913068894(-3)	136	-1.16069190213(-3)
45	-1.30262024053(-2)	91	-2.95636108557(-3)	137	-1.13959546353(-3)
46	-1.24528369925(-2)	92	-2.88595534945(-3)		

Niemal wszystkie wartości  $\chi(Z)$  wyznaczone numerycznie przez Poszwę i Rutkowskiego metodą uogólnionych szeregów potęgowych [50] idealnie zgadzają się z liczbami zawartymi w tabelach od 2 do 4 oraz 6, 10 i 12. Jedyne różnice występują przy  $Z = 10$  dla stanów  $3s_{1/2}$  oraz  $3d_{3/2}$ , odpowiednio od dziewiątej i ósmej cyfry znaczącej, a także przy  $Z = 65$  dla stanu  $3d_{5/2}$  dla dwunastej cyfry znaczącej, przy czym ostatnia z wymienionych rozbieżności występuje na końcowych miejscach znaczących porównywanych liczb, co sugeruje, iż można ją traktować jako rezultat zaokrąglenia numerycznego.

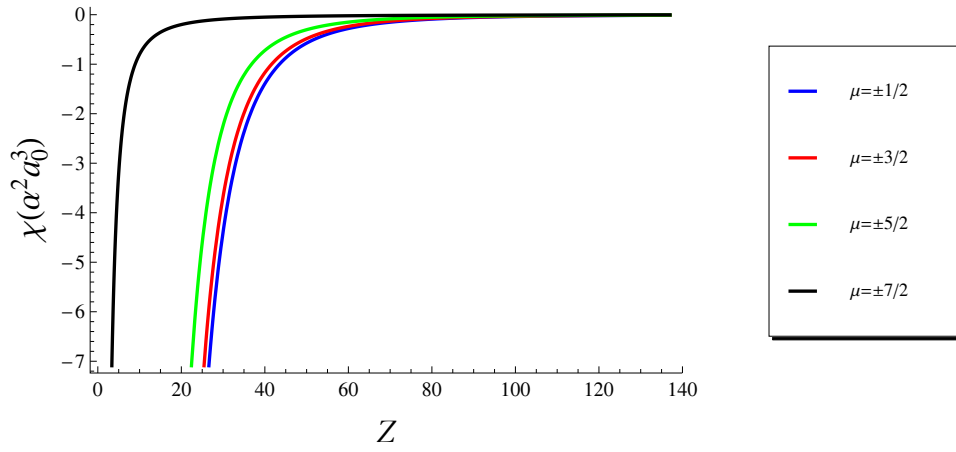
Kolejny rysunek 8 przedstawia zależność  $\chi(Z)$  dla stanów z  $\mu = \pm 1/2$  oraz główną liczbą kwantową  $\mathcal{N} = 3$ , czyli dla stanów należących do grupy drugiego stanu wzbudzonego. Będziemy tutaj zmieniać liczbę kwantową  $\kappa$ , a także – na mocy relacji  $\mathcal{N} = n + |\kappa|$  – radialną liczbę kwantową  $n$ .



Rys. 8: Magnetyzowalność  $\chi$  dla stanów z  $\mu = \pm 1/2$  oraz  $\mathcal{N} = 3$  oraz jako funkcja liczby  $Z$ .

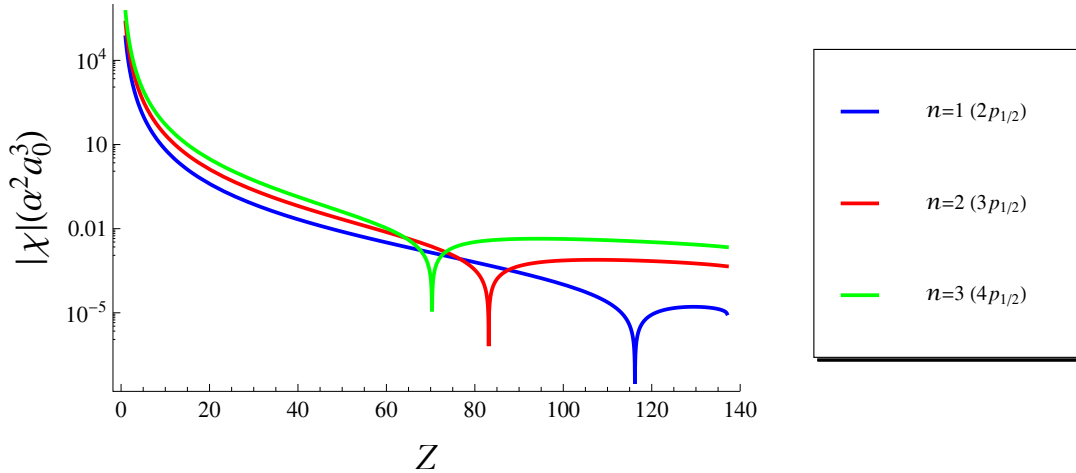
Wszystkie powyższe wykresy  $\chi(Z)$  zostały wykreślone dla stanów z  $\mu = \pm 1/2$ . Jednak dla danego  $\kappa$  liczba  $\mu$  przyjmuje wartości ze zbioru  $\{-|\kappa| + \frac{1}{2}, -|\kappa| + \frac{3}{2}, \dots, |\kappa| - \frac{1}{2}\}$  (Uzupełnienie A.3). Mając na celu porównanie ze sobą jak największej ilości różnych stanów, do uzyskania prezentowanych tutaj wykresów wybrano  $\mu$  o najmniejszej wartości bezwzględnej<sup>16</sup>. Aby jednak zilustrować, w jaki sposób magnetyzowalność zależy od liczby kwantowej  $\mu$ , na rysunku 10 przedstawiono wykres zależności  $\chi(Z)$  dla jednego wybranego stanu ( $4f_{7/2}$ ), dla różnych wartości magnetycznej liczby kwantowej  $\mu$ .

<sup>16</sup>Uwzględniono tutaj parzystość wyrażenia (7.2) względem  $\mu$ .



Rys. 9: Magnetyzowalność  $\chi$  dla grupy stanów  $4f_{7/2}$  jako funkcja liczby  $Z$ .

Analizując ogromną liczbę wykresów zależności  $\chi(Z)$  dla  $Z$  od 1 do 137, z których niewielka część została zaprezentowana w rozprawie, zauważono, że – podobnie, jak w przypadku stanu podstawowego – dla stanów o symetrii  $\kappa = +1$  istnieje pewna granica, przy której magnetyzowalność zmienia znak na przeciwny. Taki efekt zaprezentowano na rysunku 11, przedstawiającym wykres  $|\chi(Z)|$ ; w przypadku osi rzędnych zastosowano skalę logarytmiczną.



Rys. 10: Wartość bezwzględna  $\chi$  dla stanów z  $\kappa = +1$  oraz  $\mu = \pm 1/2$ , czyli dla stanów typu  $\mathcal{N}p_{1/2}$ , jako funkcja liczby  $Z$ .

Dla stanu  $2p_{1/2}$  wartością graniczną, przy której magnetyzowalność zmienia znak na ujemny, jest<sup>17</sup>  $Z_c = 117$  (patrz Tabela 3). Im wyższy stan wzbudzony, tym ta granica przesuwana się w stronę niższych wartości liczby atomowej; w przypadku stanu  $3p_{1/2}$  wynosi ona  $Z_c = 84$ , zaś dla stanu  $4p_{1/2}$  osiąga wartość  $Z_c = 71$ .

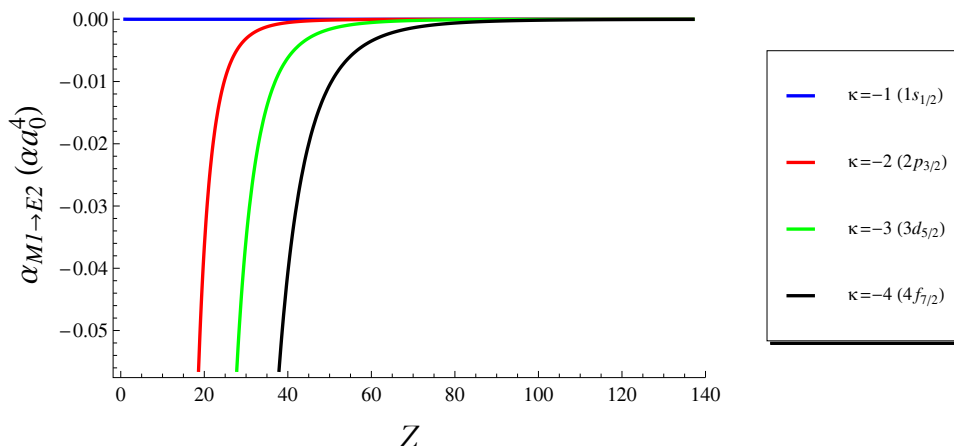
<sup>17</sup>W pracy [50] podano, iż wartość krytyczna dla tego stanu wynosi  $Z_c = 120$ . Rozbieżność ta może wynikać z faktu, iż w cytowanej publikacji wartości  $\chi(Z)$  stabilizowano dla  $Z$  od 1 do 137, ze skokiem co 5 dla wartości  $Z$ , tj. dla  $Z = 1, 5, 10, 15, \dots, 115, 120, 125, 130, 135, 137$ .

### 7.3 Podatność krzyżowa $\alpha_{M1 \rightarrow E2}$

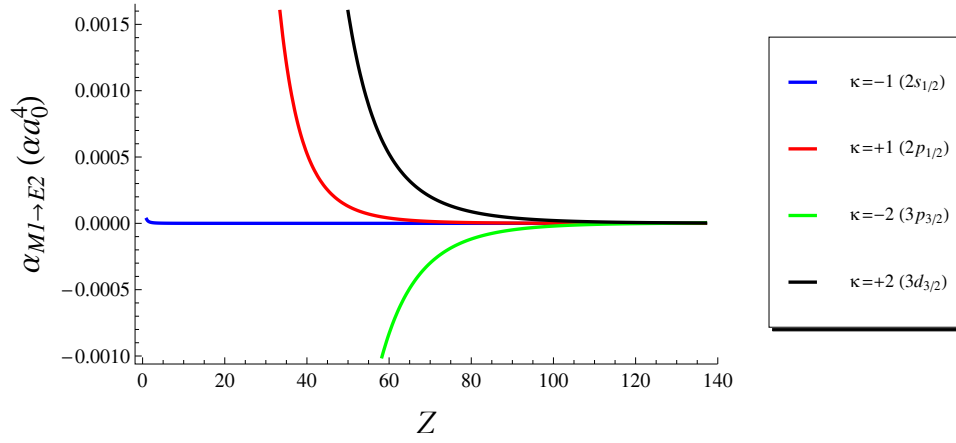
Przypomnijmy w tym miejscu wyrażenie (5.101) określające podatność krzyżową typu magnetyczny dipol  $\rightarrow$  elektryczny kwadrupol dla dowolnego dyskretnego stanu energetycznego atomu:

$$\begin{aligned}
\alpha_{M1 \rightarrow E2} = & \frac{\alpha a_0^4 \mu}{Z^4} \frac{1}{2} \left[ N_{n\kappa}^2 (5n^2 + 10n\gamma_\kappa + 4\gamma_\kappa^2 + 1) - \kappa(n + \gamma_\kappa)(2\kappa(n + \gamma_\kappa) + 3N_{n\kappa}) \right] \\
& \times \frac{\kappa^2(\kappa^2 - \gamma_\kappa^2)(4\kappa^2 - 12\mu^2 - 1)}{(4\kappa^2 - 1)^2} + \frac{3}{32} \frac{N_{n\kappa}^2(N_{n\kappa} - \kappa)}{4\kappa^2 - 1} \sum_{\kappa'} \frac{1}{N_{n\kappa} + \kappa'} \\
& \times \left[ \frac{(2\kappa - 1)^2 - 4\mu^2}{(2\kappa - 1)(2\kappa - 3)} \delta_{\kappa', -\kappa+1} - \frac{(2\kappa + 1)^2 - 4\mu^2}{(2\kappa + 1)(2\kappa + 3)} \delta_{\kappa', -\kappa-1} \right] \\
& \times \left\{ 2N_{n\kappa} \left[ 10(n + \gamma_\kappa)(7n^2 + 14n\gamma_\kappa + 4\gamma_\kappa^2 + 5) + (n + \gamma_\kappa)^2(51\gamma_\kappa^2 + 20) \right. \right. \\
& \left. \left. + n(n + 2\gamma_\kappa)(63n^2 + 126n\gamma_\kappa + 33\gamma_\kappa^2 + 85) - 27\gamma_\kappa^4 + 70\gamma_\kappa^2 + 12 \right] \right. \\
& \left. + 8\kappa(n + \gamma_\kappa)^2(7n^2 + 14n\gamma_\kappa + 4\gamma_\kappa^2 + 5) + \frac{n!\Gamma(n + 2\gamma_\kappa + 1)N_{n\kappa}}{(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1)(N_{n\kappa} - \kappa)^2\Gamma(2\gamma_{\kappa'} + 1)} \right. \\
& \times \sum_{k=0}^n \sum_{p=0}^n \frac{(-)^{k+p} \Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + k + 3)\Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + p + 2) \left[ 2(N_{n\kappa} - \kappa) + (n-p)(\kappa + \kappa') \right]}{k!p! \Gamma(n - k + 1)\Gamma(k + 2\gamma_\kappa + 1)\Gamma(n - p + 1)\Gamma(p + 2\gamma_\kappa + 1)} \\
& \times \left[ (N_{n\kappa} + \kappa')[(n - k) + \epsilon_{n\kappa}(\kappa - N_{n\kappa})] - (n - k - 3)[(\kappa - N_{n\kappa}) + \epsilon_{n\kappa}(n - k)] \right] \\
& \times {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - k - 2, \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - p - 1, \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2, 2\gamma_{\kappa'} + 1 \end{matrix} ; 1 \right) \left. \right\}. \tag{7.3}
\end{aligned}$$

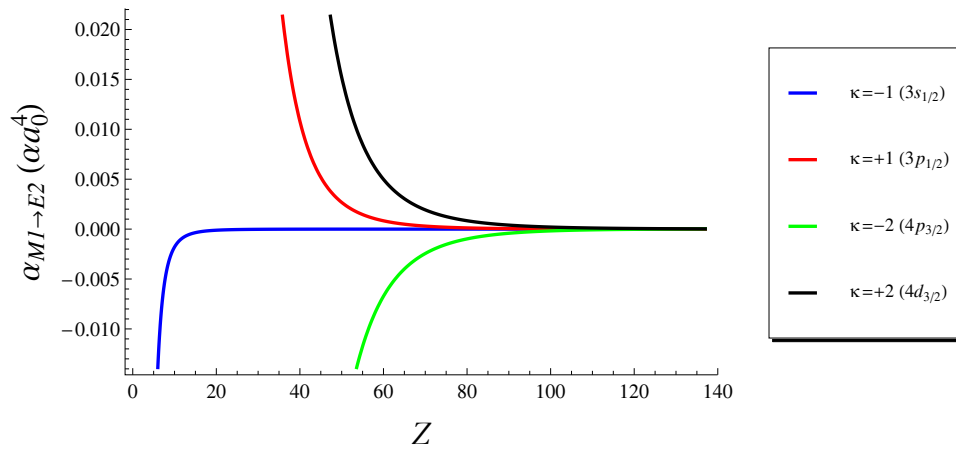
Wykorzystując powyższy wzór, obliczono wartości  $\alpha_{M1 \rightarrow E2}$  dla kilku wybranych stanów atomu. Wartości te, wyrażone w jednostkach  $\alpha a_0^4$ , przedstawiono w formie wykresów jako funkcje liczby atomowej  $Z$ . Sposób zestawienia uzyskanych wykresów jest analogiczny do tego zaprezentowanego w podrozdziale 7.2. Rozpocznijmy zatem od stanów o określonej radialnej liczbie kwantowej  $n$  oraz magnetycznej liczbie kwantowej  $\mu$ ; zmieniać się będzie liczba kwantowa  $\kappa$ .



Rys. 11: Podatność krzyżowa  $\alpha_{M1 \rightarrow E2}$  dla stanów z  $n=0$  i  $\mu=1/2$  jako funkcja liczby  $Z$ .



Rys. 12: Podatność krzyżowa  $\alpha_{M1 \rightarrow E2}$  dla stanów z  $n=1$  i  $\mu=1/2$  jako funkcja liczby  $Z$ .



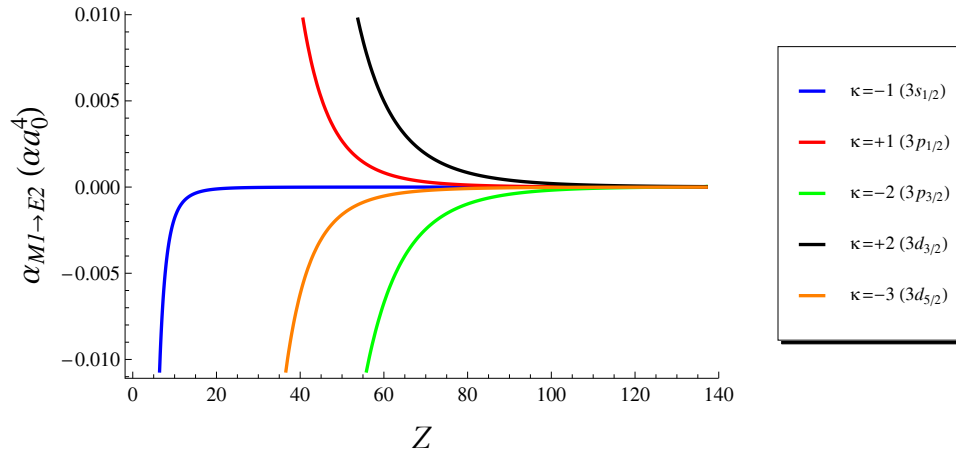
Rys. 13: Podatność krzyżowa  $\alpha_{M1 \rightarrow E2}$  dla stanów z  $n=2$  i  $\mu=1/2$  jako funkcja liczby  $Z$ .

Analizując rysunki od 11 do 13, możemy wywnioskować, że dla danej wartości  $\mu$  znak podatności krzyżowej  $\alpha_{M1 \rightarrow E2}$  zależy<sup>18</sup> od znaku liczby  $\kappa$ . Ponadto, w tym względzie ciekawe wydają się być stany  $1s_{1/2}$  oraz  $2s_{1/2}$ , gdyż wartości  $\alpha_{M1 \rightarrow E2}$  dla tych stanów są bardzo małe w porównaniu do wartości dla wyższych stanów wzbudzonych; tym przypadkom przyjrzymy się w dalszej części tego podrozdziału (patrz Rys. 15).

Na kolejnym rysunku pokazano, jak zmienia się  $\alpha_{M1 \rightarrow E2}$  wewnątrz drugiej grupy stanów wzbudzonych.

<sup>18</sup>Należy w tym miejscu podkreślić, że przedstawiono tutaj wykresy zależności  $\alpha_{M1 \rightarrow E2}(Z)$  tylko dla stanów z magnetyczną liczbą kwantową  $\mu = 1/2$  (wyjątek stanowi Rys. 20 obrazujący zależność  $\alpha_{M1 \rightarrow E2}(Z)$  dla różnych wartości  $\mu$ ). Biorąc pod uwagę definicję omawianej podatności krzyżowej (7.3), a konkretniej jej nieparzystość względem  $\mu$ , łatwo można stwierdzić, że analogiczne wykresy dla stanów z  $\mu = -1/2$  będą po prostu lustrzanym odbiciem względem osi odciętych.

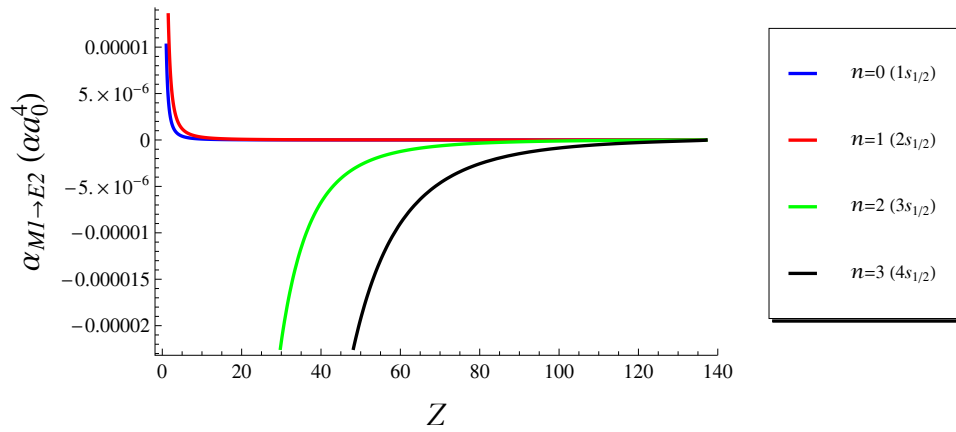




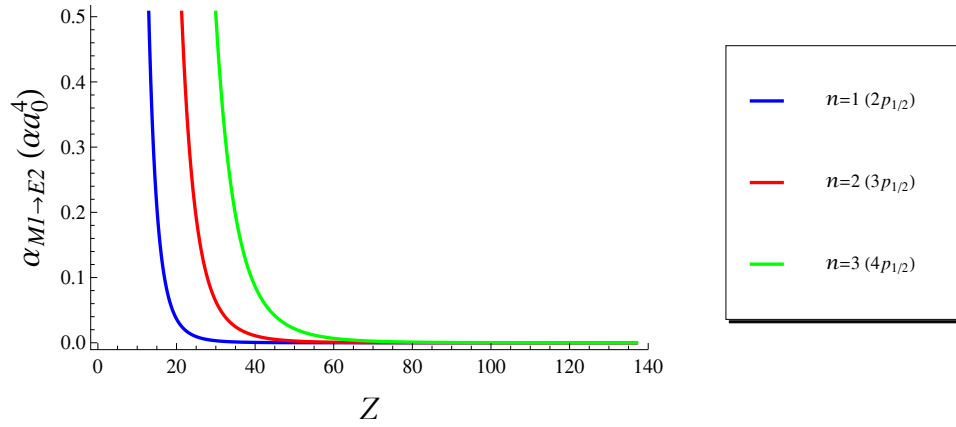
Rys. 14: Podatność krzyżowa  $\alpha_{M1 \rightarrow E2}$  dla stanów z  $\mathcal{N}=3$  i  $\mu=1/2$  jako funkcja liczby  $Z$ .

Powyższy wykres potwierdza wcześniejszy wniosek, iż jeśli  $\kappa > 0$ , to omawiana podatność krzyżowa również będzie dodatnia i na odwrót.

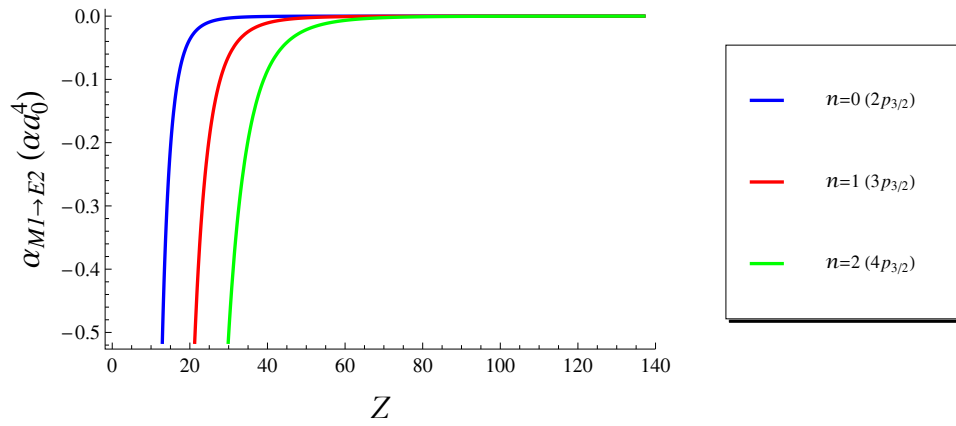
Przejdziemy teraz do następnej grupy wykresów, prezentujących zależność  $\alpha_{M1 \rightarrow E2}(Z)$  dla stanów o określonej symetrii  $\kappa$ .



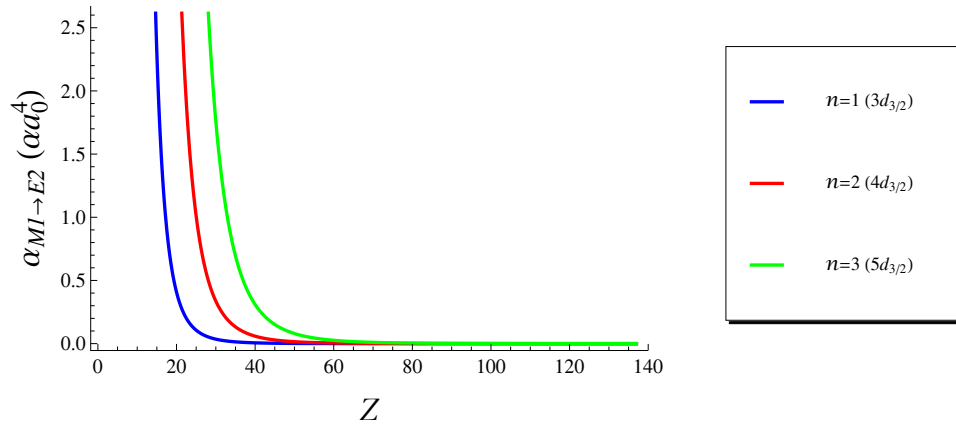
Rys. 15: Podatność krzyżowa  $\alpha_{M1 \rightarrow E2}$  dla stanów z  $\kappa=-1$  i  $\mu=1/2$  jako funkcja liczby  $Z$ .



Rys. 16: Podatność krzyżowa  $\alpha_{M1 \rightarrow E2}$  dla stanów z  $\kappa=+1$  i  $\mu=1/2$  jako funkcja liczby  $Z$ .



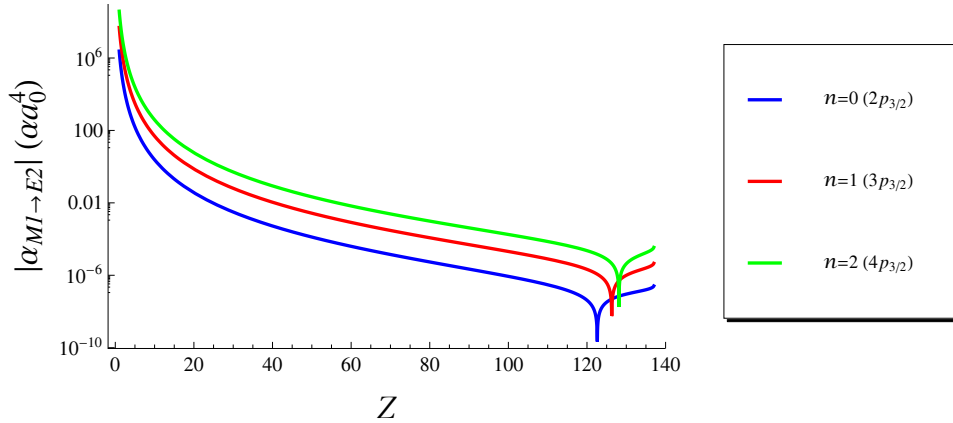
Rys. 17: Podatność krzyżowa  $\alpha_{M1 \rightarrow E2}$  dla stanów z  $\kappa=-2$  i  $\mu=1/2$  jako funkcja liczby  $Z$ .



Rys. 18: Podatność krzyżowa  $\alpha_{M1 \rightarrow E2}$  dla stanów z  $\kappa=+2$  i  $\mu=1/2$  jako funkcja liczby  $Z$ .

Z powyższych czterech wykresów płyną następujące wnioski. Dla wspomnianych wcześniej najniższych stanów energetycznych, tj.  $1s_{1/2}$  oraz  $2s_{1/2}$ , wartości podatności krzyżowej  $\alpha_{M1 \rightarrow E2}$ , mimo iż bardzo niewielkie, są jednak  *dodatnie*, co prezentuje nam rysunek 15. Im wyższy stan wzbudzony, tym łagodniej omawiana podatność atomu zbiega do zera. Analiza wartości  $\alpha_{M1 \rightarrow E2}$  dla  $Z$  od 1 do

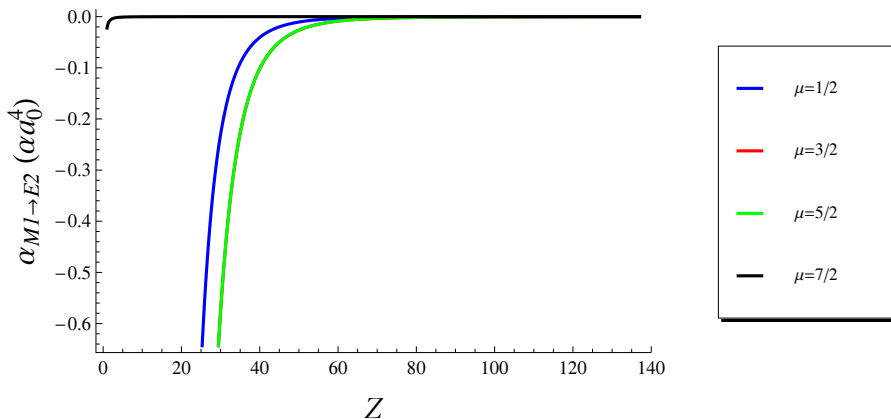
137, a także kilkunastu dodatkowych (nie zaprezentowanych w rozprawie) wykresów dla różnych kombinacji stanów, pozwoliła wyróżnić stany typu  $\mathcal{N}p_{3/2}$  w podobny sposób, jak stany typu  $\mathcal{N}p_{1/2}$  podczas omawiania magnetyzowalności w poprzednim podrozdziale. Mianowicie, dla tej klasy stanów (z  $\kappa = -2$ ) istnieją wartości graniczne liczby atomowej ( $Z_c$ ), przy których podatność krzyżowa  $\alpha_{M1 \rightarrow E2}$  zmienia swój znak na przeciwny. Aby to zobrazować, na rysunku 19 przedstawiono wartość bezwzględną omawianej podatności jako funkcję liczby  $Z$ ; w przypadku osi rzędnych zastosowano skalę logarymiczną.



Rys. 19: Wartość bezwzględna podatności krzyżowej  $\alpha_{M1 \rightarrow E2}$  dla stanów z  $\kappa = -2$  i  $\mu = 1/2$ , tj. dla stanów typu  $\mathcal{N}p_{3/2}$ , jako funkcja liczby  $Z$ .

Dla stanu  $2p_{3/2}$  wartość graniczna wynosi  $Z_c = 123$ . Im wyższy stan wzbudzony, tym ta granica nieznacznie przesuwa się w stronę wyższych wartości liczby atomowej; w przypadku stanu  $3p_{3/2}$  wynosi ona  $Z_c = 127$ , zaś dla stanu  $4p_{3/2}$  osiąga ona wartość  $Z_c = 129$ .

Na poniższym rysunku pokazano, jak zachowuje się omawiana podatność krzyżowa podczas zmiany wartości magnetycznej liczby kwantowej  $\mu$ . Zależność tę zaprezentowano na przykładzie stanu  $4f_{7/2}$ , na wykresie  $\alpha_{M1 \rightarrow E2}(Z)$ , dla  $Z$  od 1 do 137.



Rys. 20: Podatność krzyżowa  $\alpha_{M1 \rightarrow E2}$  dla pasma stanów  $4f_{7/2}$  jako funkcja liczby  $Z$ .

Dla stanów z  $\mu = 3/2$  oraz  $\mu = 5/2$  nie widać praktycznie żadnej różnicy w wartościach  $\alpha_{M1 \rightarrow E2}(Z)$  (linie czerwona i zielona zasadniczo się pokrywają). Analiza całego spektrum wartości dla tych dwóch przypadków pozwala stwierdzić, iż najmniejsza rozbieżność między wynikami występuje przy  $Z = 1$  i jest rzędu  $10^{-10} \alpha a_0^4$ . W miarę wzrostu liczby  $Z$  rozbieżność ta sukcesywnie rośnie i dla  $Z = 137$  osiąga wartość około  $0.03 \alpha a_0^4$ .

## 7.4 Stała ekranowania magnetycznego

Podobnie, jak w poprzednich dwóch podrozdziałach, przedstawimy w tym miejscu wyrażenie analityczne dla tytułowej wielkości fizycznej; w tym przypadku będą to wzory (6.122) oraz (6.117)–(6.119), określające stałą ekranowania magnetycznego relatywistycznego atomu jednoelektronowego, będącego w dowolnym dyskretnym stanie energetycznym:

$$\begin{aligned}
\sigma &= \frac{\alpha^4 Z^3}{N_{n\kappa}^4} \frac{32\kappa^3 \mu^2 [2\kappa(\gamma_\kappa + n) - N_{n\kappa}]}{(4\kappa^2 - 1)^2 \gamma_\kappa (4\gamma_\kappa^2 - 1)} + \frac{\alpha^2 Z}{N_{n\kappa}^2 (4\kappa^2 - 1)^2} \left[ 8\kappa^2 \mu^2 + \frac{1}{8} \sum_{\kappa'} \frac{N_{n\kappa} - \kappa}{N_{n\kappa} + \kappa'} \right. \\
&\times \left[ \left( (4\kappa^2 - 1)^2 - 4\mu^2 (2\kappa + 1)^2 \right) \delta_{\kappa', -\kappa+1} + \left( (4\kappa^2 - 1)^2 - 4\mu^2 (2\kappa - 1)^2 \right) \delta_{\kappa', -\kappa-1} \right] \\
&\times \left\{ 1 + \frac{(-)^n}{(N_{n\kappa} - \kappa)(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1)(\gamma_{\kappa'} + \gamma_\kappa + n - 1)} \sum_{k=0}^n \frac{(-)^k \Gamma(2\gamma_\kappa + k + n)}{k! \Gamma(2\gamma_\kappa + k + 3) \Gamma(n - k + 1)} \right. \\
&\times \left[ \mathcal{W}_1(\kappa, \kappa', k, n) {}_3F_2 \left( \begin{matrix} k - n, & 1, & 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1, & -\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1 \end{matrix} ; 1 \right) \right. \\
&+ \mathcal{W}_2(\kappa, \kappa', k, n) {}_3F_2 \left( \begin{matrix} k - n, & 1, & 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1, & -\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2 \end{matrix} ; 1 \right) \\
&+ \left. \left. \mathcal{W}_3(\kappa, \kappa', k, n) {}_3F_2 \left( \begin{matrix} k - n, & 1, & 1 \\ \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2, & -\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 2 \end{matrix} ; 1 \right) \right] \right\}, \tag{7.4}
\end{aligned}$$

gdzie

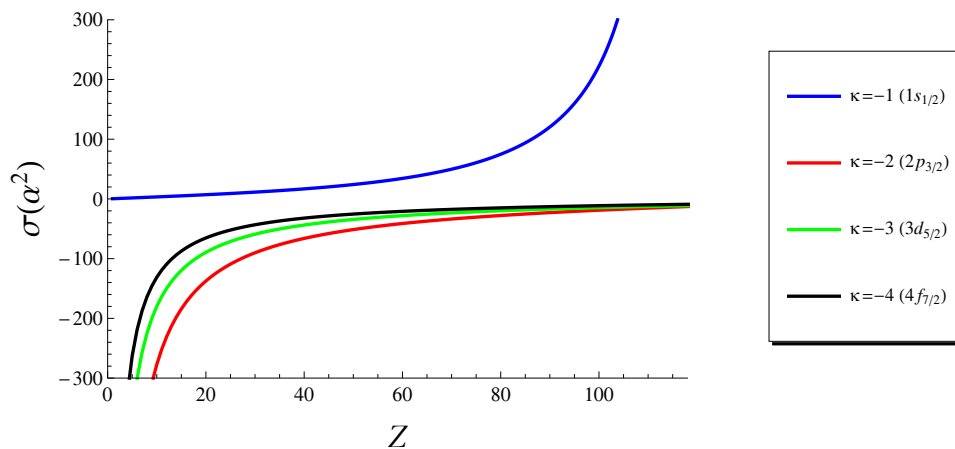
$$\begin{aligned}
\mathcal{W}_1(\kappa, \kappa', k, n) &= (2\gamma_\kappa + k + n)(2\gamma_\kappa + k + n + 1)(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + n - 1)(\gamma_\kappa - \gamma_{\kappa'} + n - 1) \\
&\times \left[ (2\gamma_\kappa + k + n + 2) [(N_{n\kappa} - \kappa) - (n - k)(\kappa + \kappa')] + 2n(\kappa + \kappa') \right], \tag{7.5}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{W}_2(\kappa, \kappa', k, n) &= (\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - n + 1) \left\{ (2\gamma_\kappa + k + 1)(2\gamma_\kappa + k + 2) [(N_{n\kappa} - \kappa) - (n - k)(\kappa + \kappa')] \right. \\
&\times [(2\gamma_\kappa + 1)(2\gamma_\kappa + k + n) - (\kappa + \kappa')(N_{n\kappa} + \kappa)] \\
&+ (2\gamma_\kappa + k + 2) [(N_{n\kappa} - \kappa) - (n - k - 1)(\kappa + \kappa')] \\
&\times [2n(2\gamma_\kappa + k)(2\gamma_\kappa + k + n) - (n - 1)(\kappa + \kappa')(N_{n\kappa} + \kappa)] \\
&+ \left. n(n - 1)(2\gamma_\kappa + k + n)(2\gamma_\kappa + 2k - 1) [(N_{n\kappa} - \kappa) - (n - k - 2)(\kappa + \kappa')] \right\}, \tag{7.6}
\end{aligned}$$

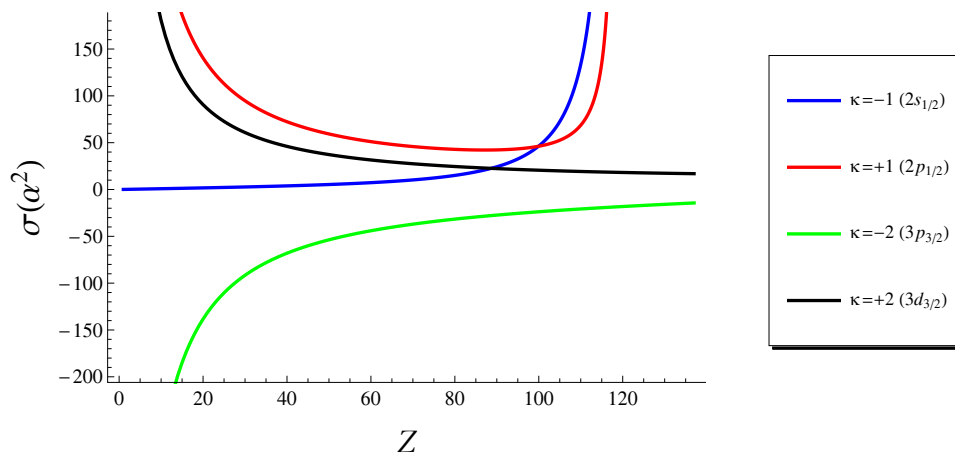
$$\begin{aligned}
\mathcal{W}_3(\kappa, \kappa', k, n) &= (\gamma_\kappa - \gamma_{\kappa'} + k - 1)(2\gamma_\kappa + k + 2) [(N_{n\kappa} - \kappa) - (n - k - 1)(\kappa + \kappa')] \\
&\times [2n(\gamma_\kappa - \gamma_{\kappa'} + 1)(2\gamma_\kappa + k + n) - (n - 1)(\kappa + \kappa')(N_{n\kappa} + \kappa)] \\
&+ (\gamma_\kappa - \gamma_{\kappa'} + 1)(2\gamma_\kappa + k + 1)(2\gamma_\kappa + k + 2) [(N_{n\kappa} - \kappa) - (n - k)(\kappa + \kappa')] \\
&\times [(\gamma_\kappa - \gamma_{\kappa'})(2\gamma_\kappa + k + n) - (\kappa + \kappa')(N_{n\kappa} + \kappa)] + n(n - 1)(\gamma_\kappa - \gamma_{\kappa'} + k - 1) \\
&\times (\gamma_\kappa - \gamma_{\kappa'} + k)(2\gamma_\kappa + k + n) [(N_{n\kappa} - \kappa) - (n - k - 2)(\kappa + \kappa')]. \tag{7.7}
\end{aligned}$$

W oparciu o wzory (7.4)–(7.7) obliczono wartości stałej ekranowania magnetycznego (wyrażone w jednostkach  $\alpha^2$ ) dla wybranych stanów atomu. Otrzymane wyniki zaprezentowano w formie wykresów<sup>19</sup> zależności  $\sigma$  od  $Z$ , pogrupowanych w sposób analogiczny, jak w przypadku  $\chi$  oraz  $\alpha_{M1 \rightarrow E2}$ .

Pierwszą grupę tworzą wykresy  $\sigma(Z)$  dla stanów o określonej radialnej liczbie kwantowej  $n$  i magnetycznej liczbie kwantowej  $\mu$ .

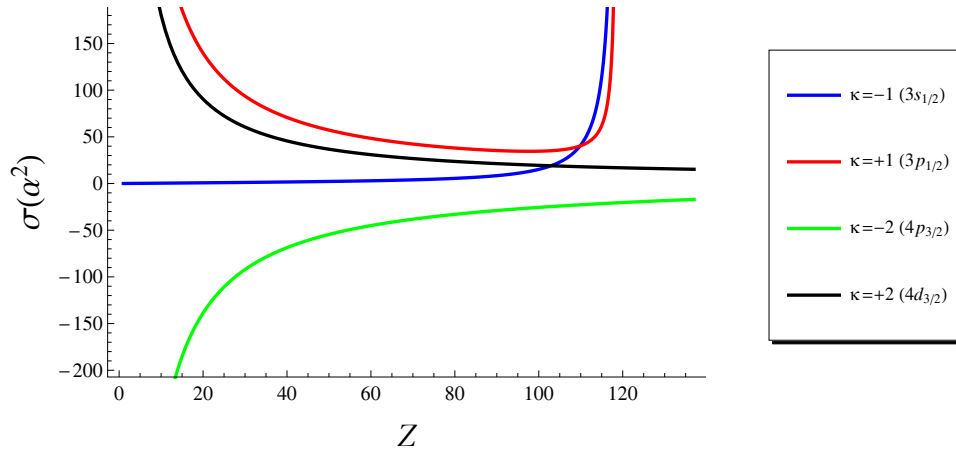


Rys. 21: Stała ekranowania magnetycznego  $\sigma$  dla stanów z  $n = 0$  oraz  $\mu = \pm 1/2$  jako funkcja liczby  $Z$ .



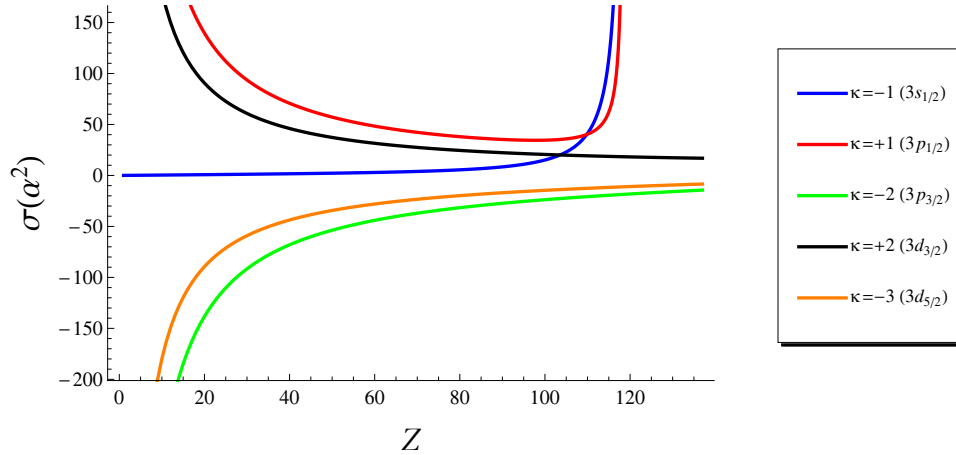
Rys. 22: Stała ekranowania magnetycznego  $\sigma$  dla stanów z  $n = 1$  oraz  $\mu = \pm 1/2$  jako funkcja liczby  $Z$ .

<sup>19</sup>W rozdziale 6 niniejszej rozprawy [patrz przypis 12 na str. 62] pokazano, iż całka typu (C.19) dla atomu znajdującego się w stanie o symetrii  $|\kappa| = 1$ , będzie zbieżna dla  $Z \leq 118$ . W związku z tym, krzywe prezentujące zależność  $\sigma(Z)$  dla stanów z  $\kappa = \pm 1$  zostały wykreślone dla  $Z$  od 1 do 118.



Rys. 23: Stała ekranowania magnetycznego  $\sigma$  dla stanów z  $n = 2$  oraz  $\mu = \pm 1/2$  jako funkcja liczby  $Z$ .

Na powyższych rysunkach widać wyraźnie, iż  $\sigma$  nigdy nie przyjmuje wartości zero. Na kolejnym wykresie pokazano, jak zmienia się stała ekranowania magnetycznego jądra atomu znajdującego się w drugim stanie wzbudzonym. Pamiętając o degeneracji stanów, przedstawiono zależność  $\sigma(Z)$  dla wszystkich stanów z główną liczbą kwantową  $\mathcal{N} = 3$  oraz magnetyczną liczbą kwantową<sup>20</sup>  $\mu = \pm 1/2$ .

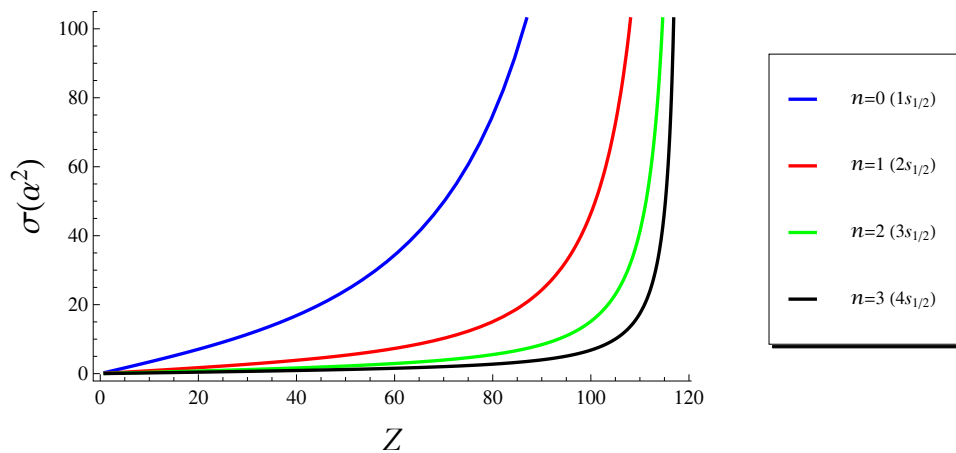


Rys. 24: Stała ekranowania magnetycznego  $\sigma$  dla stanów z  $\mathcal{N} = 3$  oraz  $\mu = \pm 1/2$  jako funkcja liczby  $Z$ .

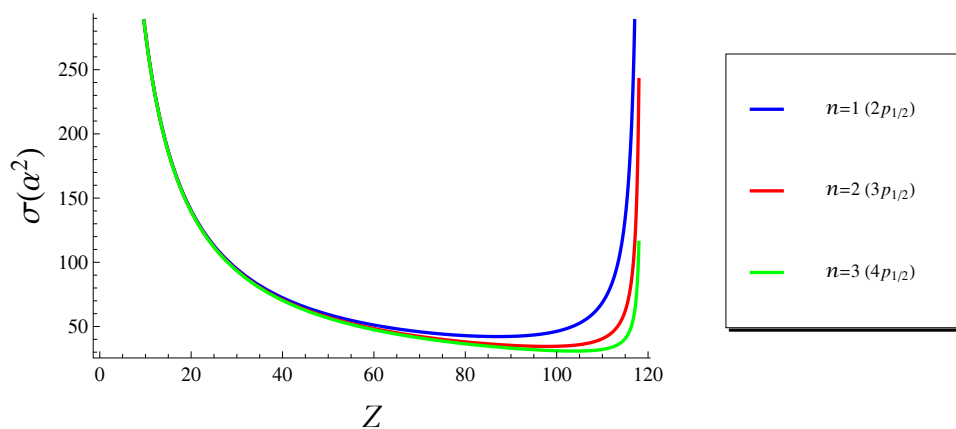
Analizując powyższy rysunek, wracając jednocześnie na chwilę do rysunków od 21 do 23, możemy wywnioskować, iż dla stanów o symetrii  $\kappa > 0$  stała ekranowania  $\sigma$  przyjmuje wartości dodatnie, zaś w przypadku stanów z  $\kappa < 0$  – wartości ujemne. Wyjątek od tej reguły stanowią stany z  $\kappa = -1$ .

Przejdziemy teraz do następnej grupy wykresów, prezentujących zależność  $\sigma(Z)$  dla stanów o określonej symetrii  $\kappa$  i magnetycznej liczbie kwantowej  $\mu$ .

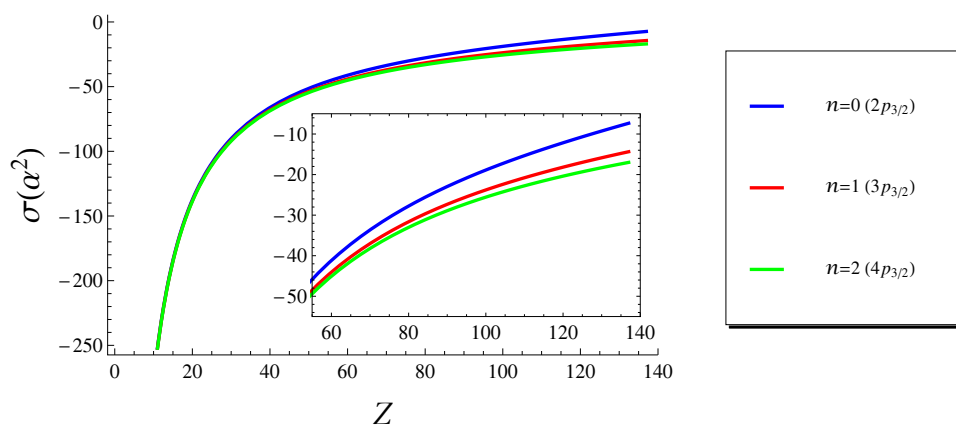
<sup>20</sup>Podobnie, jak w przypadku magnetyzowalności, definicja (7.4) stałej ekranowania jest wyrażeniem *parzystym* względem  $\mu$ . W niniejszym podrozdziale również skupimy się na stanach o najniższej wartości bezwzględnej magnetycznej liczby kwantowej, czyli z  $|\mu| = 1/2$ .



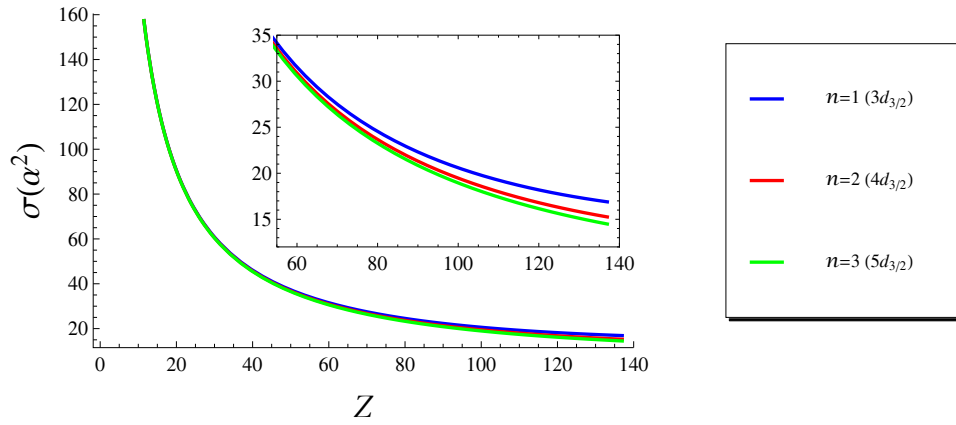
Rys. 25: Stała ekranowania magnetycznego  $\sigma$  dla stanów z  $\kappa = -1$  oraz  $\mu = \pm 1/2$  jako funkcja liczby  $Z$ .



Rys. 26: Stała ekranowania magnetycznego  $\sigma$  dla stanów z  $\kappa = +1$  oraz  $\mu = \pm 1/2$  jako funkcja liczby  $Z$ .



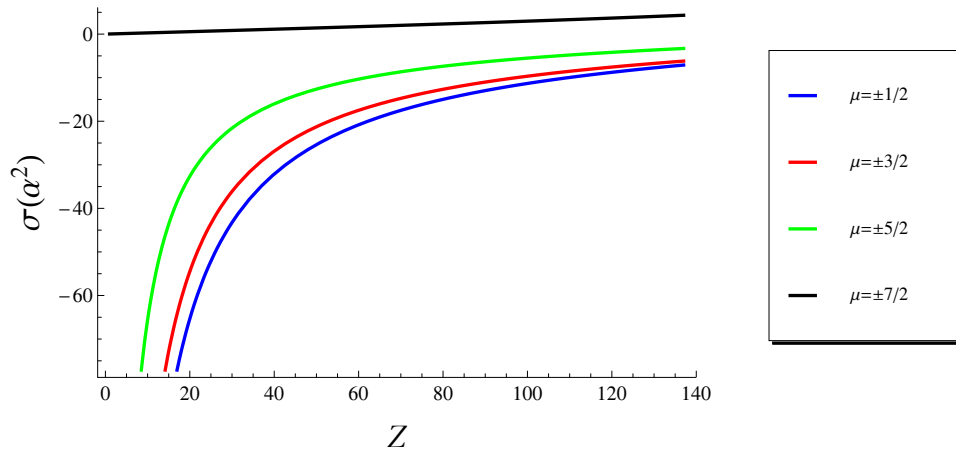
Rys. 27: Stała ekranowania magnetycznego  $\sigma$  dla stanów z  $\kappa = -2$  oraz  $\mu = \pm 1/2$  jako funkcja liczby  $Z$ .



Rys. 28: Stała ekranowania magnetycznego  $\sigma$  dla stanów z  $\kappa = +2$  oraz  $\mu = \pm 1/2$  jako funkcja liczby  $Z$ .

Z rysunków 27 i 28 wnioskujemy, iż wartości stałej ekranowania dla stanów z  $|\kappa| = 2$  są bardzo zbliżone dla pierwszej połowy rozpatrywanego zakresu liczby atomowej  $Z$ . Krzywe zależności  $\sigma(Z)$  stają się rozróżnialne dopiero dla  $Z > 60$ , co zostało zaprezentowane na powiększonych fragmentach wykresów.

Kolejny rysunek przedstawia zależność stałej ekranowania magnetycznego od  $Z$  dla stanu  $4f_{7/2}$ ; zmieniamy tutaj wartości liczby  $\mu$ .



Rys. 29: Stała ekranowania magnetycznego  $\sigma$  dla grupy stanów  $4f_{7/2}$  jako funkcja liczby  $Z$ .



## 8 Podsumowanie

W rozprawie został przedstawiony opis wpływu zewnętrznego słabego, statycznego, jednorodnego pola magnetycznego na relatywistyczny atom jednoelektronowy. Przyjęcie założenia odnośnie natężenia zewnętrznego pola magnetycznego umożliwiło posłużenie się w obliczeniach technikami perturbacyjnymi. Bazując na równaniu Diraca, stosując stacjonarny rachunek zaburzeń połączony z techniką funkcji Greena, wyznaczono poprawkę pierwszego rzędu do funkcji falowej stanu atomu. Z dokładnością do wyrazów tego samego rzędu względem zaburzenia zdefiniowano również gęstość indukowanego w atomie ładunku elektrycznego  $\rho^{(1)}(\mathbf{r})$  oraz gęstość indukowanego prądu elektrycznego  $\mathbf{j}^{(1)}(\mathbf{r})$ .

Poprawki te wykorzystano do opisu momentów elektrycznych i magnetycznych, indukowanych w atomie pod wpływem umieszczenia go w słabym zewnętrznym polu magnetycznym  $\mathcal{B}$ . W pracy skoncentrowano się na zbadaniu tych momentów na poziomie najniższym, dla którego przynajmniej jedna z ich składowych jest różna od zera. W odniesieniu do momentów magnetycznych analizy takiej dokonano na poziomie dipolowym. W przypadku rodziny momentów elektrycznych wykazano, iż atom izolowany posiada tylko trwałe momenty parzystopolowe; pokazano także, że w obecności pola magnetycznego w atomie mogą się indukować również tylko elektryczne momenty rzędu parzystego. W związku z tym, w rozprawie przedstawiono obliczenia elektrycznego momentu kwadrupolowego atomu.

Wyżej wymienione momenty, tj. indukowany magnetyczny moment dipolowy oraz indukowany elektryczny moment kwadrupolowy, wyrażono za pomocą odpowiednich podatności elektromagnetycznych. W przypadku pierwszego z nich wykorzystano dipolową podatność magnetyczną (magnetyzowalność), zaś w drugim przypadku posłużono się tzw. podatnością krzyżową typu *magnetyczny dipol*  $\rightarrow$  *elektryczny kwadrupol* ( $\alpha_{M1 \rightarrow E2}$ ). W rozprawie znaleziono ściśle analityczne wyrażenia dla obu tych wielkości fizycznych, charakteryzujących dowolny dyskretny stan energetyczny atomu [wzory (4.98) oraz (5.101)]. W obliczeniach wykorzystano rozwinięcie Sturmowskie uogólnionej radialnej funkcji Greena–Diraca–Coulomba [39]. Uzyskane wyniki zawierają uogólnione funkcje hipergeometryczne  ${}_3F_2$  z jednostkowym argumentem. Wydaje się, że ściśle relatywistyczne obliczenia tych wielkości dla *dowolnego* stanu wzbudzonego atomu zostały przeprowadzone po raz pierwszy.

Aby zweryfikować poprawność otrzymanych wyników, sprawdzono, do czego sprowadzają się ogólne formuły dla pewnych szczególnych stanów atomu. W przypadku magnetyzowalności stwierdzono, iż dla stanów z radialną liczbą kwantową  $n = 0$  uzyskany wynik pokrywa się z rezultatami uzyskanymi niezależnie przez Manakova i Zapryagaeva [31] oraz Labzovsky’ego i współpracowników [34]. Ponadto, dla stanu podstawowego atomu otrzymane wyrażenie jest tożsame z wynikami zawartymi w pracach [27, 28, 32, 33, 54].

Wyrażenie dla indukowanego elektrycznego momentu kwadrupolowego atomu Diraca [wzór (5.93)], zapisane dla przypadku stanu podstawowego atomu, pokrywa się z wynikiem uzyskanym w pracy [38]; w granicy nierelatywistycznej zbiega ono do zera, co potwierdza wyniki wcześniejszych obliczeń tej wielkości [35–37], przeprowadzonych dla atomu z elektronem Schrödingera lub Pauliego, które przewidywały *kwadratową* zależność  $Q_g^{(1)}$  od pola. W związku z tym, uzyskana w rozprawie *liniowa* zależność  $Q_g^{(1)}$  od  $\mathcal{B}$  może być traktowana jako efekt czysto relatywistyczny.

Znajomość poprawki  $\mathbf{j}^{(1)}(\mathbf{r})$  umożliwiła również scharakteryzowanie indukowanej zmiany pola magnetycznego w miejscu położenia jądra poprzez wyznaczenie tzw. stałej ekranowania magnetycznego atomu. Stosując tę samą technikę obliczeniową, jak w przypadku magnetyzowalności oraz podatności krzyżowej  $\alpha_{M1 \rightarrow E2}$ , w rozprawie przeprowadzono – wydaje się, że po raz pierwszy – ściśle analityczne obliczenia relatywistyczne tej wielkości dla atomu znajdującego się w *dowolnym* stanie wzbudzonym. W ich rezultacie otrzymano zupełnie ogólne wyrażenie dla tej stałej [wzór (6.122)], zawierające uogólnione funkcje hipergeometryczne  ${}_3F_2$  z jednostkowym argumentem.

W celu zweryfikowania poprawności otrzymanego wyniku dla stałej ekranowania magnetycznego, wyznaczono jego postacie dla pewnych szczególnych stanów atomu. Znaleziono wzór określający tę wielkość dla stanów typu  $s$ , czyli tych stanów atomu, dla których  $\kappa = -1$ . Rezultat ten porównano

z wyrażeniem uzyskanym zupełnie inną metodą przez Ivanova i współpracowników [46]. Po uwzględnieniu zmiany znaku w definicji omawianej wielkości (w cytowanej pracy  $\sigma$  została zdefiniowana ze znakiem przeciwnym w stosunku do definicji użytej w niniejszej rozprawie) stwierdzono, iż dla stanów z radialną liczbą kwantową przyjmującą wartości ze zbioru  $n \in \{0, 1, 2, \dots, 11\}$  konfrontowane wyrażenia są identyczne. Test zgodności wyniku (6.122) z danymi literaturowymi przeprowadzono również dla stanu podstawowego. W jego efekcie stwierdzono, iż otrzymane wyrażenie zgadza się z rezultatami uzyskanymi przez innych autorów [43, 44, 47].

Wykorzystując program *Mathematica 9*, obliczono wartości liczbowe wszystkich trzech wielkości omawianych w rozprawie, tj. dla magnetyzowalności, podatności krzyżowej typu magnetyczny dipol→elektryczny kwadrupol oraz dla stałej ekranowania magnetycznego, dla kilku różnych stanów atomu. Otrzymane wyniki przedstawiono w formie wykresów, jako funkcje liczby atomowej  $Z$ . Dodatkowo, dla magnetyzowalności jako wielkości najczęściej wykorzystywanej do opisu magnetycznych właściwości atomów, sporządzono tabele jej wartości dla  $Z$  od 1 do 137, dla kilku wybranych stanów atomu. Uzyskane w ten sposób wyniki porównano z dostępnymi danymi literaturowymi; stwierdzono, iż niemal wszystkie wartości  $\chi(Z)$  stabicowane przez Rutkowskiego i Poszwę w pracy [50] są identyczne z wynikami zawartymi w tabelach od 1 do 9 – analizując dane w postaci kilkuset wartości liczbowych, znaleziono zaledwie trzy rozbieżności, występujące na dosyć dalekich miejscach znaczących porównywanych liczb.

W przygotowaniu są publikacje, zawierające wyniki uzyskane przez autorkę w ramach niniejszej rozprawy.

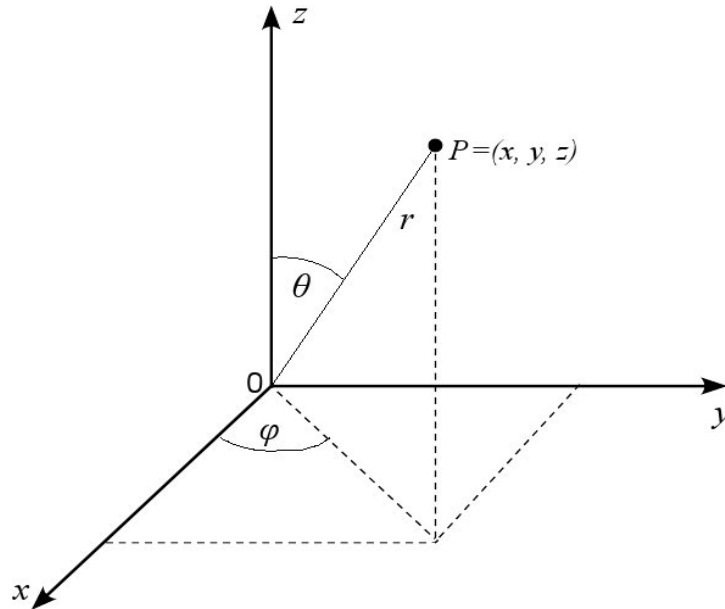
Na zakończenie warto zwrócić uwagę, że wykorzystana w rozprawie technika obliczeniowa jest uniwersalna. W przyszłości technika ta będzie mogła zostać wykorzystana do wyznaczenia również innych parametrów charakteryzujących własności elektryczne i magnetyczne atomu w dyskretnych stanach wzbudzonych; wśród tych parametrów w pierwszym rzędzie należy wymienić dipolową polaryzowalność elektryczną, a w dalszych – elektryczne i magnetyczne atomowe podatności multipolowe.

# Uzupełnienia

## A Układ współrzędnych, harmoniki i spinory sferyczne

### A.1 Sferyczny układ współrzędnych, baza cykliczna

Wybór układu współrzędnych, w którym najwygodniej jest rozwiązywać dany problem fizyczny, jest bardzo ważną kwestią, towarzyszącą analizie większości zagadnień fizyki matematycznej. Bardzo często, zwłaszcza przy omawianiu problemów fizyki atomowej, najwygodniejszym okazuje się być sferyczny układ współrzędnych. Rozpatrywany w niniejszej rozprawie układ fizyczny, jakim jest atom jednoelektronowy, najlepiej jest opisywać, posługując się właśnie takim układem odniesienia. Na rysunku 30 przedstawiono tradycyjny, prawoskrętny kartezjański układ współrzędnych  $(x, y, z)$ , w zestawieniu ze wspomnianym sferycznym układem współrzędnych  $(r, \theta, \varphi)$ .



Rys. 30: Sferyczny układ współrzędnych.

Składowe wektora wodzącego  $\mathbf{r}$  (określającego położenie dowolnego punktu  $P$  w przestrzeni trójwymiarowej) we współrzędnych sferycznych mają postać

$$\mathbf{r} = [r, \theta, \varphi], \quad (\text{A.1})$$

gdzie  $r$  określa długość wektora  $\mathbf{r}$ , czyli odległość punktu  $P$  od początku układu współrzędnych (Rys. 30), zaś  $\theta$  i  $\varphi$  to odpowiednio kąty biegunowy i azymutalny; zakres wartości tych współrzędnych określa poniższy układ nierówności:

$$0 \leq r < \infty, \quad 0 \leq \theta \leq \pi, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi. \quad (\text{A.2})$$

Zdefiniowane powyżej wielkości  $r$ ,  $\theta$ ,  $\varphi$  są powiązane ze współrzędnymi kartezjańskimi w następujący sposób:

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad (\text{A.3})$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad (\text{A.4})$$

$$z = r \cos \theta. \quad (\text{A.5})$$

Jakobian przejścia pomiędzy współrzędnymi kartezjańskimi i sferycznymi wynosi

$$J = r^2 \sin \theta, \quad (\text{A.6})$$

w związku z czym, dla odpowiednio regularnej funkcji  $f(\mathbf{r})$ , całki po przestrzeni  $\mathbb{R}^3$  możemy obliczać według przepisu

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r} f(\mathbf{r}) = \int_0^\infty dr r^2 \oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r f(\mathbf{r}), \quad (\text{A.7})$$

przy czym

$$\oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r (\dots) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin \theta (\dots), \quad (\text{A.8})$$

gdzie  $\mathbf{n}_r = \mathbf{r}/r$  jest wektorem jednostkowym o kierunku zgodnym z kierunkiem wektora  $\mathbf{r}$ .

Wersory kartezjańskiego układu odniesienia  $\mathbf{n}_x$ ,  $\mathbf{n}_y$ ,  $\mathbf{n}_z$ , zdefiniowane jako

$$\mathbf{n}_x = [1, 0, 0], \quad (\text{A.9})$$

$$\mathbf{n}_y = [0, 1, 0], \quad (\text{A.10})$$

$$\mathbf{n}_z = [0, 0, 1], \quad (\text{A.11})$$

są powiązane z wersorami cyklicznego układu współrzędnych  $\mathbf{e}_0$ ,  $\mathbf{e}_{\pm 1}$  następującymi zależnościami [97, 98]:

$$\mathbf{n}_x = -\frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{e}_{+1} - \mathbf{e}_{-1}), \quad (\text{A.12})$$

$$\mathbf{n}_y = \frac{i}{\sqrt{2}} (\mathbf{e}_{+1} + \mathbf{e}_{-1}), \quad (\text{A.13})$$

$$\mathbf{n}_z = \mathbf{e}_0. \quad (\text{A.14})$$

Relacje odwrotne do powyższych mają postać

$$\mathbf{e}_0 = \mathbf{n}_z, \quad (\text{A.15})$$

$$\mathbf{e}_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{n}_x \pm i\mathbf{n}_y). \quad (\text{A.16})$$

## A.2 Harmoniki sferyczne

Zespolone harmoniki sferyczne (lub po prostu *harmoniki sferyczne*)  $Y_{lm}(\mathbf{n}_r)$  definiujemy w następujący sposób:

$$Y_{lm}(\mathbf{n}_r) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad (\text{A.17})$$

przy czym  $l = 0, 1, 2, \dots$  oraz  $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$ , zaś  $P_l^m(x)$  to stowarzyszona funkcja Legendre'a pierwszego rodzaju, określona zgodnie z konwencją fazową Condon–Shortleya [99]:

$$P_l^m(x) = \frac{(-)^m}{2^l l!} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{l+m}(x^2-1)^l}{dx^{l+m}} \quad (-1 \leq x \leq 1). \quad (\text{A.18})$$

Posiadają one następującą własność:

$$Y_{l,-m}^*(\mathbf{n}_r) = (-)^m Y_{lm}(\mathbf{n}_r). \quad (\text{A.19})$$

Poniżej zestawimy jawne postacie harmonik sferycznych z  $l = 2$ , szczególnie przydatnych w niniejszej pracy:

$$Y_{20}(\mathbf{n}_r) = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left( \frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right), \quad (\text{A.20})$$

$$Y_{2,\pm 1}(\mathbf{n}_r) = \mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}, \quad (\text{A.21})$$

$$Y_{2,\pm 2}(\mathbf{n}_r) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}. \quad (\text{A.22})$$

Z punktu widzenia obliczeń przeprowadzonych w rozdziale 5 wygodniejsze są następujące postacie harmonik  $Y_{2m}(\mathbf{n}_r)$ :

$$Y_{20}(\mathbf{n}_r) = \frac{3}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (\mathbf{e}_0 \cdot \mathbf{n}_r)^* (\mathbf{e}_0 \cdot \mathbf{n}_r) - \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}}, \quad (\text{A.23})$$

$$Y_{2,\pm 1}(\mathbf{n}_r) = \sqrt{\frac{15}{4\pi}} (\mathbf{e}_0 \cdot \mathbf{n}_r)^* (\mathbf{e}_{\pm 1} \cdot \mathbf{n}_r), \quad (\text{A.24})$$

$$Y_{2,\pm 2}(\mathbf{n}_r) = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} (\mathbf{e}_{\mp 1} \cdot \mathbf{n}_r)^* (\mathbf{e}_{\pm 1} \cdot \mathbf{n}_r), \quad (\text{A.25})$$

gdzie  $\mathbf{n}_r = \mathbf{r}/r$ , zaś  $\mathbf{e}_0$  i  $\mathbf{e}_{\pm 1}$  to wersory cyklicznego układu współrzędnych (uzupełnienie A.1).

### A.3 Spinory sferyczne<sup>21</sup>

Spinory sferyczne to funkcje pojawiające się podczas separacji równania Diraca dla pola centralnego [61–65]. Opisują one część kątową funkcji falowej elektronu w relatywistycznym atomie jednoelektronowym, można je zatem traktować jako odpowiedniki harmonik sferycznych (uzupełnienie A.2). Definiujemy je jako dwuskładnikowe funkcje wektora jednostkowego  $\mathbf{n}_r$ , a więc także kątów  $\theta$  oraz  $\varphi$  sferycznego układu współrzędnych:

$$\Omega_{\kappa\mu}(\mathbf{n}_r) = \begin{pmatrix} \text{sgn}(-\kappa) \sqrt{\frac{\kappa + \frac{1}{2} - \mu}{2\kappa + 1}} Y_{l,\mu - \frac{1}{2}}(\mathbf{n}_r) \\ \sqrt{\frac{\kappa + \frac{1}{2} + \mu}{2\kappa + 1}} Y_{l,\mu + \frac{1}{2}}(\mathbf{n}_r) \end{pmatrix}, \quad (\text{A.26})$$

gdzie  $\kappa = \pm 1, \pm 2, \dots$ ,  $\mu = -|\kappa| + \frac{1}{2}, -|\kappa| + \frac{3}{2}, \dots, |\kappa| - \frac{1}{2}$ , liczba  $l$  przyjmuje wartości

$$l \equiv l_\kappa = \left| \kappa + \frac{1}{2} \right| - \frac{1}{2} = \begin{cases} \kappa & \text{dla } \kappa > 0 \\ -\kappa - 1 & \text{dla } \kappa < 0, \end{cases} \quad (\text{A.27})$$

zaś  $Y_{lm}(\mathbf{n}_r)$  to zespolona harmonika sferyczna, omówiona w poprzednim podrozdziale. Zgodnie z definicją (A.26), w niniejszej pracy spinory sferyczne będziemy indeksować przy pomocy dwóch

<sup>21</sup>Podrozdział A.3 oparto na pracach [93, 100, 101].

liczb kwantowych:  $\kappa$  oraz  $\mu$ . Niekiedy wykorzystuje się inny, równoważny sposób oznaczania tych funkcji za pomocą trzech liczb  $j$ ,  $l$  oraz  $\mu$ , przy czym

$$j = |\kappa| - \frac{1}{2}, \quad (\text{A.28})$$

liczba  $l$  została zdefiniowana wzorem (A.27), natomiast  $\mu$  przyjmuje wartości wyszczególnione bezpośrednio po definicji (A.26). Liczbę  $\kappa$  (nazywaną czasem kombinowaną liczbą kwantową operatorów parzystości i momentu pędu) można określić jednoznacznie, posługując się liczbami  $j$  oraz  $l$ ; odpowiednia relacja ma postać:

$$\kappa = (l - j)(2j + 1). \quad (\text{A.29})$$

W rozdziale piątym niniejszej rozprawy pojawia się kwestia określenia parzystości wyrażenia  $l_\kappa + l_{\kappa'}$  dla dwóch przypadków:

1. gdy  $\kappa' = \kappa$ ,
2. gdy  $\kappa' = -\kappa \pm 1$ .

O ile w pierwszym przypadku sprawa jest oczywista (rozpatrywane wyrażenie wynosi  $2l_\kappa$  i jest liczbą parzystą), o tyle druga możliwość wymaga krótkiego komentarza. Mianowicie, korzystając z zależności (A.27), możemy zapisać

$$l_{-\kappa-1} = \left| -\kappa - \frac{1}{2} \right| - \frac{1}{2} = \begin{cases} \kappa & \text{dla } \kappa > 0 \\ -\kappa - 1 & \text{dla } \kappa < 0 \end{cases} \quad (\text{A.30})$$

oraz

$$l_{-\kappa+1} = \left| -\kappa + \frac{3}{2} \right| - \frac{1}{2} = \begin{cases} \kappa - 2 & \text{dla } \kappa > 0 \\ -\kappa + 1 & \text{dla } \kappa < 0, \end{cases} \quad (\text{A.31})$$

przy czym uwzględniono tutaj fakt, iż liczba  $\kappa$  nigdy nie przyjmuje wartości zero. Biorąc pod uwagę równania (A.27), (A.30) oraz (A.31), dostajemy

$$l_\kappa + l_{-\kappa-1} = \begin{cases} 2\kappa & \text{dla } \kappa > 0 \\ -2\kappa - 2 & \text{dla } \kappa < 0 \end{cases} \quad (\text{A.32})$$

oraz

$$l_\kappa + l_{-\kappa+1} = \begin{cases} 2\kappa - 2 & \text{dla } \kappa > 0 \\ -2\kappa & \text{dla } \kappa < 0. \end{cases} \quad (\text{A.33})$$

Z powyższych rozważań wynika, iż dla  $\kappa' = -\kappa \pm 1$  suma  $l_\kappa + l_{\kappa'}$  będzie liczbą *parzystą*, niezależnie od tego, czy  $\kappa$  przyjmuje wartości całkowite dodatnie, czy ujemne.

Spinory sferyczne posiadają szereg różnych własności, spełniają ponadto wiele relacji rekurencyjnych i różniczkowych [100, 101]. Poniżej zaprezentujemy kilka z nich, szczególnie przydatnych w niniejszej pracy.

Pierwszą ze wspomnianych własności, a zarazem najczęściej wykorzystywaną w tej rozprawie, jest relacja ortonormalności

$$\oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r \Omega_{\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}_r) \Omega_{\kappa'\mu'}(\mathbf{n}_r) = \delta_{\kappa\kappa'} \delta_{\mu\mu'}. \quad (\text{A.34})$$

Podczas obliczania całek kątowych w tej pracy wykorzystywane są także relacje rekurencyjne i różniczkowe spełniane przez spinory sferyczne.

Relacje rekurencyjne podzielimy na trzy grupy:

- relacje zawierające iloczyn skalarny jednego z wersorów bazy cyklicznej oraz wektora  $\mathbf{n}_r$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_0 \cdot \mathbf{n}_r \Omega_{\kappa\mu}(\mathbf{n}_r) &= -\frac{2\mu}{4\kappa^2 - 1} \Omega_{-\kappa\mu}(\mathbf{n}_r) + \frac{\sqrt{\left(\kappa + \frac{1}{2}\right)^2 - \mu^2}}{|2\kappa + 1|} \Omega_{\kappa+1,\mu}(\mathbf{n}_r) \\ &\quad + \frac{\sqrt{\left(\kappa - \frac{1}{2}\right)^2 - \mu^2}}{|2\kappa - 1|} \Omega_{\kappa-1,\mu}(\mathbf{n}_r), \end{aligned} \quad (\text{A.35})$$

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_{\pm 1} \cdot \mathbf{n}_r \Omega_{\kappa\mu}(\mathbf{n}_r) &= \pm\sqrt{2} \frac{\sqrt{\kappa^2 - \left(\mu \pm \frac{1}{2}\right)^2}}{4\kappa^2 - 1} \Omega_{-\kappa,\mu\pm 1}(\mathbf{n}_r) \\ &\quad + \frac{\sqrt{\left(\kappa \pm \mu + \frac{1}{2}\right) \left(\kappa \pm \mu + \frac{3}{2}\right)}}{\sqrt{2}(2\kappa + 1)} \Omega_{\kappa+1,\mu\pm 1}(\mathbf{n}_r) \\ &\quad - \frac{\sqrt{\left(\kappa \mp \mu - \frac{1}{2}\right) \left(\kappa \mp \mu - \frac{3}{2}\right)}}{\sqrt{2}(2\kappa - 1)} \Omega_{\kappa-1,\mu\pm 1}(\mathbf{n}_r), \end{aligned} \quad (\text{A.36})$$

- relacje zawierające iloczyn skalarny jednego z wersorów bazy cyklicznej oraz wektora  $\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_0 \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu}(\mathbf{n}_r) &= i \frac{4\mu\kappa}{4\kappa^2 - 1} \Omega_{-\kappa\mu}(\mathbf{n}_r) + i \frac{\sqrt{\left(\kappa + \frac{1}{2}\right)^2 - \mu^2}}{|2\kappa + 1|} \Omega_{\kappa+1,\mu}(\mathbf{n}_r) \\ &\quad - i \frac{\sqrt{\left(\kappa - \frac{1}{2}\right)^2 - \mu^2}}{|2\kappa - 1|} \Omega_{\kappa-1,\mu}(\mathbf{n}_r), \end{aligned} \quad (\text{A.37})$$

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_{\pm 1} \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu}(\mathbf{n}_r) &= \mp i 2\sqrt{2}\kappa \frac{\sqrt{\kappa^2 - \left(\mu \pm \frac{1}{2}\right)^2}}{4\kappa^2 - 1} \Omega_{-\kappa,\mu\pm 1}(\mathbf{n}_r) \\ &\quad + i \frac{\sqrt{\left(\kappa \pm \mu + \frac{1}{2}\right) \left(\kappa \pm \mu + \frac{3}{2}\right)}}{\sqrt{2}(2\kappa + 1)} \Omega_{\kappa+1,\mu\pm 1}(\mathbf{n}_r) \\ &\quad + i \frac{\sqrt{\left(\kappa \mp \mu - \frac{1}{2}\right) \left(\kappa \mp \mu - \frac{3}{2}\right)}}{\sqrt{2}(2\kappa - 1)} \Omega_{\kappa-1,\mu\pm 1}(\mathbf{n}_r), \end{aligned} \quad (\text{A.38})$$

- relacja zawierająca iloczyn skalarny wektora  $\mathbf{n}_r$  i wektora  $\boldsymbol{\sigma}$ :

$$\mathbf{n}_r \cdot \boldsymbol{\sigma} \Omega_{\kappa\mu}(\mathbf{n}_r) = -\Omega_{-\kappa\mu}(\mathbf{n}_r). \quad (\text{A.39})$$

Podczas separacji części kątowej i radialnej równania Diraca wykorzystuje się następującą relację różniczkową dla spinorów sferycznych:

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla F(r) \Omega_{\kappa\mu}(\mathbf{n}_r) = - \left[ \frac{d}{dr} + \frac{\kappa + 1}{r} \right] F(r) \Omega_{-\kappa\mu}(\mathbf{n}_r), \quad (\text{A.40})$$

która po zastosowaniu podstawienia

$$F(r) = \frac{1}{r} f(r) \quad (\text{A.41})$$

przyjmuje postać

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \left[ \frac{1}{r} f(r) \Omega_{\kappa\mu}(\mathbf{n}_r) \right] = -\frac{1}{r} \left[ \frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r} \right] f(r) \Omega_{-\kappa\mu}(\mathbf{n}_r). \quad (\text{A.42})$$

Wektor  $\boldsymbol{\sigma}$ , pojawiający się w większości spośród wymienionych wyżej relacji, to wektor Pauliego, zbudowany w następujący sposób:

$$\boldsymbol{\sigma} = [\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z], \quad (\text{A.43})$$

przy czym  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  oraz  $\sigma_z$  to macierze Pauliego, dane wzorami:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.44})$$



## B Całki kątowe

We wszystkich zagadnieniach omawianych w niniejszej rozprawie mamy do czynienia z całkami po całej przestrzeni trójwymiarowej  $\mathbb{R}^3$ , które podlegają rozseparowaniu na część radialną i kątową. Powstałe w wyniku tej separacji całki radialne zostaną przedstawione w uzupełnieniu C; w tym miejscu zaś omówimy całki kątowe.

Całki kątowe, pojawiające się w tej pracy, możemy sklasyfikować w następujący sposób:

- zawierające dwa spinory sferyczne i jedną harmonikę sferyczną<sup>22</sup>:

$$\oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r \Omega_{\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}_r) Y_{LM}(\mathbf{n}_r) \Omega_{\kappa'm}(\mathbf{n}_r) \quad (\text{B.1})$$

- zawierające dwa spinory sferyczne oraz iloczyn mieszany trzech wektorów:

$$\oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r \Omega_{\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}_r) \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa'm}(\mathbf{n}_r). \quad (\text{B.2})$$

Spełniają one szereg własności, z których najważniejsze z punktu widzenia tej pracy zostaną przedstawione i udowodnione w niniejszym uzupełnieniu.

Zachodzą następujące relacje:

$$\oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r \Omega_{\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}_r) Y_{LM}(\mathbf{n}_r) \Omega_{\kappa'm}(\mathbf{n}_r) = (-)^{L+l_\kappa+l_{\kappa'}} \oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r \Omega_{\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}_r) Y_{LM}(\mathbf{n}_r) \Omega_{\kappa'm}(\mathbf{n}_r), \quad (\text{B.3})$$

$$\oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r \Omega_{\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}_r) Y_{LM}(\mathbf{n}_r) \Omega_{\kappa'm}(\mathbf{n}_r) = \oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r \Omega_{-\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}_r) Y_{LM}(\mathbf{n}_r) \Omega_{-\kappa'm}(\mathbf{n}_r), \quad (\text{B.4})$$

$$\oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r \Omega_{-\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}_r) \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa'm}(\mathbf{n}_r) = - \oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r \Omega_{\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}_r) \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa'm}(\mathbf{n}_r). \quad (\text{B.5})$$

Dowód własności (B.3) opiera się na wykorzystaniu parzystości harmonik i spinorów sferycznych, tj.:

$$\begin{aligned} \oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r \Omega_{\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}_r) Y_{LM}(\mathbf{n}_r) \Omega_{\kappa'm}(\mathbf{n}_r) &= \oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r \Omega_{\kappa\mu}^\dagger(-\mathbf{n}_r) Y_{LM}(-\mathbf{n}_r) \Omega_{\kappa'm}(-\mathbf{n}_r) \\ &= \oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r \left[ (-)^{l_\kappa} \Omega_{\kappa\mu}(\mathbf{n}_r) \right]^\dagger (-)^L Y_{LM}(\mathbf{n}_r) (-)^{l_{\kappa'}} \Omega_{\kappa'm}(\mathbf{n}_r) \\ &= (-)^{L+l_\kappa+l_{\kappa'}} \oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r \Omega_{\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}_r) Y_{LM}(\mathbf{n}_r) \Omega_{\kappa'm}(\mathbf{n}_r). \quad \blacksquare \quad (\text{B.6}) \end{aligned}$$

Udowodnienie relacji (B.4) oraz (B.5) opiera się na wykorzystaniu relacji (A.39) oraz na elementarnej algebrze macierzy Pauliego.

<sup>22</sup>Całki tego typu zostały obliczone przez autorkę tej pracy dwoma różnymi sposobami: Obok przedstawionej w rozprawie metody wykorzystującej jawne postaci harmonik sferycznych oraz relacje rekurencyjne dla spinorów sferycznych, alternatywnym sposobem wyznaczenia tego typu całek jest metoda oparta na teorii współczynników 3-j Wignera [93, 94].

Prawdziwość wzoru (B.4) pokażemy w następujący sposób:

$$\begin{aligned}
& \oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r \Omega_{\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}_r) Y_{LM}(\mathbf{n}_r) \Omega_{\kappa'm}(\mathbf{n}_r) \\
&= \oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r \Omega_{\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}_r) (\mathbf{n}_r \cdot \boldsymbol{\sigma})^2 Y_{LM}(\mathbf{n}_r) \Omega_{\kappa'm}(\mathbf{n}_r) \\
&= \oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r [(\mathbf{n}_r \cdot \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu}(\mathbf{n}_r)]^\dagger Y_{LM}(\mathbf{n}_r) (\mathbf{n}_r \cdot \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa'm}(\mathbf{n}_r) \\
&= \oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r (-) \Omega_{-\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}_r) Y_{LM}(\mathbf{n}_r) (-) \Omega_{-\kappa'm}(\mathbf{n}_r) \\
&= \oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r \Omega_{-\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}_r) Y_{LM}(\mathbf{n}_r) \Omega_{-\kappa'm}(\mathbf{n}_r). \quad \blacksquare
\end{aligned} \tag{B.7}$$

Dowód ostatniej z trzech wymienionych własności, czyli wzoru (B.5), przeprowadzimy w trzech etapach. Zapiszmy najpierw:

$$\begin{aligned}
& \oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r \Omega_{-\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}_r) \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa'm}(\mathbf{n}_r) \\
&= \oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r [-(\mathbf{n}_r \cdot \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa\mu}(\mathbf{n}_r)]^\dagger \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) [-(\mathbf{n}_r \cdot \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa'm}(\mathbf{n}_r)] \\
&= \oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r \Omega_{\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}_r) (\mathbf{n}_r \cdot \boldsymbol{\sigma})^\dagger \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) (\mathbf{n}_r \cdot \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa'm}(\mathbf{n}_r) \\
&= \oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r \Omega_{\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}_r) [(\mathbf{n}_r \cdot \boldsymbol{\sigma}) \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) (\mathbf{n}_r \cdot \boldsymbol{\sigma})] \Omega_{-\kappa'm}(\mathbf{n}_r).
\end{aligned} \tag{B.8}$$

Rozważmy teraz część wyrażenia występującego w nawiasie kwadratowym w ostatnim wierszu powyższego wzoru. W oparciu o kilka elementarnych operacji wektorowych oraz trywialne własności macierzy Pauliego, mamy

$$\begin{aligned}
[\mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma})] (\mathbf{n}_r \cdot \boldsymbol{\sigma}) &= [\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{n}_z \times \mathbf{n}_r)] (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}_r) = [(\mathbf{n}_z \times \mathbf{n}_r) \cdot \mathbf{n}_r] I + i\boldsymbol{\sigma} \cdot [(\mathbf{n}_z \times \mathbf{n}_r) \times \mathbf{n}_r] \\
&= -i\boldsymbol{\sigma} \cdot [\mathbf{n}_r \times (\mathbf{n}_z \times \mathbf{n}_r)] = -i\boldsymbol{\sigma} \cdot [\mathbf{n}_z (\mathbf{n}_r \cdot \mathbf{n}_r) - \mathbf{n}_r (\mathbf{n}_r \cdot \mathbf{n}_z)] \\
&= -i\boldsymbol{\sigma} \cdot [\mathbf{n}_z - \mathbf{n}_r (\mathbf{n}_z \cdot \mathbf{n}_r)].
\end{aligned} \tag{B.9}$$

W związku z powyższym możemy napisać

$$\begin{aligned}
(\mathbf{n}_r \cdot \boldsymbol{\sigma}) [\mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma})] (\mathbf{n}_r \cdot \boldsymbol{\sigma}) &= (\mathbf{n}_r \cdot \boldsymbol{\sigma}) \left\{ -i\boldsymbol{\sigma} \cdot [\mathbf{n}_z - \mathbf{n}_r (\mathbf{n}_z \cdot \mathbf{n}_r)] \right\} \\
&= -i(\mathbf{n}_r \cdot \boldsymbol{\sigma}) (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}_z) + i(\mathbf{n}_r \cdot \boldsymbol{\sigma}) (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}_r) (\mathbf{n}_z \cdot \mathbf{n}_r) \\
&= -i[(\mathbf{n}_r \cdot \mathbf{n}_z) I + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{n}_r \times \mathbf{n}_z)] + i(\mathbf{n}_z \cdot \mathbf{n}_r) I \\
&= -i(\mathbf{n}_r \cdot \mathbf{n}_z) I + \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{n}_r \times \mathbf{n}_z) + i(\mathbf{n}_r \cdot \mathbf{n}_z) I \\
&= \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{n}_r \times \mathbf{n}_z) = \mathbf{n}_z \cdot (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{n}_r).
\end{aligned} \tag{B.10}$$

Uwzględniając ostatnią równość we wzorze (B.8), dostajemy ostatecznie

$$\begin{aligned}
& \oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r \Omega_{-\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}_r) \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{\kappa'm}(\mathbf{n}_r) = \oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r \Omega_{\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}_r) \mathbf{n}_z \cdot (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{n}_r) \Omega_{-\kappa'm}(\mathbf{n}_r) \\
&= - \oint_{4\pi} d^2\mathbf{n}_r \Omega_{\kappa\mu}^\dagger(\mathbf{n}_r) \mathbf{n}_z \cdot (\mathbf{n}_r \times \boldsymbol{\sigma}) \Omega_{-\kappa'm}(\mathbf{n}_r),
\end{aligned} \tag{B.11}$$

co kończy dowód własności (B.5).  $\blacksquare$

## C Całki radialne

Oprócz całek kątowych, omówionych w poprzednim uzupełnieniu, w niniejszej pracy wystąpiły również całki radialne, zawierające radialne funkcje falowe atomu (2.17)–(2.18) oraz radialne funkcje Sturma–Diraca–Coulomba (3.48)–(3.49). Wyznaczenie ich wartości stanowiło znaczną część wszystkich rachunków przeprowadzonych w ramach tej rozprawy. Dlatego też, aby zapewnić przejrzystość głównej części pracy, poszczególne etapy tychże rachunków zostały przedstawione w niniejszym uzupełnieniu.

Przypomnijmy tutaj postacie radialnych funkcji atomowych oraz radialnych sturmianów:

- radialne funkcje falowe relatywistycznego atomu jednoelektronowego:

$$P_{n\kappa}^{(0)}(r) = \sqrt{\frac{Z}{2a_0} \frac{(1 + \epsilon_{n\kappa})(n + 2\gamma_\kappa)n!}{N_{n\kappa}^2 (N_{n\kappa} - \kappa)\Gamma(n + 2\gamma_\kappa)}} \left(\frac{2Zr}{a_0 N_{n\kappa}}\right)^{\gamma_\kappa} e^{-Zr/a_0 N_{n\kappa}} \times \left[ L_{n-1}^{(2\gamma_\kappa)}\left(\frac{2Zr}{a_0 N_{n\kappa}}\right) + \frac{\kappa - N_{n\kappa}}{n + 2\gamma_\kappa} L_n^{(2\gamma_\kappa)}\left(\frac{2Zr}{a_0 N_{n\kappa}}\right) \right], \quad (\text{C.1})$$

$$Q_{n\kappa}^{(0)}(r) = \sqrt{\frac{Z}{2a_0} \frac{(1 - \epsilon_{n\kappa})(n + 2\gamma_\kappa)n!}{N_{n\kappa}^2 (N_{n\kappa} - \kappa)\Gamma(n + 2\gamma_\kappa)}} \left(\frac{2Zr}{a_0 N_{n\kappa}}\right)^{\gamma_\kappa} e^{-Zr/a_0 N_{n\kappa}} \times \left[ L_{n-1}^{(2\gamma_\kappa)}\left(\frac{2Zr}{a_0 N_{n\kappa}}\right) - \frac{\kappa - N_{n\kappa}}{n + 2\gamma_\kappa} L_n^{(2\gamma_\kappa)}\left(\frac{2Zr}{a_0 N_{n\kappa}}\right) \right], \quad (\text{C.2})$$

- radialne funkcje Sturma–Diraca–Coulomba dla  $\mathcal{E} = E_{n\kappa}^{(0)}$ :

$$S_{n'\kappa'}^{(0)}(2\lambda r) = \sqrt{\frac{\alpha\sqrt{1 + \epsilon_{n\kappa}}(|n'| + 2\gamma_{\kappa'})|n'|!}{2\sqrt{1 - \epsilon_{n\kappa}}N_{n'\kappa'}(N_{n'\kappa'} - \kappa')\Gamma(|n'| + 2\gamma_{\kappa'})}} \times (2\lambda r)^{\gamma_{\kappa'}} e^{-\lambda r} \left[ L_{|n'|-1}^{(2\gamma_{\kappa'})}(2\lambda r) + \frac{\kappa' - N_{n'\kappa'}}{|n'| + 2\gamma_{\kappa'}} L_{|n'|}^{(2\gamma_{\kappa'})}(2\lambda r) \right], \quad (\text{C.3})$$

$$T_{n'\kappa'}^{(0)}(2\lambda r) = \sqrt{\frac{\alpha\sqrt{1 - \epsilon_{n\kappa}}(|n'| + 2\gamma_{\kappa'})|n'|!}{2\sqrt{1 + \epsilon_{n\kappa}}N_{n'\kappa'}(N_{n'\kappa'} - \kappa')\Gamma(|n'| + 2\gamma_{\kappa'})}} \times (2\lambda r)^{\gamma_{\kappa'}} e^{-\lambda r} \left[ L_{|n'|-1}^{(2\gamma_{\kappa'})}(2\lambda r) - \frac{\kappa' - N_{n'\kappa'}}{|n'| + 2\gamma_{\kappa'}} L_{|n'|}^{(2\gamma_{\kappa'})}(2\lambda r) \right]. \quad (\text{C.4})$$

### C.1 Kilka typów całek radialnych

W zależności od relacji pomiędzy liczbami  $\kappa$  oraz  $\kappa'$ , jak również od sposobu zestawienia wyżej wymienionych funkcji w wyrażeniach podcałkowych, całki radialne podzielimy na kilka charakterystycznych grup.

Pierwszą grupę stanowią całki pojawiające się przy rozpatrywaniu symetrii  $\kappa' = -\kappa \pm 1$  układu, posiadające następujące struktury:

$$\mathcal{I}_1(L, C) = \int_0^\infty dr r^L \left[ C Q_{n\kappa}^{(0)}(r) S_{n'\kappa'}^{(0)}(2\lambda r) + P_{n\kappa}^{(0)}(r) T_{n'\kappa'}^{(0)}(2\lambda r) \right] \quad (\text{C.5})$$

lub

$$\mathcal{I}_2(L, C) = \int_0^\infty dr r^L \left[ C P_{n\kappa}^{(0)}(r) S_{n'\kappa'}^{(0)}(2\lambda r) + Q_{n\kappa}^{(0)}(r) T_{n'\kappa'}^{(0)}(2\lambda r) \right], \quad (\text{C.6})$$

przy czym  $L$  przyjmuje wartości całkowite, zaś  $C$  oznacza dowolną stałą, niezależną od zmiennej całkowania. Mimo iż w rozprawie zostały wykorzystane tylko całki, dla których  $C = 1$  lub  $C = \mu_{n'\kappa'}^{(0)}$ , zaś  $L$  przyjmuje wartości ze zbioru  $\{+1, \pm 2\}$ , postaramy się uzyskać jak najogólniejsze wyrażenie. W tym celu do wzorów (C.5) i (C.6) wstawiamy wyrażenia (C.1)–(C.4), a następnie atomowe wielomiany Laguerre'a<sup>23</sup> rozwijamy w bazie jednomianów (D.5). Otrzymane w ten sposób wyrażenia całkujemy według przepisu (D.18) i dostajemy:

$$\begin{aligned}
\mathcal{I}_1(L, C) &= A_0 \sqrt{\frac{\alpha Z}{N_{n\kappa}}} \left(\frac{1}{2\lambda}\right)^{L+1} \frac{\Gamma(n + 2\gamma_\kappa)}{(|n'| - 1)!(N_{n'\kappa'} + \kappa')} \\
&\times \sum_{k=0}^n \frac{(-)^k}{k!} \frac{\Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + L + k + 1)\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - L - k - 1)}{\Gamma(n - k + 1)\Gamma(k + 2\gamma_\kappa + 1)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - L - k)} \\
&\times \left\{ (C + 1) \left[ (n - k)(N_{n'\kappa'} + \kappa') + (\kappa - N_{n\kappa})(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - L - k - 1) \right] \right. \\
&\quad \left. - (C - 1) \left[ (\kappa - N_{n\kappa})(N_{n'\kappa'} + \kappa') + (n - k)(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - L - k - 1) \right] \right\}
\end{aligned} \tag{C.7}$$

oraz

$$\begin{aligned}
\mathcal{I}_2(L, C) &= A_0 \sqrt{\frac{N_{n\kappa}}{\alpha Z}} \left(\frac{1}{2\lambda}\right)^{L+1} \frac{\Gamma(n + 2\gamma_\kappa)}{(|n'| - 1)!(N_{n'\kappa'} + \kappa')} \\
&\times \sum_{k=0}^n \frac{(-)^k}{k!} \frac{\Gamma(\gamma_\kappa + \gamma_{\kappa'} + L + k + 1)\Gamma(|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - L - k - 1)}{\Gamma(n - k + 1)\Gamma(k + 2\gamma_\kappa + 1)\Gamma(\gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - L - k)} \\
&\times \left\{ (C + 1) \left[ (N_{n'\kappa'} + \kappa') \left( (n - k) + \epsilon(\kappa - N_{n\kappa}) \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - (|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - L - k - 1) \left( (\kappa - N_{n\kappa}) + \epsilon(n - k) \right) \right] \right. \\
&\quad \left. + (C - 1) \left[ (N_{n'\kappa'} + \kappa') \left( (\kappa - N_{n\kappa}) + \epsilon(n - k) \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - (|n'| + \gamma_{\kappa'} - \gamma_\kappa - L - k - 1) \left( (n - k) + \epsilon(\kappa - N_{n\kappa}) \right) \right] \right\},
\end{aligned} \tag{C.8}$$

gdzie wprowadzono oznaczenie

$$A_0 = \sqrt{\frac{\alpha\lambda(n + 2\gamma_\kappa)n!(|n'| + 2\gamma_{\kappa'})|n'|!}{4N_{n\kappa}(N_{n\kappa} - \kappa)N_{n'\kappa'}(N_{n'\kappa'} - \kappa')\Gamma(n + 2\gamma_\kappa)\Gamma(|n'| + 2\gamma_{\kappa'})}}. \tag{C.9}$$

Przy wyprowadzaniu wzorów (C.7)–(C.8) skorzystano z zależności (4.41).

Podczas rozważania symetrii  $\kappa' = \kappa$  pojawia się znacznie więcej rodzajów całek radialnych. Wyróżnijmy najpierw następującą klasę całek:

$$\mathcal{J}_1(L, C) = \int_0^\infty dr r^L \left[ CQ_{n\kappa}^{(0)}(r)S_{n'\kappa'}^{(0)}(2\lambda r) + P_{n\kappa}^{(0)}(r)T_{n'\kappa'}^{(0)}(2\lambda r) \right], \tag{C.10}$$

<sup>23</sup>Określenie *atomowe* odnosi się do tych uogólnionych wielomianów Laguerre'a, które występują w definicjach (C.1)–(C.2).

$$\mathcal{J}_2(L, C) = \int_0^\infty dr r^L \left[ CP_{n\kappa}^{(0)}(r) S_{n'\kappa}^{(0)}(2\lambda r) + Q_{n\kappa}^{(0)}(r) T_{n'\kappa}^{(0)}(2\lambda r) \right], \quad (\text{C.11})$$

gdzie  $L$  jest liczbą całkowitą, natomiast  $C$  to pewna stała, niezależna od zmiennej całkowania. Z punktu widzenia niniejszej rozprawy interesują nas przypadki, dla których  $C = \mu_{n'\kappa}^{(0)}$  lub  $C = 1$ , natomiast  $L$  przyjmuje wartości ze zbioru  $\{1, 2\}$ . Wyprowadzenie wzorów dla tych szczególnych całek wiąże się ze żmudnymi rachunkami, zatem ograniczymy się tutaj do podania ostatecznych wyrażeń, wspominając po drodze o sposobie ich liczenia. I tak: w równaniach (C.10)–(C.11) wykorzystujemy wzory (C.1)–(C.2) oraz (C.3)–(C.4), pamiętając, by w tych drugich dokonać podstawienia  $\kappa' = \kappa$ . W kolejnym kroku stosujemy relacje (D.10) i (D.19) dla wielomianów Laguerre'a i dochodzimy do następujących wyników:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_1(1, 1) = & 2A_1 \sqrt{\frac{\alpha Z}{N_{n\kappa}}} \left( \frac{1}{2\lambda} \right)^2 \frac{\Gamma(n + 2\gamma_\kappa)}{n!(|n'| + 2\gamma_\kappa)} \\ & \times \left\{ -n \left[ (n-1)(n + 2\gamma_\kappa - 1) - (\kappa - N_{n\kappa})(\kappa - N_{n'\kappa}) \right] \delta_{|n'|, n-1} \right. \\ & + \left[ n(n + 2\gamma_\kappa)(2n + 2\gamma_\kappa - 1) - (\kappa - N_{n\kappa})(\kappa - N_{n'\kappa})(2n + 2\gamma_\kappa + 1) \right] \delta_{|n'|, n} \\ & \left. - (n + 2\gamma_\kappa + 1) \left[ n(n + 2\gamma_\kappa) - (\kappa - N_{n\kappa})(\kappa - N_{n'\kappa}) \right] \delta_{|n'|, n+1} \right\}, \quad (\text{C.12}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_2(2, 1) = & 2A_1 \sqrt{\frac{N_{n\kappa}}{\alpha Z}} \left( \frac{1}{2\lambda} \right)^3 \frac{\Gamma(n + 2\gamma_\kappa)}{n!(|n'| + 2\gamma_\kappa)} \left\{ \epsilon_{n\kappa} n(n-1)(n-2)(\kappa - N_{n'\kappa}) \delta_{|n'|, n-3} \right. \\ & + n(n-1) \left( (n-2)(n + 2\gamma_\kappa - 2) + (\kappa - N_{n'\kappa})[\kappa - N_{n\kappa} - 4\epsilon_{n\kappa}(n + \gamma_\kappa - 1)] \right) \delta_{|n'|, n-2} \\ & - n \left( 2(\kappa - N_{n'\kappa})[(n + \gamma_\kappa)(3\epsilon_{n\kappa} + 2\kappa - 2N_{n'\kappa}) - \epsilon_{n\kappa}(3n^2 + 6n\gamma_\kappa + 2\gamma_\kappa^2 + 1)] \right. \\ & \left. + (n-1)(n + 2\gamma_\kappa - 1)[4(n + \gamma_\kappa - 1) + \epsilon_{n\kappa}(\kappa - N_{n\kappa})] \right) \delta_{|n'|, n-1} \\ & - 2(N_{n\kappa} - \kappa) \left( 2\epsilon_{n\kappa}(n + \gamma_\kappa)(N_{n\kappa} + \kappa)(2\kappa - N_{n\kappa} - N_{n'\kappa}) \right. \\ & \left. + 3(n + \gamma_\kappa)(2\kappa + N_{n\kappa} - N_{n'\kappa}) - (N_{n\kappa} + N_{n'\kappa})(3n^2 + 6n\gamma_\kappa + 2\gamma_\kappa^2 + 1) \right) \delta_{|n'|, n} \\ & + (n + 2\gamma_\kappa + 1)(\kappa - N_{n\kappa}) \left( 2(n + \gamma_\kappa)(3\epsilon_{n\kappa} + N_{n\kappa} + N_{n'\kappa}) \right. \\ & \left. + 2\epsilon_{n\kappa}(3n^2 + 6n\gamma_\kappa + 2\gamma_\kappa^2 + 1) - (\kappa - N_{n'\kappa})[\epsilon_{n\kappa}(N_{n\kappa} + \kappa) + 4] \right) \delta_{|n'|, n+1} \\ & - (n + 2\gamma_\kappa + 1)(n + 2\gamma_\kappa + 2)(\kappa - N_{n\kappa}) [4\epsilon_{n\kappa}(n + \gamma_\kappa + 1) + N_{n\kappa} + N_{n'\kappa}] \delta_{|n'|, n+2} \\ & \left. + \epsilon_{n\kappa}(n + 2\gamma_\kappa + 1)(n + 2\gamma_\kappa + 2)(n + 2\gamma_\kappa + 3)(\kappa - N_{n\kappa}) \delta_{|n'|, n+3} \right\}, \quad (\text{C.13}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}_1(1, \mu_{n'\kappa}^{(0)}) &= A_1 \sqrt{\frac{\alpha Z}{N_{n\kappa}}} \left(\frac{1}{2\lambda}\right)^2 \frac{\Gamma(n+2\gamma_\kappa)}{n!(|n'|+2\gamma_\kappa)} \left\{ -n(n-1)(\mu_{n'\kappa}^{(0)}-1)(\kappa-N_{n'\kappa})\delta_{|n'|,n-2} \right. \\
&\quad + n \left( (\mu_{n'\kappa}^{(0)}+1) \left[ (\kappa-N_{n\kappa})(\kappa-N_{n'\kappa}) - (n-1)(n+2\gamma_\kappa-1) \right] \right. \\
&\quad \left. \left. + (\mu_{n'\kappa}^{(0)}-1)(\kappa-N_{n'\kappa})(2n+2\gamma_\kappa-1) \right) \delta_{|n'|,n-1} \right. \\
&\quad + (N_{n\kappa}-\kappa) \left( (\mu_{n'\kappa}^{(0)}+1) \left[ 2(n+\gamma_\kappa)(2\kappa+N_{n\kappa}-N_{n'\kappa}) - (N_{n\kappa}+N_{n'\kappa}) \right] \right. \\
&\quad \left. \left. + (\mu_{n'\kappa}^{(0)}-1)(N_{n\kappa}+\kappa)(N_{n'\kappa}-N_{n\kappa}) \right) \delta_{|n'|,n} \right. \\
&\quad + (n+2\gamma_\kappa+1)(\kappa-N_{n\kappa}) \\
&\quad \times \left( (\mu_{n'\kappa}^{(0)}+1)(2\kappa+N_{n\kappa}-N_{n'\kappa}) - (\mu_{n'\kappa}^{(0)}-1)(2n+2\gamma_\kappa+1) \right) \delta_{|n'|,n+1} \\
&\quad \left. + (\mu_{n'\kappa}^{(0)}-1)(\kappa-N_{n\kappa})(n+2\gamma_\kappa+1)(n+2\gamma_\kappa+2)\delta_{|n'|,n+2} \right\}, \tag{C.14}
\end{aligned}$$

przy czym parametr  $\epsilon_{n\kappa}$  został zdefiniowany poprzez (2.20), wartość własną  $\mu_{n'\kappa}^{(0)}$  określa wzór (4.33), natomiast stałą  $A_1$  otrzymujemy, kładąc w wyrażeniu (C.9)  $\kappa' = \kappa$ :

$$A_1 = \sqrt{\frac{\alpha\lambda(n+2\gamma_\kappa)n!(|n'|+2\gamma_\kappa)|n'|!}{4N_{n\kappa}(N_{n\kappa}-\kappa)N_{n'\kappa}(N_{n'\kappa}-\kappa)\Gamma(n+2\gamma_\kappa)\Gamma(|n'|+2\gamma_\kappa)}}. \tag{C.15}$$

Kolejną rozpatrywaną grupę stanowią całki zawierające radialne funkcje falowe (C.1)–(C.2) oraz wyraz  $r^k$ , gdzie  $k \in \{+1, \pm 2\}$ . Naszym najbliższym zadaniem będzie wyznaczenie wartości następujących wyrażeń:

$$R_+ = \int_0^\infty dr r^2 \left\{ \left[ P_{n\kappa}^{(0)}(r) \right]^2 + \left[ Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \right]^2 \right\}, \tag{C.16}$$

$$R_- = \int_0^\infty dr r^2 \left\{ \left[ P_{n\kappa}^{(0)}(r) \right]^2 - \left[ Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \right]^2 \right\} \tag{C.17}$$

oraz

$$\tilde{R}_{+1} = \int_0^\infty dr r P_{n\kappa}^{(0)}(r) Q_{n\kappa}^{(0)}(r), \tag{C.18}$$

$$\tilde{R}_{-2} = \int_0^\infty dr r^{-2} P_{n\kappa}^{(0)}(r) Q_{n\kappa}^{(0)}(r). \tag{C.19}$$

Aby obliczyć wartości powyższych całek, do wzorów (C.16)–(C.19) wstawiamy wyrażenia (C.1)–(C.2), po czym dokonujemy transformacji zmiennej całkowania:  $x = 2\lambda r$ . Na tym etapie otrzymujemy wyrażenia

$$\begin{aligned}
R_+ &= \frac{(n+2\gamma_\kappa)n!}{8\lambda^2 N_{n\kappa}(N_{n\kappa}-\kappa)\Gamma(n+2\gamma_\kappa)} \int_0^\infty dx x^{2\gamma_\kappa+2} e^{-x} \\
&\quad \times \left\{ \left[ L_{n-1}^{(2\gamma_\kappa)}(x) \right]^2 + \left[ \left( \frac{\kappa-N_{n\kappa}}{n+2\gamma_\kappa} \right) L_n^{(2\gamma_\kappa)}(x) \right]^2 + 2\epsilon_{n\kappa} \left( \frac{\kappa-N_{n\kappa}}{n+2\gamma_\kappa} \right) L_{n-1}^{(2\gamma_\kappa)}(x) L_n^{(2\gamma_\kappa)}(x) \right\}, \tag{C.20}
\end{aligned}$$

$$R_- = -\frac{(n+2\gamma_\kappa)n!}{8\lambda^2 N_{n\kappa}(N_{n\kappa}-\kappa)\Gamma(n+2\gamma_\kappa)} \int_0^\infty dx x^{2\gamma_\kappa+2} e^{-x} \times \left\{ \epsilon_{n\kappa} \left[ L_{n-1}^{(2\gamma_\kappa)}(x) \right]^2 + \epsilon_{n\kappa} \left[ \left( \frac{\kappa-N_{n\kappa}}{n+2\gamma_\kappa} \right) L_n^{(2\gamma_\kappa)}(x) \right]^2 + 2 \left( \frac{\kappa-N_{n\kappa}}{n+2\gamma_\kappa} \right) L_{n-1}^{(2\gamma_\kappa)}(x) L_n^{(2\gamma_\kappa)}(x) \right\}, \quad (\text{C.21})$$

$$\tilde{R}_{+1} = \frac{\sqrt{1-\epsilon_{n\kappa}^2}(n+2\gamma_\kappa)n!}{8\lambda N_{n\kappa}(N_{n\kappa}-\kappa)\Gamma(n+2\gamma_\kappa)} \int_0^\infty dx x^{2\gamma_\kappa+1} e^{-x} \left\{ \left[ L_{n-1}^{(2\gamma_\kappa)}(x) \right]^2 - \left[ \left( \frac{\kappa-N_{n\kappa}}{n+2\gamma_\kappa} \right) L_n^{(2\gamma_\kappa)}(x) \right]^2 \right\}, \quad (\text{C.22})$$

$$\tilde{R}_{-2} = \frac{\lambda^2 \sqrt{1-\epsilon_{n\kappa}^2}(n+2\gamma_\kappa)n!}{N_{n\kappa}(N_{n\kappa}-\kappa)\Gamma(n+2\gamma_\kappa)} \int_0^\infty dx x^{2\gamma_\kappa-2} e^{-x} \left\{ \left[ L_{n-1}^{(2\gamma_\kappa)}(x) \right]^2 - \left[ \left( \frac{\kappa-N_{n\kappa}}{n+2\gamma_\kappa} \right) L_n^{(2\gamma_\kappa)}(x) \right]^2 \right\}. \quad (\text{C.23})$$

Dalszy tok rozumowania będzie uzależniony od tego, czy parametr  $\delta$  (obecny w podcałkowych czynnikach  $x^{2\gamma_\kappa+\delta}$ ) jest dodatni, czy ujemny. W związku z tym, całki  $R_+$ ,  $R_-$  oraz  $\tilde{R}_{+1}$  będziemy obliczać “zbiorowo”, zaś  $\tilde{R}_{-2}$  wyznaczymy dalej innym sposobem.

A zatem, we wzorach (C.20)–(C.22) podnosimy rząd wielomianów Laguerre’a, korzystając przy tym z relacji (D.10) jedno- lub dwukrotnie, po czym wykonujemy całkowanie, uwzględniając jednocześnie relację ortogonalności (D.19). Na koniec wstawiamy wyrażenia na parametry  $\epsilon_{n\kappa}$  oraz  $\lambda$ , czyli wzory (3.45) i (2.20), i po dość żmudnym porządkowaniu dostajemy ostatecznie

$$R_+ = \frac{a_0^2}{2Z^2} \left[ \kappa^2(2\gamma_\kappa^2+1) - 3N_{n\kappa}\kappa(n+\gamma_\kappa) + n(n+2\gamma_\kappa)(5n^2+10n\gamma_\kappa+4\gamma_\kappa^2+3\kappa^2+1) \right], \quad (\text{C.24})$$

$$R_- = -\frac{a_0^2}{2Z^2} (n+\gamma_\kappa) \left[ 5N_{n\kappa}n(n+2\gamma_\kappa) - 3\kappa(n+\gamma_\kappa) + N_{n\kappa}(2\gamma_\kappa^2+1) \right], \quad (\text{C.25})$$

$$\tilde{R}_{+1} = \frac{\alpha a_0}{4N_{n\kappa}} [2\kappa(n+\gamma_\kappa) - N_{n\kappa}]. \quad (\text{C.26})$$

W celu wyznaczenia całki  $\tilde{R}_{-2}$  przepisujemy ją w postaci:

$$\tilde{R}_{-2} = \frac{\alpha Z^3}{a_0^2} \frac{(n+2\gamma_\kappa)n!}{N_{n\kappa}^4(N_{n\kappa}-\kappa)\Gamma(n+2\gamma_\kappa)} \left[ \text{I}(n-1, n-1) - \left( \frac{\kappa-N_{n\kappa}}{n+2\gamma_\kappa} \right)^2 \text{I}(n, n) \right], \quad (\text{C.27})$$

gdzie  $\text{I}(n-1, n-1)$  oraz  $\text{I}(n, n)$  to całki zdefiniowane za pomocą (D.26). Wykorzystując następnie ich wartości określone wzorem (D.27), otrzymujemy w rezultacie:

$$\tilde{R}_{-2} = \frac{\alpha Z^3}{a_0^2} \frac{2\kappa(n+\gamma_\kappa) - N_{n\kappa}}{N_{n\kappa}^4 \gamma_\kappa (4\gamma_\kappa^2 - 1)}. \quad (\text{C.28})$$

## C.2 Uproszczenie dla zaburzenia dipolowego<sup>24</sup>

Zastosowanie uogólnionej radialnej funkcji Greena (3.41) przy rozpatrywaniu symetrii  $\kappa' = \kappa$  pociąga za sobą konieczność liczenia każdej z całek  $I_{\kappa\chi}$ ,  $I_{\kappa\sigma}$  oraz  $I_{\kappa\mathcal{Q}}$  w postaci czterech składników. W niniejszym uzupełnieniu wykażemy, iż sumę tych komponentów można ograniczyć do zaledwie dwóch, jeśli wykorzystamy fakt, iż w rozprawie mamy do czynienia z dipolowym (jednorodnym) zaburzeniem, jakim jest zewnętrzne pole magnetyczne.

Rozważmy całki o postaci:

$$\begin{aligned} \tilde{I}_{\kappa}^{(a)}(k, t) &= \frac{2E_{n\kappa}^{(0)} - mc^2}{2mc^2} \int_0^\infty dr r^k \left[ Q_{n\kappa}^{(0)}(r) S_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r) + P_{n\kappa}^{(0)}(r) T_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r) \right] \\ &\quad \times \int_0^\infty dr' (r')^t \left[ Q_{n\kappa}^{(0)}(r') S_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r') + P_{n\kappa}^{(0)}(r') T_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r') \right], \end{aligned} \quad (\text{C.29})$$

$$\begin{aligned} \tilde{I}_{\kappa}^{(b)}(k, t) &= \int_0^\infty dr r^k \left[ Q_{n\kappa}^{(0)}(r) I_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r) + P_{n\kappa}^{(0)}(r) K_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r) \right] \\ &\quad \times \int_0^\infty dr' (r')^t \left[ Q_{n\kappa}^{(0)}(r') S_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r') + P_{n\kappa}^{(0)}(r') T_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r') \right], \end{aligned} \quad (\text{C.30})$$

$$\begin{aligned} \tilde{I}_{\kappa}^{(c)}(k, t) &= \int_0^\infty dr r^k \left[ Q_{n\kappa}^{(0)}(r) S_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r) + P_{n\kappa}^{(0)}(r) T_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r) \right] \\ &\quad \times \int_0^\infty dr' (r')^t \left[ Q_{n\kappa}^{(0)}(r') J_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r') + P_{n\kappa}^{(0)}(r') K_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r') \right]. \end{aligned} \quad (\text{C.31})$$

Uwzględniając wyrażenia (3.50)–(3.52) oraz zależność (3.45), możemy zapisać

$$\begin{aligned} \tilde{I}_{\kappa}^{(a)}(k, t) + \tilde{I}_{\kappa}^{(c)}(k, t) &= \epsilon_{n\kappa} \int_0^\infty dr r^k \left[ Q_{n\kappa}^{(0)}(r) S_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r) + P_{n\kappa}^{(0)}(r) T_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r) \right] \\ &\quad \times \left\{ \int_0^\infty dr' (r')^t \left[ Q_{n\kappa}^{(0)}(r') S_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r') + P_{n\kappa}^{(0)}(r') T_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r') \right] \right. \\ &\quad \left. + \int_0^\infty dr' (r')^{t+1} \left[ Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \frac{dS_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r')}{dr'} + P_{n\kappa}^{(0)}(r') \frac{dT_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r')}{dr'} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{C.32})$$

W kolejnym kroku wykorzystamy zależności [39]

$$S_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r) = \frac{\sqrt{a_0} N_{n\kappa}}{Z} P_{n\kappa}^{(0)}(r) \quad (\text{C.34})$$

oraz

$$T_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r) = \frac{\sqrt{a_0} N_{n\kappa}}{Z} Q_{n\kappa}^{(0)}(r). \quad (\text{C.35})$$

Dostajemy

$$\begin{aligned} \tilde{I}_{\kappa}^{(a)}(k, t) + \tilde{I}_{\kappa}^{(c)}(k, t) &= 2\epsilon_{n\kappa} \frac{a_0 N_{n\kappa}^2}{Z^2} \int_0^\infty dr r^k P_{n\kappa}^{(0)}(r) Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \left\{ 2 \int_0^\infty dr' (r')^t P_{n\kappa}^{(0)}(r') Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \right. \\ &\quad \left. + \int_0^\infty dr' (r')^{t+1} \left[ P_{n\kappa}^{(0)}(r') \frac{dQ_{n\kappa}^{(0)}(r')}{dr'} + Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \frac{dP_{n\kappa}^{(0)}(r')}{dr'} \right] \right\} \\ &= 2\epsilon_{n\kappa} \frac{a_0 N_{n\kappa}^2}{Z^2} \int_0^\infty dr r^k P_{n\kappa}^{(0)}(r) Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \left\{ 2 \int_0^\infty dr' (r')^t P_{n\kappa}^{(0)}(r') Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \right. \\ &\quad \left. + \int_0^\infty dr' (r')^{t+1} \frac{d \left[ P_{n\kappa}^{(0)}(r') Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \right]}{dr'} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{C.36})$$

<sup>24</sup>Idea matematyczna przeprowadzonego w tym podrozdziale dowodu pochodzi od R. Szymtkowskiego.



Po scałkowaniu przez części ostatniego składnika w powyższym wyrażeniu, przy jednoczesnym uwzględnieniu następujących własności radialnych funkcji falowych [39]:

$$P_{n\kappa}^{(0)}(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0, \quad P_{n\kappa}^{(0)}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0, \quad (\text{C.37})$$

$$Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0, \quad Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0, \quad (\text{C.38})$$

otrzymujemy

$$\tilde{I}_{\kappa}^{(a)}(k, t) + \tilde{I}_{\kappa}^{(c)}(k, t) = 2\epsilon_{n\kappa} \frac{a_0 N_{n\kappa}^2}{Z^2} (1-t) \int_0^\infty dr r^k P_{n\kappa}^{(0)}(r) Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \int_0^\infty dr' (r')^t P_{n\kappa}^{(0)}(r') Q_{n\kappa}^{(0)}(r'). \quad (\text{C.39})$$

Postępując analogicznie przy obliczaniu składnika  $\tilde{I}_{\kappa}^{(b)}$ , danego wzorem (C.30), dostajemy

$$\tilde{I}_{\kappa}^{(b)}(k, t) = -2\epsilon_{n\kappa} (k+1) \frac{a_0 N_{n\kappa}^2}{Z^2} \int_0^\infty dr r^k P_{n\kappa}^{(0)}(r) Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \int_0^\infty dr' (r')^t P_{n\kappa}^{(0)}(r') Q_{n\kappa}^{(0)}(r'). \quad (\text{C.40})$$

Zanim wyciągniemy wnioski z dwóch ostatnich równości, rozważmy kolejną grupę całek:

$$\begin{aligned} \hat{I}_{\kappa}^{(a)}(k, t) &= \frac{2E_{n\kappa}^{(0)} - mc^2}{2mc^2} \int_0^\infty dr r^k \left[ P_{n\kappa}^{(0)}(r) S_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r) + Q_{n\kappa}^{(0)}(r) T_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r) \right] \\ &\quad \times \int_0^\infty dr' (r')^t \left[ Q_{n\kappa}^{(0)}(r') S_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r') + P_{n\kappa}^{(0)}(r') T_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r') \right], \end{aligned} \quad (\text{C.41})$$

$$\begin{aligned} \hat{I}_{\kappa}^{(b)}(k, t) &= \int_0^\infty dr r^k \left[ P_{n\kappa}^{(0)}(r) I_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r) + Q_{n\kappa}^{(0)}(r) K_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r) \right] \\ &\quad \times \int_0^\infty dr' (r')^t \left[ Q_{n\kappa}^{(0)}(r') S_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r') + P_{n\kappa}^{(0)}(r') T_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r') \right], \end{aligned} \quad (\text{C.42})$$

$$\begin{aligned} \hat{I}_{\kappa}^{(c)}(k, t) &= \int_0^\infty dr r^k \left[ P_{n\kappa}^{(0)}(r) S_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r) + Q_{n\kappa}^{(0)}(r) T_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r) \right] \\ &\quad \times \int_0^\infty dr' (r')^t \left[ Q_{n\kappa}^{(0)}(r') J_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r') + P_{n\kappa}^{(0)}(r') K_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r') \right]. \end{aligned} \quad (\text{C.43})$$

Wykorzystując wzory (3.50)–(3.52) oraz (3.45), możemy zapisać

$$\begin{aligned} \hat{I}_{\kappa}^{(a)}(k, t) + \hat{I}_{\kappa}^{(c)}(k, t) &= \epsilon_{n\kappa} \int_0^\infty dr r^k \left[ P_{n\kappa}^{(0)}(r) S_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r) + Q_{n\kappa}^{(0)}(r) T_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r) \right] \\ &\quad \times \left\{ \int_0^\infty dr' (r')^t \left[ Q_{n\kappa}^{(0)}(r') S_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r') + P_{n\kappa}^{(0)}(r') T_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r') \right] \right. \\ &\quad \left. + \int_0^\infty dr' (r')^{t+1} \left[ Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \frac{dS_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r')}{dr'} + P_{n\kappa}^{(0)}(r') \frac{dT_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r')}{dr'} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{C.44})$$

Uwzględniając następnie zależności (C.34)–(C.35), otrzymujemy

$$\begin{aligned} \hat{I}_{\kappa}^{(a)}(k, t) + \hat{I}_{\kappa}^{(c)}(k, t) &= \epsilon_{n\kappa} \frac{a_0 N_{n\kappa}^2}{Z^2} \int_0^\infty dr r^k \left( [P_{n\kappa}^{(0)}(r)]^2 + [Q_{n\kappa}^{(0)}(r)]^2 \right) \left\{ 2 \int_0^\infty dr' (r')^t P_{n\kappa}^{(0)}(r') Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \right. \\ &\quad \left. + \int_0^\infty dr' (r')^{t+1} \left[ P_{n\kappa}^{(0)}(r') \frac{dQ_{n\kappa}^{(0)}(r')}{dr'} + Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \frac{dP_{n\kappa}^{(0)}(r')}{dr'} \right] \right\} \\ &= \epsilon_{n\kappa} \frac{a_0 N_{n\kappa}^2}{Z^2} \int_0^\infty dr r^k \left( [P_{n\kappa}^{(0)}(r)]^2 + [Q_{n\kappa}^{(0)}(r)]^2 \right) \\ &\quad \times \left\{ 2 \int_0^\infty dr' (r')^t P_{n\kappa}^{(0)}(r') Q_{n\kappa}^{(0)}(r') + \int_0^\infty dr' (r')^{t+1} \frac{d [P_{n\kappa}^{(0)}(r') Q_{n\kappa}^{(0)}(r')]}{dr'} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{C.46})$$

W kolejnym kroku całkujemy przez części ostatni składnik powyższego wzoru. Biorąc pod uwagę warunki (C.37)–(C.38), dochodzimy do następującego wyrażenia:

$$\begin{aligned}\tilde{I}_\kappa^{(a)}(k, t) + \tilde{I}_\kappa^{(c)}(k, t) &= \epsilon_{n\kappa} \frac{a_0 N_{n\kappa}^2}{Z^2} (1-t) \int_0^\infty dr r^k \left( [P_{n\kappa}^{(0)}(r)]^2 + [Q_{n\kappa}^{(0)}(r)]^2 \right) \\ &\quad \times \int_0^\infty dr' (r')^t P_{n\kappa}^{(0)}(r') Q_{n\kappa}^{(0)}(r').\end{aligned}\quad (\text{C.47})$$

Sposób wyznaczenia składnika  $\tilde{I}_\kappa^{(b)}(k, t)$ , zdefiniowanego wzorem (C.42), przebiega bardzo podobnie do ostatnich przekształceń. Zatem po skorzystaniu ze wzorów (3.50)–(3.52) i (3.45) otrzymujemy

$$\begin{aligned}\tilde{I}_\kappa^{(b)}(k, t) &= \left\{ \epsilon_{n\kappa} \int_0^\infty dr r^{k+1} \left[ P_{n\kappa}^{(0)}(r) \frac{dS_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r)}{dr} + Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \frac{dT_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r)}{dr} \right] \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \int_0^\infty dr r^k \left[ Q_{n\kappa}^{(0)}(r) T_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r) - P_{n\kappa}^{(0)}(r) S_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r) \right] \right\} \\ &\quad \times \int_0^\infty dr' (r')^t \left[ Q_{n\kappa}^{(0)}(r') S_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r') + P_{n\kappa}^{(0)}(r') T_{n\kappa}^{(0)}(2\lambda r') \right].\end{aligned}\quad (\text{C.48})$$

Do powyższego wyrażenia wstawiamy teraz zależności (C.34) oraz (C.35) i mamy

$$\begin{aligned}\tilde{I}_\kappa^{(b)}(k, t) &= \frac{a_0 N_{n\kappa}^2}{Z^2} \left\{ 2\epsilon_{n\kappa} \int_0^\infty dr r^{k+1} \left[ P_{n\kappa}^{(0)}(r) \frac{dP_{n\kappa}^{(0)}(r)}{dr} + Q_{n\kappa}^{(0)}(r) \frac{dQ_{n\kappa}^{(0)}(r)}{dr} \right] \right. \\ &\quad \left. - \int_0^\infty dr r^k \left( [P_{n\kappa}^{(0)}(r)]^2 - [Q_{n\kappa}^{(0)}(r)]^2 \right) \right\} \int_0^\infty dr' (r')^t P_{n\kappa}^{(0)}(r') Q_{n\kappa}^{(0)}(r') \\ &= \frac{a_0 N_{n\kappa}^2}{Z^2} \left\{ \epsilon_{n\kappa} \int_0^\infty dr r^{k+1} \frac{d}{dr} \left( [P_{n\kappa}^{(0)}(r)]^2 + [Q_{n\kappa}^{(0)}(r)]^2 \right) \right. \\ &\quad \left. - \int_0^\infty dr r^k \left( [P_{n\kappa}^{(0)}(r)]^2 - [Q_{n\kappa}^{(0)}(r)]^2 \right) \right\} \int_0^\infty dr' (r')^t P_{n\kappa}^{(0)}(r') Q_{n\kappa}^{(0)}(r').\end{aligned}\quad (\text{C.49})$$

Scalkowanie przez części pierwszego wyrazu w nawiasie klamrowym w ostatniej równości, przy jednoczesnym uwzględnieniu wartości asymptotycznych funkcji  $P$  i  $Q$ , czyli wzorów (C.37)–(C.38), prowadzi nas do następującego wyniku:

$$\begin{aligned}\tilde{I}_\kappa^{(b)}(k, t) &= -\frac{a_0 N_{n\kappa}^2}{Z^2} \int_0^\infty dr r^k \left\{ [1 + \epsilon_{n\kappa}(k+1)] [P_{n\kappa}^{(0)}(r)]^2 - [1 - \epsilon_{n\kappa}(k+1)] [Q_{n\kappa}^{(0)}(r)]^2 \right\} \\ &\quad \times \int_0^\infty dr' (r')^t P_{n\kappa}^{(0)}(r') Q_{n\kappa}^{(0)}(r').\end{aligned}\quad (\text{C.50})$$

Zwróćmy uwagę, że dla całek opisujących atom w jednorodnym polu magnetycznym  $t = 1$ ; w takim przypadku wyrażenia (C.39) i (C.47) zerują się!

## D Uogólnione wielomiany Laguerre'a<sup>25</sup>

Uogólnione wielomiany Laguerre'a  $L_n^{(\alpha)}(x)$  definiujemy za pomocą funkcji tworzącej o postaci

$$G^{(\alpha)}(x, t) = \frac{\exp[-xt/(1-t)]}{(1-t)^{\alpha+1}} \quad (|t| < 1) \quad (\text{D.1})$$

poprzez relację

$$G^{(\alpha)}(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} t^n L_n^{(\alpha)}(x), \quad (\text{D.2})$$

której bezpośrednią konsekwencją jest wzór

$$L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{1}{n!} \frac{\partial^n}{\partial t^n} G^{(\alpha)}(x, t) \Big|_{t=0}. \quad (\text{D.3})$$

Można je również określić poprzez wzór typu Rodriguesa:

$$L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{1}{n!} x^{-\alpha} e^x \frac{d^n}{dx^n} (x^{n+\alpha} e^{-x}). \quad (\text{D.4})$$

Jawna postać uogólnionych wielomianów Laguerre'a jest następująca:

$$L_n^{(\alpha)}(x) = \sum_{k=0}^n \frac{(-)^k}{k!} \binom{n+\alpha}{n-k} x^k. \quad (\text{D.5})$$

Alternatywnie, można je wyrazić za pomocą konfluentnej funkcji hipergeometrycznej:

$$L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{n! \Gamma(\alpha+1)} {}_1F_1 \left( \begin{matrix} -n \\ \alpha+1 \end{matrix}; x \right) \quad (\text{D.6})$$

lub przy użyciu funkcji Whittakera pierwszego rodzaju  $M_{km}(x)$ :

$$L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{n! \Gamma(\alpha+1)} x^{-(\alpha+1)/2} e^{x/2} M_{n+(\alpha+1)/2, \alpha/2}(x). \quad (\text{D.7})$$

Wielomiany  $L_n^{(\alpha)}(x)$  tworzą układ zupełny na półprostej  $(0, +\infty)$  z wagą  $x^\alpha e^{-x}$ ; odpowiednia relacja zupełności ma postać

$$x^{\alpha/2} x'^{\alpha/2} e^{-(x+x')/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n!}{\Gamma(n+\alpha+1)} L_n^{(\alpha)}(x) L_n^{(\alpha)}(x') = \delta(x-x') \quad (0 < x, x' < \infty). \quad (\text{D.8})$$

Są one rozwiązaniami następującego równania różniczkowego:

$$\left[ x \frac{d^2}{dx^2} + (\alpha+1-x) \frac{d}{dx} + n \right] L_n^{(\alpha)}(x) = 0 \quad (\text{D.9})$$

i spełniają poniższe relacje rekurencyjne:

$$L_n^{(\alpha)}(x) = L_n^{(\alpha+1)}(x) - L_{n-1}^{(\alpha+1)}(x), \quad (\text{D.10})$$

$$x L_n^{(\alpha+1)}(x) = (n+\alpha+1) L_n^{(\alpha)}(x) - (n+1) L_{n+1}^{(\alpha)}(x), \quad (\text{D.11})$$

<sup>25</sup>Uzupełnienie oparto na pracy [39] oraz książkach [102–104].

$$x \frac{d}{dx} L_n^{(\alpha)}(x) = n L_n^{(\alpha)}(x) - (n + \alpha) L_{n-1}^{(\alpha)}(x). \quad (\text{D.12})$$

Podczas rozwiązywania wielu zagadnień fizyki atomowej, jak na przykład przy omawianiu właściwości atomu jednoelektronowego w niniejszej rozprawie, pojawiają się całki o postaci

$$I_{mn}^{\alpha\beta\gamma}(a, b, c) = \int_0^\infty dx x^\gamma e^{-cx} L_m^{(\alpha)}(ax) L_n^{(\beta)}(bx) \quad [\text{Re}(\gamma) > -1, \text{Re}(c) > 0]. \quad (\text{D.13})$$

Wykorzystując metodę funkcji tworzących, można pokazać, że zachodzi relacja

$$I_{mn}^{\alpha\beta\gamma}(a, b, c) = \frac{\Gamma(\gamma + 1)}{m!n!} \frac{\partial^m}{\partial s^m} \frac{\partial^n}{\partial t^n} \frac{1}{(1-s)^{\alpha+1} (1-t)^{\beta+1} \left(c + \frac{as}{1-s} + \frac{bt}{1-t}\right)^{\gamma+1}} \Big|_{s=0, t=0}, \quad (\text{D.14})$$

która dla warunku  $a = b = c$  przybiera następującą formę:

$$I_{mn}^{\alpha\beta\gamma}(a, a, a) = \frac{\Gamma(\gamma + 1)}{a^{\gamma+1}} \sum_{k=0}^{\min(m, n)} (-1)^{m+n+k} \binom{\gamma - \alpha}{m - k} \binom{\gamma - \beta}{n - k} \binom{-\gamma - 1}{k}. \quad (\text{D.15})$$

W szczególnym przypadku, gdy  $a = 1$ , omawianą całkę możemy wyrazić za pomocą funkcji hipergeometrycznej  ${}_3F_2$  z jednostkowym argumentem (Uzupełnienie E):

$$\begin{aligned} I_{mn}^{\alpha\beta\gamma}(1, 1, 1) &= (-1)^{m+n} \Gamma(\gamma + 1) \binom{\gamma - \alpha}{m} \binom{\gamma - \beta}{n} {}_3F_2 \left( \begin{matrix} -m, & -n, & \gamma + 1 \\ \gamma - \alpha - m + 1, & \gamma - \beta - n + 1 \end{matrix}; 1 \right) \\ &= \Gamma(\gamma + 1) \binom{m + \alpha - \gamma - 1}{m} \binom{n + \beta - \gamma - 1}{n} {}_3F_2 \left( \begin{matrix} -m, & -n, & \gamma + 1 \\ \gamma - \alpha - m + 1, & \gamma - \beta - n + 1 \end{matrix}; 1 \right), \end{aligned} \quad (\text{D.16})$$

przy czym ostatnia równość jest spełniona na podstawie własności dwumianu Newtona

$$\binom{\alpha}{n} = (-1)^n \binom{n - \alpha - 1}{n}. \quad (\text{D.17})$$

Poniżej zestawiono wartości kilku szczególnych całek typu (D.13), bardzo przydatnych z punktu widzenia tej pracy:

$$\int_0^\infty dx x^\gamma e^{-x} L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{\Gamma(\gamma + 1) \Gamma(\alpha + n - \gamma)}{n! \Gamma(\alpha - \gamma)}, \quad (\text{D.18})$$

$$\int_0^\infty dx x^\alpha e^{-x} L_m^{(\alpha)}(x) L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{\Gamma(\alpha + n + 1)}{n!} \delta_{mn}, \quad (\text{D.19})$$

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dx x^{\alpha+1} e^{-x} L_m^{(\alpha)}(x) L_n^{(\alpha)}(x) &= -\frac{\Gamma(\alpha + n + 1)}{(n-1)!} \delta_{m, n-1} - \frac{\Gamma(\alpha + n + 2)}{n!} \delta_{m, n+1} \\ &\quad + \frac{\Gamma(\alpha + n + 1)(\alpha + 2n + 1)}{n!} \delta_{mn}, \end{aligned} \quad (\text{D.20})$$

$$\int_0^\infty dx x^{\alpha-2} e^{-x} L_m^{(\alpha)}(x) L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{[\alpha(m - n + 1) + (m + n + 1)] \Gamma(\alpha + n + 1)}{n! \alpha (\alpha^2 - 1)}. \quad (\text{D.21})$$

Wyrażenie (D.20) można udowodnić, wykorzystując wzór (D.10) oraz równanie (D.19), będące relacją ortogonalności dla wielomianów Laguerre'a.

Poniżej zaprezentujemy dowód wzoru (D.21), jako relacji kluczowej w obliczeniach wykonywanych podczas rozpatrywania symetrii  $\kappa' = \kappa$  dla stałej ekranowania magnetycznego atomu. W oparciu o wzór (D.16), lewą stronę równania (D.21) można zapisać w postaci:

$$L = (m+1)(n+1)\Gamma(\alpha-1) {}_3F_2 \left( \begin{matrix} -n, -m, \alpha-1 \\ -n-1, -m-1 \end{matrix}; 1 \right). \quad (\text{D.22})$$

Do funkcji  ${}_3F_2$  występującej w powyższym wyrażeniu zastosujemy relację (E.18) i dostajemy

$$\begin{aligned} L &= (m+1)(n+1)\Gamma(\alpha-1) \frac{(-m)_n(-\alpha-n-1)_n}{(-n-1)_n(-m-1)_n} {}_3F_2 \left( \begin{matrix} -n, m-n-1, -1 \\ m-n+1, -\alpha-n-1 \end{matrix}; 1 \right) \\ &= (m+1)(n+1)\Gamma(\alpha-1) \left[ \lim_{\nu \rightarrow n} \frac{(-m)_n(-\alpha-\nu-1)_n}{(-\nu-1)_n(-m-1)_n} \right] \left[ 1 + \frac{n(n-m+1)}{(m-n+1)(\alpha+n+1)} \right], \end{aligned} \quad (\text{D.23})$$

gdzie  $(a)_n$  to tzw. symbol Pochhammera, zdefiniowany za pomocą (E.2). Wyrażenie stojące pod granicą w powyższym wzorze przekształcimy przy pomocy zacytowanej przed chwilą definicji, po czym skorzystamy z relacji (F.3); otrzymujemy:

$$L = (n+1)\Gamma(\alpha-1) \frac{\alpha(m-n+1) + (m+n+1)}{\alpha+n+1} \lim_{\nu \rightarrow n} \frac{\Gamma(\nu+\alpha+2)\Gamma(\nu-n+2)}{\Gamma(\nu+2)\Gamma(\nu+\alpha-n+2)}. \quad (\text{D.24})$$

W ostatnim kroku dokonujemy przejścia granicznego i dostajemy w rezultacie:

$$\begin{aligned} L &= \frac{\Gamma(\alpha-1)}{\Gamma(\alpha+2)} \left[ \alpha(m-n+1) + (m+n+1) \right] \frac{\Gamma(\alpha+n+1)}{n!} \\ &= \frac{\left[ \alpha(m-n+1) + (m+n+1) \right] \Gamma(\alpha+n+1)}{n! \alpha (\alpha^2 - 1)} = P. \quad \blacksquare \end{aligned} \quad (\text{D.25})$$

W niniejszej rozprawie wykorzystuje się takie przypadki szczególne udowodnionej powyżej relacji, w których parametr  $\alpha = 2\gamma_\kappa$ , zaś stopnie wielomianów Laguerre'a albo są sobie równe, albo różnią się o 1 lub o 2. Wprowadzając oznaczenie

$$\mathbf{I}(m, n) \equiv \mathbf{I}(n, m) = \int_0^\infty dx x^{2\gamma_\kappa-2} e^{-x} L_m^{(2\gamma_\kappa)}(x) L_n^{(2\gamma_\kappa)}(x) \quad (\text{D.26})$$

i wykorzystując równanie (D.21), możemy zapisać, iż

- dla  $m = n$ :

$$\mathbf{I}(n, n) = \frac{(2n + 2\gamma_\kappa + 1)\Gamma(n + 2\gamma_\kappa + 1)}{2n! \gamma_\kappa (4\gamma_\kappa^2 - 1)}, \quad (\text{D.27})$$

- dla  $m = n + 1$ :

$$\mathbf{I}(n, n+1) = \frac{\Gamma(n + 2\gamma_\kappa + 2)}{n! \gamma_\kappa (4\gamma_\kappa^2 - 1)}, \quad (\text{D.28})$$

- dla  $m = n + 2$ :

$$\mathbf{I}(n, n+2) = \frac{(2n + 6\gamma_\kappa + 3)\Gamma(n + 2\gamma_\kappa + 1)}{2n! \gamma_\kappa (4\gamma_\kappa^2 - 1)}. \quad (\text{D.29})$$

## E Uogólniona funkcja hipergeometryczna<sup>26</sup>

Uogólnioną funkcję hipergeometryczną definiuje się w postaci następującego szeregu [108, 113]:

$$\begin{aligned} {}_pF_q \left( \begin{matrix} a_1, a_2, \dots, a_p \\ b_1, b_2, \dots, b_q \end{matrix} ; z \right) &= \frac{\Gamma(b_1) \cdots \Gamma(b_q)}{\Gamma(a_1) \cdots \Gamma(a_p)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a_1 + n) \cdots \Gamma(a_p + n)}{\Gamma(b_1 + n) \cdots \Gamma(b_q + n)} \frac{z^n}{n!} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a_1)_n \cdots (a_p)_n}{(b_1)_n \cdots (b_q)_n} \frac{z^n}{n!}, \end{aligned} \quad (\text{E.1})$$

gdzie  $\Gamma(z)$  to funkcja gamma Eulera, zaś

$$(a)_n = \frac{\Gamma(a + n)}{\Gamma(a)} \quad (\text{E.2})$$

to symbol Pochhammera. Warunki zbieżności szeregu (E.1) określa się w oparciu o relację pomiędzy indeksami  $p$  oraz  $q$ . Jeżeli spełniona jest nierówność  $p \leq q$ , to omawiany szereg jest zbieżny dla dowolnej wartości argumentu  $z$ , zaś w przypadku, gdy  $p > q + 1$ , jest on zbieżny tylko dla  $z = 0$ . Z punktu widzenia niniejszej rozprawy, najbardziej interesuje nas przypadek, kiedy  $p = q + 1$ . Szereg obecny w definicji (E.1) będzie wówczas zbieżny dla  $|z| < 1$ , oraz dla  $z = 1$  przy dodatkowym warunku

$$\operatorname{Re} \left( \sum_{i=1}^q b_i - \sum_{i=1}^p a_i \right) > 0, \quad (\text{E.3})$$

a także dla  $z = -1$ , jeśli zostanie spełniony następujący warunek:

$$\operatorname{Re} \left( \sum_{i=1}^q b_i - \sum_{i=1}^p a_i + 1 \right) > 0. \quad (\text{E.4})$$

W różnorodnych zagadnieniach fizycznych największe zastosowanie znajdują następujące przypadki szczególne uogólnionej funkcji hipergeometrycznej (E.1):

- gdy  $p = 1$ ,  $q = 1$  – taka funkcja nazywana jest *konfluentną (zdegenerowaną) funkcją hipergeometryczną* lub *funkcją Kummera*:

$${}_1F_1 \left( \begin{matrix} a \\ b \end{matrix} ; z \right) = \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a + n)}{\Gamma(b + n)} \frac{z^n}{n!} = 1 + \frac{a}{b} \frac{z}{1!} + \frac{a(a+1)}{b(b+1)} \frac{z^2}{2!} + \dots, \quad (\text{E.5})$$

- gdy  $p = 2$ ,  $q = 1$  – mamy wówczas do czynienia z tzw. *funkcją hipergeometryczną Gaussa*:

$$\begin{aligned} {}_2F_1 \left( \begin{matrix} a_1, a_2 \\ b \end{matrix} ; z \right) &= \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a_1)\Gamma(a_2)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a_1 + n)\Gamma(a_2 + n)}{\Gamma(b + n)} \frac{z^n}{n!} \\ &= 1 + \frac{a_1 a_2}{b} \frac{z}{1!} + \frac{a_1(a_1 + 1)a_2(a_2 + 1)}{b(b + 1)} \frac{z^2}{2!} + \dots, \end{aligned} \quad (\text{E.6})$$

- gdy  $p = 3$ ,  $q = 2$  – taka funkcja będzie wielokrotnie wykorzystana w niniejszej rozprawie; będziemy ją nazywać *uogólnioną funkcją hipergeometryczną* lub po prostu *funkcją hipergeometryczną*  ${}_3F_2$ ; przyjmuje ona postać:

$$\begin{aligned} {}_3F_2 \left( \begin{matrix} a_1, a_2, a_3 \\ b_1, b_2 \end{matrix} ; z \right) &= \frac{\Gamma(b_1)\Gamma(b_2)}{\Gamma(a_1)\Gamma(a_2)\Gamma(a_3)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a_1 + n)\Gamma(a_2 + n)\Gamma(a_3 + n)}{\Gamma(b_1 + n)\Gamma(b_2 + n)} \frac{z^n}{n!} \\ &= 1 + \frac{a_1 a_2 a_3}{b_1 b_2} \frac{z}{1!} + \frac{a_1(a_1 + 1)a_2(a_2 + 1)a_3(a_3 + 1)}{b_1(b_1 + 1)b_2(b_2 + 1)} \frac{z^2}{2!} + \dots \end{aligned} \quad (\text{E.7})$$

<sup>26</sup>Uzupełnienie oparto na pracach [57, 103, 105–112].

W przypadku, kiedy jeden z górnych parametrów funkcji  ${}_3F_2$  jest równy jednemu z dolnych parametrów, w oparciu o definicję (E.1) możemy napisać, iż

$${}_3F_2 \left( \begin{matrix} a_1, a_2, a_3 \\ a_3, b \end{matrix} ; z \right) = {}_2F_1 \left( \begin{matrix} a_1, a_2 \\ b \end{matrix} ; z \right). \quad (\text{E.8})$$

W niniejszej pracy szczególnie użyteczne okazują się być funkcje  ${}_2F_1$  oraz  ${}_3F_2$  z jednostkowymi argumentami. Dlatego też pozostała część tego uzupełnienia zostanie poświęcona przedstawieniu różnego typu własności i relacji rekurencyjnych spełnianych przez te funkcje. Pierwszą z nich jest *tożsamość Gaussa*

$${}_2F_1 \left( \begin{matrix} a_1, a_2 \\ b \end{matrix} ; 1 \right) = \frac{\Gamma(b)\Gamma(b-a_1-a_2)}{\Gamma(b-a_1)\Gamma(b-a_2)} \quad [\text{Re}(b-a_1-a_2) > 0]. \quad (\text{E.9})$$

Opierając się o definicję (E.7) oraz tożsamość (E.9), możemy wyprowadzić następujące relacje rekurencyjne spełniane przez funkcję hipergeometryczną  ${}_3F_2(1)$ :

- relacja obniżająca pierwszy górny parametr o 1:

$${}_3F_2 \left( \begin{matrix} a_1 + 1, a_2, a_3 \\ a_3 + 1, b \end{matrix} ; 1 \right) = \frac{a_3 \Gamma(b)\Gamma(b-a_1-a_2)}{a_1 \Gamma(b-a_1)\Gamma(b-a_2)} + \frac{a_1 - a_3}{a_1} {}_3F_2 \left( \begin{matrix} a_1, a_2, a_3 \\ a_3 + 1, b \end{matrix} ; 1 \right) \quad [\text{Re}(b-a_1-a_2) > 0], \quad (\text{E.10})$$

- relacja obniżająca trzeci górny i pierwszy dolny parametr o 1:

$$\begin{aligned} {}_3F_2 \left( \begin{matrix} a_1 + 1, a_2 + 1, a_3 + 1 \\ a_3 + 2, b \end{matrix} ; 1 \right) &= -\frac{(a_3 + 1)(b - a_3 - 1)}{(a_1 - a_3)(a_2 - a_3)} {}_3F_2 \left( \begin{matrix} a_1 + 1, a_2 + 1, a_3 \\ a_3 + 1, b \end{matrix} ; 1 \right) \\ &+ \frac{\Gamma(b)\Gamma(b-a_1-a_2-1)(a_3+1)}{\Gamma(b-a_1)\Gamma(b-a_2)} \left[ 1 + \frac{(b-a_3-1)(b-a_1-a_2+a_3-1)}{(a_1-a_3)(a_2-a_3)} \right] \end{aligned} \quad [\text{Re}(b-a_1-a_2) > 1], \quad (\text{E.11})$$

- relacja odwrotna do (E.11), umożliwiająca podwyższenie trzeciego górnego i pierwszego dolnego parametru o 1:

$$\begin{aligned} {}_3F_2 \left( \begin{matrix} a_1 + 1, a_2 + 1, a_3 \\ a_3 + 1, b \end{matrix} ; 1 \right) &= -\frac{(a_1 - a_3)(a_2 - a_3)}{(a_3 + 1)(b - a_3 - 1)} {}_3F_2 \left( \begin{matrix} a_1 + 1, a_2 + 1, a_3 + 1 \\ a_3 + 2, b \end{matrix} ; 1 \right) \\ &+ \frac{\Gamma(b)\Gamma(b-a_1-a_2-1)[(a_1-a_3)(a_2-a_3) + (b-a_3-1)(b-a_1-a_2+a_3-1)]}{(b-a_3-1)\Gamma(b-a_1)\Gamma(b-a_2)} \end{aligned} \quad [\text{Re}(b-a_1-a_2) > 1]. \quad (\text{E.12})$$

Cechą charakterystyczną trzech wymienionych wyżej relacji jest fakt, iż drugi dolny parametr  $b$  transformowanej funkcji hipergeometrycznej pozostaje niezmieniony. Czasami jednak pojawia się potrzeba zapisania otrzymanej w wyniku obliczeń funkcji  ${}_3F_2$  za pomocą funkcji tego samego rodzaju, ale z konkretnymi wartościami górnych parametrów. Istnieją relacje, które taką operację umożliwiają, przy czym w ich rezultacie wspomniany parametr  $b$  zostaje odpowiednio zmodyfikowany. Przykładem takiej transformacji, wynikającej bezpośrednio z definicji (E.7), jest poniższy wzór:

$${}_3F_2 \left( \begin{matrix} a_1 + 1, a_2 + 1, a_3 + 1 \\ b_1 + 1, b_2 + 1 \end{matrix} ; 1 \right) = \frac{(b_1 - 1)b_1 b_2}{a_1 a_2 a_3} \left[ {}_3F_2 \left( \begin{matrix} a_1, a_2, a_3 \\ b_1 - 1, b_2 \end{matrix} ; 1 \right) - {}_3F_2 \left( \begin{matrix} a_1, a_2, a_3 \\ b_1, b_2 \end{matrix} ; 1 \right) \right]. \quad (\text{E.13})$$

W obliczeniach wykonywanych w niniejszej rozprawie niezmiernie przydatną własnością funkcji  ${}_3F_2$  okazuje się być następująca relacja:

$${}_3F_2 \left( \begin{matrix} a+1, 1, 1 \\ b_1, b_2 \end{matrix} ; 1 \right) = \frac{(b_1-1)}{a} {}_3F_2 \left( \begin{matrix} a, 1, 1 \\ b_1-1, b_2 \end{matrix} ; 1 \right) + \frac{(a-b_1-1)}{a} {}_3F_2 \left( \begin{matrix} a, 1, 1 \\ b_1, b_2 \end{matrix} ; 1 \right), \quad (\text{E.14})$$

której dowód opiera się na wykorzystaniu definicji (E.7) oraz wzoru (E.13).

W pracy pojawiają się również takie funkcje  ${}_3F_2$ , które za sprawą specyficznych relacji pomiędzy ich górnymi i dolnymi parametrami dają się sprowadzić do postaci zawierającej tylko funkcje elementarne. Zastosowanie wzorów (E.7) i (E.9) pozwala zapisać następujące zależności:

$${}_3F_2 \left( \begin{matrix} a_1, a_2, a_3+1 \\ a_3, b \end{matrix} ; 1 \right) = \frac{\Gamma(b)\Gamma(b-a_1-a_2)}{\Gamma(b-a_1)\Gamma(b-a_2)} \left[ 1 + \frac{a_1 a_2}{a_3(b-a_1-a_2-1)} \right] \quad (\text{E.15})$$

oraz

$$\begin{aligned} {}_3F_2 \left( \begin{matrix} a_1, a_2, a_3+2 \\ a_3, b \end{matrix} ; 1 \right) &= \frac{\Gamma(b)\Gamma(b-a_1-a_2)}{\Gamma(b-a_1)\Gamma(b-a_2)} \left[ 1 + \frac{2a_1 a_2}{a_3(b-a_1-a_2-1)} \right. \\ &\quad \left. + \frac{a_1(a_1+1)a_2(a_2+1)}{a_3(a_3+1)(b-a_1-a_2-1)(b-a_1-a_2-2)} \right], \end{aligned} \quad (\text{E.16})$$

które są spełnione, jeśli zachodzi warunek  $[\text{Re}(b-a_1-a_2) > 0]$ .

Podczas omawiania zagadnienia ekranowania jądra atomowego w rozdziale 6 pojawia się funkcja  ${}_3F_2$  z jednostkowym argumentem o parametrach tak specyficznie ze sobą powiązanych, że zastosowanie do niej poniższej transformacji [patrz Ref. [114], wzór 7.4.4.1; por. także Ref. [108], wzór 3.2.1]:

$$\begin{aligned} {}_3F_2 \left( \begin{matrix} a_1, a_2, a_3 \\ b_1, b_2 \end{matrix} ; 1 \right) &= \frac{\Gamma(b_1)\Gamma(b_1+b_2-a_1-a_2-a_3)}{\Gamma(b_1+b_2-a_1-a_2)\Gamma(b_1-a_3)} {}_3F_2 \left( \begin{matrix} b_2-a_1, b_2-a_2, a_3 \\ b_1+b_2-a_1-a_2, b_2 \end{matrix} ; 1 \right) \\ \text{Re}(b_1+b_2-a_1-a_2-a_3) &> 0, \quad \text{Re}(b_1-a_3) > 0, \end{aligned} \quad (\text{E.17})$$

pozwała doprowadzić ją do postaci, w której przynajmniej jeden z jej górnych parametrów będzie liczbą całkowitą niedodatnią. Opierając się o definicję (E.7), stwierdzamy, że takie funkcje hipergeometryczne mogą być reprezentowane przez skończoną sumę ilorazów funkcji gamma Eulera; zachodzą dla nich poniższe relacje [patrz Ref. [114], odpowiednio wzory 7.4.4.81 oraz 7.4.4.85]:

$${}_3F_2 \left( \begin{matrix} -n, a_1, a_2 \\ b_1, b_2 \end{matrix} ; 1 \right) = \frac{(a_1)_n (b_1+b_2-a_1-a_2)_n}{(b_1)_n (b_2)_n} {}_3F_2 \left( \begin{matrix} -n, b_1-a_1, b_2-a_1 \\ 1-a_1-n, b_1+b_2-a_1-a_2 \end{matrix} ; 1 \right) \quad (\text{E.18})$$

oraz

$${}_3F_2 \left( \begin{matrix} -n, a_1, a_2 \\ b_1, b_2 \end{matrix} ; 1 \right) = \frac{(b_1-a_1)_n}{(b_1)_n} {}_3F_2 \left( \begin{matrix} -n, a_1, b_2-a_2 \\ b_2, a_1-b_1-n+1 \end{matrix} ; 1 \right), \quad (\text{E.19})$$

gdzie  $n$  jest liczbą naturalną, zaś  $(a)_n$  oznacza symbol Pochhammera zdefiniowany wzorem (E.2).



## F Obliczenie podwójnej sumy występującej w równaniach (4.91), (5.86) oraz (6.88)

Rozważmy wyrażenie:

$$\tilde{f}(N, M) = n! \Gamma(n + 2\gamma_\kappa + 1) \sum_{k=0}^n \sum_{p=0}^n \frac{(-)^{k+p} \Gamma(2\gamma_\kappa + k + p + M)}{k! p! \Gamma(k + 2\gamma_\kappa + 1) \Gamma(p + 2\gamma_\kappa + 1) \Gamma(n - k + N) \Gamma(n - p + 1)}, \quad (\text{F.1})$$

gdzie  $N$  i  $M$  to liczby naturalne. Rozdzielmy występującą tutaj podwójną sumę w następujący sposób:

$$\tilde{f}(N, M) = n! \Gamma(n + 2\gamma_\kappa + 1) \sum_{k=0}^n \frac{(-)^k}{k! \Gamma(k + 2\gamma_\kappa + 1) \Gamma(n - k + N)} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(-)^p \Gamma(2\gamma_\kappa + k + p + M)}{p! \Gamma(p + 2\gamma_\kappa + 1) \Gamma(n - p + 1)}, \quad (\text{F.2})$$

przy czym w sumie z indeksem  $p$ , ze względu na wyrażenie  $\Gamma(n - p + 1)$  występujące w mianowniku, rozciągnięto górną granicę sumowania do  $\infty$ .

Wykorzystując relację odbicia dla funkcji gamma

$$\Gamma(\zeta) \Gamma(1 - \zeta) = \frac{\pi}{\sin \pi \zeta}, \quad (\text{F.3})$$

możemy zapisać, że

$$\frac{1}{\Gamma(n - p + 1)} = \frac{(-)^{p+1}}{\pi} \lim_{\nu \rightarrow n} [\sin(\pi \nu) \Gamma(p - \nu)]. \quad (\text{F.4})$$

Uwzględniając powyższy wzór w (F.2) dostajemy

$$\begin{aligned} \tilde{f}(N, M) &= n! \Gamma(n + 2\gamma_\kappa + 1) \frac{1}{\pi} \sum_{k=0}^n \frac{(-)^k}{k! \Gamma(k + 2\gamma_\kappa + 1) \Gamma(n - k + N)} \\ &\quad \times \lim_{\nu \rightarrow n} \left[ \sin(-\pi \nu) \sum_{p=0}^{\infty} \frac{\Gamma(2\gamma_\kappa + k + p + M) \Gamma(p - \nu)}{p! \Gamma(p + 2\gamma_\kappa + 1)} \right]. \end{aligned} \quad (\text{F.5})$$

Przyglądając się sumowaniu po  $p$ , w oparciu o definicję (E.6) odnajdujemy w nim funkcję hipergeometryczną Gaussa z jednostkowym argumentem. Mamy zatem:

$$\begin{aligned} \tilde{f}(N, M) &= n! \Gamma(n + 2\gamma_\kappa + 1) \frac{1}{\pi} \sum_{k=0}^n \frac{(-)^k}{k! \Gamma(k + 2\gamma_\kappa + 1) \Gamma(n - k + N)} \\ &\quad \times \lim_{\nu \rightarrow n} \left[ \sin(-\pi \nu) \frac{\Gamma(2\gamma_\kappa + k + M) \Gamma(-\nu)}{\Gamma(2\gamma_\kappa + 1)} {}_2F_1 \left( \begin{matrix} -\nu, 2\gamma_\kappa + k + M \\ 2\gamma_\kappa + 1 \end{matrix}; 1 \right) \right]. \end{aligned} \quad (\text{F.6})$$

Do funkcji  $\Gamma(-\nu)$  wykorzystujemy relację odbicia (F.3), natomiast do funkcji  ${}_2F_1$  stosujemy tożsamość Gaussa (E.9). Wykonanie tych operacji daje nam

$$\begin{aligned} \tilde{f}(N, M) &= n! \Gamma(n + 2\gamma_\kappa + 1) \sum_{k=0}^n \frac{(-)^k \Gamma(2\gamma_\kappa + k + M)}{k! \Gamma(k + 2\gamma_\kappa + 1) \Gamma(n - k + N)} \\ &\quad \times \lim_{\nu \rightarrow n} \left[ \frac{\Gamma(\nu - k - M + 1)}{\Gamma(\nu + 1) \Gamma(\nu + 2\gamma_\kappa + 1) \Gamma(-k - M + 1)} \right]. \end{aligned} \quad (\text{F.7})$$

W oparciu o (F.3) mamy ponadto:

$$\frac{\Gamma(\nu - k - M + 1)}{\Gamma(-k - M + 1)} = (-)^\nu \frac{\Gamma(k + M)}{\Gamma(k - \nu + M)}. \quad (\text{F.8})$$

Wstawiamy powyższy wzór do (F.7), po czym dokonujemy przejścia granicznego i otrzymujemy

$$\tilde{f}(N, M) = (-)^n \sum_{k=0}^n \frac{(-)^k}{k!} \frac{\Gamma(2\gamma_\kappa + k + M)\Gamma(k + M)}{\Gamma(2\gamma_\kappa + k + 1)\Gamma(k + M - n)\Gamma(n - k + N)}. \quad (\text{F.9})$$

Po analizie wyrażenia zawartego pod sumą w powyższym równaniu dochodzimy do wniosku, iż niezerowy wkład do całej sumy dają tylko wyrazy ze zbioru  $k \in \{n - M + 1, n - M + 2, \dots, n + N - 1\}$ . Po tym spostrzeżeniu możemy ostatecznie zapisać, iż szukane wyrażenie wynosi

$$\tilde{f}(N, M) = (-)^n \sum_{k=n-M+1}^{n+N-1} \frac{(-)^k}{k!} \frac{\Gamma(2\gamma_\kappa + k + M)\Gamma(k + M)}{\Gamma(2\gamma_\kappa + k + 1)\Gamma(k + M - n)\Gamma(n - k + N)}. \quad (\text{F.10})$$

## Bibliografia<sup>27</sup>

- [1] E. Schrödinger, *Quantisierung als Eigenwertproblem. (Erste Mitteilung)*, Ann. Phys. (Leipzig) **79** (1926) 361–376 [tł. ang.: E. Schrödinger, *Collected papers on wave mechanics*, wyd. 3, AMS Chelsea Publishing, Providence, RI, 2001, str. 1–12]
- [2] E. Schrödinger, *Quantisierung als Eigenwertproblem. (Zweite Mitteilung)*, Ann. Phys. (Leipzig) **79** (1926) 489–527 [tł. ang.: E. Schrödinger, *Collected papers on wave mechanics*, wyd. 3, AMS Chelsea Publishing, Providence, RI, 2001, str. 13–40]
- [3] E. Schrödinger, *Quantisierung als Eigenwertproblem. (Vierte Mitteilung)*, Ann. Phys. (Leipzig) **81** (1926) 109–139 [tł. ang.: E. Schrödinger, *Collected papers on wave mechanics*, wyd. 3, AMS Chelsea Publishing, Providence, RI, 2001, str. 102–123]
- [4] G. E. Uhlenbeck, S. Goudsmit, *Spinning electrons and the structure of spectra*, Nature **117** (1926) 264–265
- [5] S. Goudsmit, *The discovery of the electron spin*;  
<http://www.lorentz.leidenuniv.nl/history/spin/goudsmit.html>
- [6] R. L. Liboff, *Wstęp do mechaniki kwantowej*, PWN, Warszawa, 1987
- [7] P. A. M. Dirac, *The quantum theory of the electron*, Proc. R. Soc. London A **117** (1928) 610–624
- [8] C. D. Anderson, *The apparent existence of easily deflectable positives*, Science **76** (1932) 238–239
- [9] C. D. Anderson, *The positive electron*, Phys. Rev. **43** (1933) 491–494
- [10] W. Gordon, *Die Energieniveaus des Wasserstoffatoms nach der Diracschen Quantentheorie des Elektrons*, Z. Phys. **48** (1928) 11–14
- [11] C. G. Darwin, *The wave equations of the electron*, Proc. R. Soc. London A **118** (1928) 654–680
- [12] C. J. Jameson, A. D. Buckingham, *Molecular electronic property density functions: The nuclear magnetic shielding density*, J. Chem. Phys. **73** (1980) 5684–5692
- [13] V. Namias, *Application of the Dirac delta function to electric charge and multipole distributions*, Am. J. Phys. **45** (1977) 624–630
- [14] V. Namias, *Application of the Dirac delta function to electric current and magnetic multipole distributions*, Am. J. Phys. **47** (1979) 803–806
- [15] C. A. Kocher, *Point-multipole expansions for charge and current distributions*, Am. J. Phys. **46** (1978) 578–579
- [16] C. G. Gray, *Multipole expansions of electromagnetic fields using Debye potentials*, Am. J. Phys. **46** (1978) 169–179
- [17] J. D. Jackson, *Elektrodynamika klasyczna*, PWN, Warszawa, 1982

---

<sup>27</sup>W prezentowanym wykazie cytowanej literatury prace w języku rosyjskim zostały opisane w następujący sposób: tytuł podajemy w tłumaczeniu na język angielski, po danych źródłowych pojawia się oznaczenie (ros.); jeśli dana pozycja została w całości przetłumaczona na język angielski, dane bibliograficzne tegoż tłumaczenia zostały podane w nawiasie kwadratowym.

- [18] D. J. Griffiths, *Podstawy elektrodynamiki*, PWN, Warszawa, 2005
- [19] H. González, S. R. Juárez, P. Kielanowski, M. Loewe, *Multipole expansion in magnetostatics*, Am. J. Phys. **66** (1998) 228–231
- [20] J. H. Van Vleck, *The theory of electric and magnetic susceptibilities*, Oxford University Press, London, 1932
- [21] A. Dalgarno, *Atomic polarizabilities and shielding factors*, Adv. Phys. **11** (1962) 281–315
- [22] F. D. Feiok, W. R. Johnson, *Atomic susceptibilities and shielding factors*, Phys. Rev. **187** (1969) 39–50
- [23] S. Kielich, *Molekularna optyka nieliniowa*, PWN, Warszawa, 1977
- [24] D. Kolb, W. R. Johnson, P. Shorer, *Electric and magnetic susceptibilities and shielding factors for closed-shell atoms and ions of high nuclear charge*, Phys. Rev. A **26** (1982) 19–31
- [25] P. Lazzeretti, *Electric and magnetic properties of molecules*, w: *Handbook of molecular physics and quantum chemistry*, vol. 3: *Molecules in the physico-chemical environment: spectroscopy, dynamics, and bulk properties*, red. S. Wilson, Wiley, Chichester, 2003
- [26] L. D. Landau, E. M. Lifszyc, *Mechanika kwantowa. Teoria nierelatywistyczna*, wyd. 2, PWN, Warszawa, 1979
- [27] Ya. I. Granovsky, V. I. Nechet, *Static effects in hydrogenlike atoms (Relativistic theory)*, Yad. Fiz. **19** (1974) 1290–1297 (ros.)
- [28] N. L. Manakov, L. P. Rapoport, S. A. Zapryagaev, *Relativistic electromagnetic susceptibilities of hydrogen-like atoms*, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **7** (1974) 1076–1082
- [29] B. A. Zon, N. L. Manakov, L. P. Rapoport, *Coulomb Green function in the  $x$ -representation and the relativistic polarizability of hydrogen atom*, Yad. Fiz. **15** (1972) 508–517 (ros.) [Sov. J. Nucl. Phys. **15** (1972) 282–286]
- [30] N. L. Manakov, L. P. Rapoport, S. A. Zapryagaev, *Sturmian expansion of the relativistic Coulomb Green function*, Phys. Lett. A **43** (1973) 139–140
- [31] N. L. Manakov, S. A. Zapryagaev, *A reduced Green function of the Dirac equation with a Coulomb potential. Second order Zeeman effect*, Phys. Lett. A **58** (1976) 23–25
- [32] S. A. Zapryagaev, N. L. Manakov, *The use of the Coulomb Green functions to the studies of relativistic and correlation effects in highly stripped ions*, Izv. Akad. Nauk SSSR Ser. Fiz. **45** (1981) 2336–2353 (ros.)
- [33] S. A. Zapryagaev, N. L. Manakov, V. G. Pal'chikov, *Theory of multi-charged ions with one and two electrons*, Energoatomizdat, Moskwa, 1985 (ros.)
- [34] L. N. Labzovsky, G. L. Klimchitskaya, Yu. Yu. Dmitriev, *Relativistic effects in the spectra of atomic systems*, Institute of Physics, Bristol, 1993
- [35] C. A. Coulson, M. J. Stephen, *The quadrupole polarizability of the hydrogen atom*, Proc. Phys. Soc. A **69** (1956) 777–782
- [36] A. V. Turbiner, *On eigenfunctions in quarkonium potential model (Perturbation theory and variational method)*, Yad. Fiz. **46** (1987) 204–218 (ros.)

- [37] A. Y. Potekhin, A. V. Turbiner, *Hydrogen atom in a magnetic field: The quadrupole moment*, Phys. Rev. A **63** (2001) 065402/1-4
- [38] R. Szmytkowski, P. Stefańska, *Magnetic-field-induced electric quadrupole moment in the ground state of the relativistic hydrogenlike atom: Application of the Sturmian expansion of the generalized Dirac–Coulomb Green function*, Phys. Rev. A **85** (2012) 042502/1-6
- [39] R. Szmytkowski, *The Dirac–Coulomb Sturmians and the series expansion of the Dirac–Coulomb Green function: application to the relativistic polarizability of the hydrogen-like atom*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **30** (1997) 825–861; Errata: J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **30** (1997) 2747
- [40] H. Margenau, *Relativistic magnetic moment of a charged particle*, Phys. Rev. **57** (1940) 383–386
- [41] W. E. Lamb, Jr., *Internal diamagnetic fields*, Phys. Rev. **60** (1941) 817–819
- [42] S. A. Zapryagaev, N. L. Manakov, L. P. Rapoport, *Multipole screening of nuclei of hydrogen-like atoms*, Yad. Fiz. **19** (1974) 1136–1139 (ros.)
- [43] E. A. Moore, *Relativistic chemical shielding: formally exact solutions for one-electron atoms of maximum total angular momentum for any principal quantum number*, Mol. Phys. **97** (1999) 375–380
- [44] N. C. Pyper, Z. C. Zhang, *Relativistic theory of nuclear shielding in one-electron atoms II: Analytical and numerical results*, Mol. Phys. **97** (1999) 391–413
- [45] N. F. Ramsey, *Magnetic shielding of nuclei in molecules*, Phys. Rev. **78** (1950) 699–703
- [46] V. G. Ivanov, S. G. Karshenboim, R. N. Lee, *Electron shielding of the nuclear magnetic moment in a hydrogenlike atom*, Phys. Rev. A **79** (2009) 012512/1-8
- [47] L. Cheng, Y. Xiao, W. Liu, *Four-component relativistic theory for NMR parameters: Unified formulation and numerical assessment of different approaches*, J. Chem. Phys. **130** (2009) 144102/1-18
- [48] R. Szmytkowski, P. Stefańska, *Comment on “Four-component relativistic theory for NMR parameters: Unified formulation and numerical assessment of different approaches” [J. Chem. Phys. 130, 144102 (2009)]*, arXiv:1102.1811v1
- [49] P. Stefańska, R. Szmytkowski, *Electric and magnetic dipole shielding constants for the ground state of the relativistic hydrogen-like atom: Application of the Sturmian expansion of the generalized Dirac–Coulomb Green function*, Int. J. Quantum Chem. **112** (2012) 1363–1372
- [50] A. Poszwa, A. Rutkowski, *Static dipole magnetic susceptibilities of relativistic hydrogenlike atoms: A semianalytical approach*, Phys. Rev. A **75** (2007) 033402/1-7
- [51] A. Poszwa, *Metoda szeregów potęgowych w zagadnieniu własnym operatora Hamiltona*, Rozprawa doktorska, Uniwersytet Warmińsko-Mazurski, 2004
- [52] G. W. F. Drake, S. P. Goldman, *Relativistic Sturmian and finite basis set methods in atomic physics*, Adv. At. Mol. Phys. **25** (1988) 393–416
- [53] I. P. Grant, *Relativistic atomic structure and electron–atom collisions*, w: *The effects of relativity in atoms, molecules, and the solid state*, red. S. Wilson, I. P. Grant, B. L. Gyorffy, Plenum, New York, 1991

- [54] R. Szmytkowski, *Magnetizability of the relativistic hydrogen-like atom: application of the Sturmian expansion of the first-order Dirac–Coulomb Green function*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **35** (2002) 1379–1391
- [55] K. Mielewczyk, *Jednoelektronowy atom Diraca w słabym polu elektrycznym*, Rozprawa doktorska, Politechnika Gdańska, 2007
- [56] R. Szmytkowski, *Dynamic polarizability of the relativistic hydrogenlike atom: Application of the Sturmian expansion of the Dirac–Coulomb Green function*, Phys. Rev. A **65** (2002) 012503/1-8
- [57] K. Mielewczyk, R. Szmytkowski, *Stark-induced magnetic anapole moment in the ground state of the relativistic hydrogenlike atom: Application of the Sturmian expansion of the generalized Dirac–Coulomb Green function*, Phys. Rev. A **73** (2006) 022511/1-11; Errata: Phys. Rev. A **73** (2006) 039908
- [58] R. Szmytkowski, P. Stefańska, *Electric-field-induced magnetic quadrupole moment in the ground state of the relativistic hydrogenlike atom: Application of the Sturmian expansion of the generalized Dirac–Coulomb Green function*, Phys. Rev. A **89** (2014) 012501/1-7
- [59] L. I. Schiff, *Mechanika kwantowa*, wyd. 2, PWN, Warszawa, 1987
- [60] H. A. Bethe, E. E. Salpeter, *Quantum mechanics of one- and two-electron atoms*, Plenum/Rosetta, New York, 1977
- [61] J. J. Sakurai, *Advanced quantum mechanics*, Addison-Wesley, Reading, MA, 1967
- [62] W. Greiner, *Relativistic quantum mechanics. Wave equations*, Springer, Berlin, 1994
- [63] J. D. Bjorken, S. D. Drell, *Relatywistyczna teoria kwantów*, PWN, Warszawa, 1985
- [64] M. Kolsrud, *On the solution of Dirac’s equations with Coulomb potential*, Phys. Norv. **2** (1996) 43–50
- [65] R. A. Swainson, G. W. F. Drake, *A unified treatment of the non-relativistic and relativistic hydrogen atom I: the wavefunctions*, J. Phys. A: Math. Gen. **24** (1991) 79–94
- [66] A. Sommerfeld, *Atombau und Spektrallinien*, tom II, Vieweg, Braunschweig, 1951 [tł. ros.: GITTL, Moskwa, 1956]
- [67] E. A. Hylleraas, *On the solution of the relativistic wave equation for an electron in a Coulomb field*, Avh. Norske Vidensk.-Akad. Oslo, Mat.-Nat. Kl. **1** (1943) 1–15
- [68] A. Messiah, *Quantum mechanics*, North-Holland, Amsterdam, 1962
- [69] B. Średniawa, *Mechanika kwantowa*, PWN, Warszawa, 1988
- [70] S. A. Zapryagaev, *Zeeman effect of the fine structure levels of a hydrogenlike atom*, Opt. Spektrosk. **47** (1979) 18–26 (ros.) [Opt. Spectrosc. **47** (1979) 9–13]
- [71] R. Szmytkowski, *Larmor diamagnetism and Van Vleck paramagnetism in relativistic quantum theory: The Gordon decomposition approach*, Phys. Rev. A **65** (2002) 032112/1-8
- [72] A. Rutkowski, A. Poszwa, *Analytical solution for relativistic hydrogenic atom in static and uniform magnetic field*, Phys. Scr. **71** (2005) 484–488
- [73] E. A. Hylleraas, *Über den Grundzustand des Heliumatoms*, Z. Phys. **48** (1928) 469–494

- [74] E. A. Hylleraas, *Neue Berechnung der Energie des Heliums im Grundzustande, sowie des Tiefsten Terms von Ortho-Helium*, Z. Phys. **54** (1929) 347–366
- [75] E. Holøien, *Radial configurational interaction in helium and similar atomic systems*, Phys. Rev. **104** (1956) 1301–1303
- [76] P. O. Löwdin, H. Shull, *Natural orbitals in the quantum theory of two-electron systems*, Phys. Rev. **101** (1956) 1730–1739
- [77] B. Podolsky, V. Rojansky, *On the theory of the Smekal–Raman effect in hydrogen-like atoms*, Phys. Rev. **34** (1929) 1367–1372
- [78] B. Podolsky, *The dispersion by hydrogen-like atoms in undulatory mechanics*, Proc. Nat. Acad. Sci. USA **14** (1928) 253–258
- [79] F. Reiche, *Zur quantenmechanischen Dispersionformel des atomaren Wasserstoffs im Grundzustand*, Z. Phys. **53** (1929) 168–191
- [80] M. Rotenberg, *Theory and application of Sturmian functions*, Adv. At. Mol. Phys. **6** (1970) 233–268
- [81] C. Schwartz, *Variational calculations of scattering*, Ann. Phys. (N.Y.) **16** (1961) 36–50
- [82] L. C. Hostler, *Coulomb Green’s function in  $f$ -dimensional space*, J. Math. Phys. **11** (1970) 2966–2970
- [83] A. Maquet, *Use of the Coulomb Green’s function in atomic calculations*, Phys. Rev. A **15** (1977) 1088–1108
- [84] R. Shakeshaft, *Sturmian expansion of the Green’s function and its application to multiphoton ionization of hydrogen*, Phys. Rev. A **34** (1986) 244–252
- [85] H. M. Quiney, *The Dirac equation in the algebraic approximation*, w: *Handbook of molecular physics and quantum chemistry*, vol. 2: *Molecular electronic structure*, red. S. Wilson, Wiley, Chichester, 2003;  
[http://media.johnwiley.com.au/product\\_data/excerpt/41/04716237/0471623741-2.pdf](http://media.johnwiley.com.au/product_data/excerpt/41/04716237/0471623741-2.pdf)
- [86] R. Szmytkowski, *Addendum to “The Dirac–Coulomb Sturmians and the series expansion of the Dirac–Coulomb Green function: application to the relativistic polarizability of the hydrogen-like atom”*, arXiv:physics/9902050v1
- [87] R. Szmytkowski, *The Dirac–Coulomb Sturmian functions in the  $Z = 0$  limit: properties and applications to series expansions of the Dirac Green function and the Dirac plane wave*, J. Phys. A: Math. Gen. **33** (2000) 427–441
- [88] R. Szmytkowski, *Discrete radial Schrödinger–Coulomb and Dirac–Coulomb Sturmian functions: Summary of properties*, nieopublikowany raport
- [89] R. A. Swainson, G. W. F. Drake, *A unified treatment of the non-relativistic and relativistic hydrogen atom II: the Green functions*, J. Phys. A: Math. Gen. **24** (1991) 79–94
- [90] R. A. Swainson, G. W. F. Drake, *A unified treatment of the non-relativistic and relativistic hydrogen atom III: the reduced Green functions*, J. Phys. A: Math. Gen. **24** (1991) 1801–1824
- [91] V. M. Dubovik, V. V. Tugushev, *Toroid moments in electrodynamics and solid-state physics*, Phys. Rep. **187** (1990) 145–202
- [92] J. M. Blatt, V. F. Weisskopf, *Theoretical nuclear physics*, Wiley, New York, 1952

- [93] D. A. Varshalovich, A. N. Moskalev, V. K. Khersonskii, *Quantum theory of angular momentum: Irreducible tensors, spherical harmonics, vector coupling coefficients, 3nj symbols*, Nauka, Leningrad, 1975 (ros.) [World Scientific, Singapore, 1988]
- [94] I. I. Sobelman, *Atomic spectra and radiative transitions*, wyd. 2, Springer, Berlin, 1992
- [95] E. R. Cohen, B. N. Taylor, *The 1986 CODATA recommended values of the fundamental physical constants*, J. Phys. Chem. Ref. Data **17** (1988) 1795–1803
- [96] D. Andrae, *Recursive evaluation of expectation values  $\langle r^k \rangle$  for arbitrary states of the relativistic one-electron atom*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **30** (1997) 4435–4451
- [97] D. M. Brink, G. R. Satchler, *Angular momentum*, wyd. 3, Clarendon, Oxford, 1993
- [98] E. Karaśkiewicz, *Zarys teorii wektorów i tensorów*, PWN, Warszawa, 1974
- [99] E. U. Condon, G. H. Shortley, *The theory of atomic spectra*, Cambridge University Press, Cambridge, 1959
- [100] R. Szmytkowski, *Some summation formulae for spherical spinors*, J. Phys. A: Math. Gen. **38** (2005) 8893–9005
- [101] R. Szmytkowski, *Recurrence and differential relations for spherical spinors*, J. Math. Chem. **42** (2007) 397–413
- [102] W. Magnus, F. Oberhettinger, R. P. Soni, *Formulas and theorems for the special functions of mathematical physics*, wyd. 3, Springer, Berlin, 1966
- [103] E. Korpala, *Funkcje specjalne*, Uczelniane Wydawnictwa Naukowo-Dydaktyczne AGH, Kraków, 2001
- [104] M. Abramowitz, I. A. Stegun (red.), *Handbook of mathematical functions*, 10th printing, Dover, New York, 1972
- [105] R. Szmytkowski, K. Mielewczyk, *Gordon decomposition of the static dipole polarizability of the relativistic hydrogen-like atom: application of the Sturmian expansion of the first-order Dirac–Coulomb Green function*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **37** (2004) 3961–3972
- [106] I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik, *Table of integrals, series, and products*, wyd. 5, Academic, San Diego, 1994
- [107] E. T. Whittaker, G. N. Watson, *Kurs analizy współczesnej*, tom II, PWN, Warszawa, 1968
- [108] W. N. Bailey, *Generalized hypergeometric series*, Cambridge University Press, Cambridge, 1935 [reprint: Hafner, New York, 1972]
- [109] N. E. Nørlund, *Hypergeometric functions*, Acta Math. **94** (1955) 289–349
- [110] M. Milgram, *On hypergeometric  ${}_3F_2(1)$* , arXiv:math/0603096v1
- [111] M. Milgram, *On hypergeometric  ${}_3F_2(1)$  - A review*, arXiv:1011.4546v1
- [112] M. Milgram, *447 instances of hypergeometric  ${}_3F_2(1)$* , arXiv:1105.3126v1
- [113] L. J. Slater, *Generalized hypergeometric functions*, Cambridge University Press, Cambridge, 1966
- [114] A. P. Prudnikov, Yu. A. Brychikov, O. I. Marichev, *Integrals and series*, vol. 3: *Special functions*, wyd. 2, Fizmatlit, Moskwa, 2003 (ros.)