TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM TP HỒ CHÍ MINH
TẠP CHÍ KHOA HỌC
KHOA HỌC TỰ NHIÊN VÀ CÔNG NGHỆ
Tập 15, Số 12 (2018): 153-166

HO CHI MINH CITY UNIVERSITY OF EDUCATION
JOURNAL OF SCIENCE
NATURAL SCIENCES AND TECHNOLOGY
Vol. 15, No. 12 (2018): 153-166

ISSN: 1859-3100

Email: tapchikhoahoc@hcmue.edu.vn; Website: http://tckh.hcmue.edu.vn

YẾU TỐ MA TRẬN CHO NGUYÊN TỬ HELI

***Cao Hồ Thanh Xuân*[1*], *Lý Duy Nhất*[2], *Hoàng Đỗ Ngọc Trầm*[2]**

[1] *Phòng Đào tạo và Quản lí Nghiên cứu khoa học – Trường Cao đẳng Nông nghiệp Nam Bộ*
[2] *Khoa Vật lí – Trường Đại học Sư phạm Thành phố Hồ Chí Minh*

Ngày nhận bài: 17-8-2018, ngày nhận bài sửa 25-9-2018, ngày duyệt đăng: 21-12-2018

TÓM TẮT

Yếu tố ma trận cho nguyên tử heli được biểu diễn dưới dạng giải tích, thuận lợi cho việc lập trình tìm nghiệm số của bài toán. Bộ hàm cơ sở của bài toán được viết dưới dạng bộ hàm sóng của dao động tử điều hòa tám chiều thuận tiện cho tính toán. Yếu tố ma trận này có thể mở rộng để tìm nghiệm số cho các bài toán phức tạp hơn, như bài toán nguyên tử heli trong từ trường.

Từ khóa: nguyên tử heli, hệ nguyên tử ba chiều, phương pháp toán tử FK, bộ hàm cơ sở, yếu tố ma trận.

ABSTRACT

Matrix elements for helium atom

Matrix elements for a helium atom is represented in the analytical form. This is convenient for programming to obtain the exact numerical energies. A basic set in the algebraic form given as a set of eight-dimentional harmonic oscillator wave functions is useful for calculating. These matrix elements can be used for more complex atomic systems such as a helium atom in a magnetic field.

Keywords: helium atom, three-dimensional atomic systems, FK operator method, basic set, matrix elements.

1. Mở đầu

Cấu trúc điện tử của các hệ nguyên tử đơn giản trong từ trường luôn được quan tâm nghiên cứu do có liên quan đến việc nghiên cứu phổ của các sao lùn trắng và sao nơtron trong vật lí thiên văn. Việc nghiên cứu phổ của nguyên tử hydro trong từ trường đã đạt được nhiều kết quả quan trọng trong cả thực nghiệm lẫn lí thuyết (xem [1] và các trích dẫn trong đó). Tuy nhiên, việc phát triển các kết quả nêu trên cho bài toán nguyên tử heli gặp rất nhiều khó khăn, chủ yếu gây ra bởi sự tồn tại tương tác electron-electron trong nguyên tử này. Khó khăn nêu trên hiện vẫn đang được nhiều nhóm nghiên cứu khác nhau quan tâm giải quyết.

Trong rất nhiều công trình đã được công bố trước đây, các tính toán cấu trúc nguyên tử heli được phát triển dựa trên lí thuyết của Hartree-Fock (xem [2] và các trích dẫn trong đó). Tuy nhiên, do mức độ phức tạp của các tính toán giải tích, các kết quả thu được chưa

[*] Email: *xuancdnb@sac.edu.vn*

đáp ứng được yêu cầu mà các nhóm nghiên cứu đã đặt ra. Để nghiên cứu bài toán nguyên tử heli, nhóm chúng tôi đã sử dụng phép biến đổi Kustaanheimo – Stiefel chuyển bài toán nguyên tử heli sang bài toán dao động tử điều hòa tám chiều, kết hợp với phương pháp toán tử FK [3] - [5] viết lại Hamiltonian của bài toán dưới dạng đại số, đồng thời xây dựng được bộ hàm sóng cơ sở cho bài toán [6]. Phương pháp đại số được sử dụng đã giúp tiết kiệm đáng kể tài nguyên tính toán do bộ hàm cơ sở của bài toán có tính chất đặc thù, vừa vẫn giữ tính chất của bộ hàm cho tương tác Coulomb vừa có dạng của hàm sóng dao động tử điều hòa rất thuận tiện trong tính toán. Để tìm nghiệm số chính xác của bài toán, việc thực hiện các nghiên cứu tiếp theo là cần thiết.

Trong công trình này, chúng tôi tiếp tục sử dụng Hamiltonian và bộ hàm cơ sở dạng đại số đã được xây dựng trong công trình [6] để xây dựng các yếu tố ma trận được viết dưới dạng giải tích, thuận lợi cho việc lập trình tính toán tìm nghiệm số chính xác của bài toán về sau. Các yếu tố ma trận này cũng có thể phát triển cho các bài toán phức tạp hơn như bài toán nguyên tử heli trong từ trường và một số bài toán khác.

Với bài toán nguyên tử heli, ngoài việc sử dụng phép biến đổi Kustaanheimo – Stiefel để đưa các thành phần tương tác Coulomb về dạng đa thức, chúng tôi sử dụng thêm phép biến đổi Fourier để đa thức hóa thành phần tương tác electron-electron. Kết quả thu được là các biểu thức tường minh của các yếu tố ma trận, các thành phần khác không của các yếu tố ma trận và miền xác định của các chỉ số lượng tử. Điều này rất quan trọng vì nó giúp tiết kiệm tài nguyên và thời gian tính toán khi lập trình tìm nghiệm số chính xác của bài toán sau này.

2. Phương pháp đại số giải phương trình Schrödinger cho nguyên tử heli

Phương trình Schrödinger không thứ nguyên cho nguyên tử heli, mô tả chuyển động của hai electron trong trường thế Coulomb, có dạng như sau:

$$\begin{aligned}&(\hat{H}-E)\Psi(x_1,y_1,z_1;x_2,y_2,z_2)=0,\\ &\hat{H}=-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_1^2}\right)-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_2^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_2^2}\right)\\ &\qquad-\frac{Z}{\sqrt{x_1^2+y_1^2+z_1^2}}-\frac{Z}{\sqrt{x_1^2+y_1^2+z_1^2}}+\frac{1}{\sqrt{(x_1-x_2)^2+(y_1-y_2)^2+(z_1-z_2)^2}},\end{aligned} \tag{1}$$

trong đó, đơn vị độ dài là bán kính Bohr $a_0 = 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/me^2 = 0.529\,\overset{0}{\mathrm{A}}$; đơn vị năng lượng là hai lần hằng số Rydberg $R_y = \hbar^2/2ma_0^2 = 13.61\text{eV}$; Z là điện tích hạt nhân của nguyên tử heli, trong công trình này $Z = 2$.

Sau khi sử dụng phép biến đổi Kustaanheimo-Stiefel và phép biến đổi Fourier bài toán nguyên tử heli có thể đưa về dạng bài toán dao động tử điều hòa tám chiều như sau:

$$\hat{\tilde{H}}\,\mathrm{Y}(u_1,v_1,u_2,v_2,u_3,v_3,u_4,v_4) = 0\,, \tag{2}$$

với $\hat{\tilde{H}}$ có dạng tường minh trong không gian (u,v) như sau:

$$\begin{aligned}\hat{\tilde{H}} = &\left(u_3^2+v_3^2+u_4^2+v_4^2\right)\left[-\frac{1}{8}\left(\frac{\partial^2}{\partial u_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial v_1^2}\right)-\frac{1}{8}\left(\frac{\partial^2}{\partial u_2^2}+\frac{\partial^2}{\partial v_2^2}\right)-\frac{E}{2}\left(u_1^2+v_1^2+u_2^2+v_2^2\right)-Z\right]\\ &+\left(u_1^2+v_1^2+u_2^2+v_2^2\right)\left[-\frac{1}{8}\left(\frac{\partial^2}{\partial u_3^2}+\frac{\partial^2}{\partial v_3^2}\right)-\frac{1}{8}\left(\frac{\partial^2}{\partial u_4^2}+\frac{\partial^2}{\partial v_4^2}\right)-\frac{E}{2}\left(u_3^2+v_3^2+u_4^2+v_4^2\right)-Z\right]\\ &+\hat{H}_C(u_1,u_2,u_3,u_4,v_1,v_2,v_3,v_4).\end{aligned} \tag{3}$$

trong đó, số hạng cuối trong Hamiltonian (3) là thành phần tương tác electron-electron, có chứa các biến số động học ở mẫu số, nhưng vẫn có thể sử dụng các tính toán đại số sau khi biến đổi Fourier:

$$\begin{aligned}\hat{H}_C = &\frac{\left(u_1^2+v_1^2+u_2^2+v_2^2\right)\left(u_3^2+v_3^2+u_4^2+v_4^2\right)}{(2\pi)^{3/2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}dt_1\,dt_2 dt_3\frac{1}{\sqrt{t_1^2+t_2^2+t_3^3}}\\ &\times e^{2i(u_1u_2+v_1v_2)t_1+2i(u_1v_2-u_2v_1)t_2+i(u_1^2-u_2^2+v_1^2-v_2^2)t_3}e^{-2i(u_3u_4+v_3v_4)t_1-2i(u_3v_4-u_4v_3)t_2-i(u_3^2-u_4^2+v_3^2-v_4^2)t_3}.\end{aligned} \tag{4}$$

Bài toán đang xét bảo toàn moment động lượng theo trục Oz do toán tử:

$$\hat{L}_z = \hat{L}_{1z}+\hat{L}_{2z} = -i\left(x_1\frac{\partial}{\partial y_1}-y_1\frac{\partial}{\partial x_1}\right)-i\left(x_2\frac{\partial}{\partial y_2}-y_2\frac{\partial}{\partial x_2}\right), \tag{5}$$

giao hoán với Hamiltonian. Để sử dụng trong các tính toán, chúng tôi viết toán tử (5) trong không gian (u_s,v_s) như sau:

$$\hat{L}_z = -\frac{i}{2}\left(v_1\frac{\partial}{\partial u_1}-u_1\frac{\partial}{\partial v_1}+u_2\frac{\partial}{\partial v_2}-v_2\frac{\partial}{\partial u_2}\right)-\frac{i}{2}\left(v_3\frac{\partial}{\partial u_3}-u_3\frac{\partial}{\partial v_3}+u_4\frac{\partial}{\partial v_4}-v_4\frac{\partial}{\partial u_4}\right). \tag{6}$$

Để sử dụng phương pháp đại số giải bài toán, trước tiên chúng tôi định nghĩa các toán tử sinh hủy như sau:

$$\begin{cases}\hat{\alpha}_s = \sqrt{\dfrac{\omega}{2}}\left(\hat{u}_s+\dfrac{1}{\omega}\dfrac{\partial}{\partial\hat{u}_s}\right),\ \hat{\alpha}_s^+ = \sqrt{\dfrac{\omega}{2}}\left(\hat{u}_s-\dfrac{1}{\omega}\dfrac{\partial}{\partial\hat{u}_s}\right),\\ \hat{\beta}_s = \sqrt{\dfrac{\omega}{2}}\left(\hat{v}_s+\dfrac{1}{\omega}\dfrac{\partial}{\partial\hat{v}_s}\right),\ \hat{\beta}_s^+ = \sqrt{\dfrac{\omega}{2}}\left(\hat{v}_s-\dfrac{1}{\omega}\dfrac{\partial}{\partial\hat{v}_s}\right),\end{cases} \tag{7}$$

trong đó, ω là tham số tự do; $s=1,2,3,4$. Các toán tử (7) thỏa mãn các giao hoán tử sau:

$$\left[\hat{\alpha}_s(\omega),\hat{\alpha}_t^+(\omega)\right]=\delta_{st},\ \left[\hat{\beta}_s(\omega),\hat{\beta}_t^+(\omega)\right]=\delta_{st}. \tag{8}$$

Toán tử $\hat{L}_z$ viết dưới dạng các toán tử sinh hủy (7) không có dạng trung hòa. Để thu được toán tử $\hat{L}_z$ có dạng trung hòa chúng tôi sử dụng phép biến đổi chính tắc sau để định nghĩa các toán tử sinh hủy mới:

$$\begin{cases} \hat{a}_s^+ = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{\alpha}_s^+ + i\hat{\beta}_s^+\right), \ \hat{a}_s = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{\alpha}_s - i\hat{\beta}_s\right), \\ \hat{b}_s^+ = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{\alpha}_s^+ - i\hat{\beta}_s^+\right), \ \hat{b}_s = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{\alpha}_s + i\hat{\beta}_s\right), \end{cases} \tag{9}$$

Các toán tử $\hat{a}_s, \hat{a}_s^+, \hat{b}_s, \hat{b}_s^+$ $(s = 1,2,3,4)$ giữ nguyên các tính chất của các toán tử sinh hủy, và thỏa mãn các giao hoán tử sau:

$$\left[\hat{a}_s, \hat{a}_t^+\right] = \delta_{st}, \quad \left[\hat{b}_s, \hat{b}_t^+\right] = \delta_{st}. \tag{10}$$

Toán tử $\hat{L}_z$ qua biểu diễn đại số (9) có dạng trung hòa như sau:

$$\hat{L}_z = \frac{1}{2}\left(\hat{a}_1^+\hat{a}_1 - \hat{a}_2^+\hat{a}_2 - \hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2\right) + \frac{1}{2}\left(\hat{a}_3^+\hat{a}_3 - \hat{a}_4^+\hat{a}_4 - \hat{b}_3^+\hat{b}_3 + \hat{b}_4^+\hat{b}_4\right). \tag{11}$$

Hamiltonian (3) qua biểu diễn đại số (9) có dạng như sau:

$$\hat{\hat{H}} = \hat{\hat{H}}_1 + \hat{\hat{H}}_2 + \hat{\hat{H}}_3 + \hat{\hat{H}}_4 + \hat{\hat{H}}_5 + \hat{\hat{H}}_6 , \tag{12}$$

với:

$$\hat{\hat{H}}_1 = -\frac{1}{8}\left(\hat{M}_3 + \hat{M}_3^+ + \hat{N}_3 + \hat{M}_4 + \hat{M}_4^+ + \hat{N}_4 + 2\right)\left(\hat{M}_1 + \hat{M}_1^+ - \hat{N}_1 + \hat{M}_2 + \hat{M}_2^+ - \hat{N}_2 - 2\right), \tag{13}$$

$$\hat{\hat{H}}_2 = -\frac{1}{8}\left(\hat{M}_1 + \hat{M}_1^+ + \hat{N}_1 + \hat{M}_2 + \hat{M}_2^+ + \hat{N}_2 + 2\right)\left(\hat{M}_3 + \hat{M}_3^+ - \hat{N}_3 + \hat{M}_4 + \hat{M}_4^+ - \hat{N}_4 - 2\right), \tag{14}$$

$$\hat{\hat{H}}_3 = -\frac{Z}{\omega}\left(\hat{M}_1 + \hat{M}_1^+ + \hat{N}_1 + \hat{M}_2 + \hat{M}_2^+ + \hat{N}_2 + 2\right), \tag{15}$$

$$\hat{\hat{H}}_4 = -\frac{Z}{\omega}\left(\hat{M}_3 + \hat{M}_3^+ + \hat{N}_3 + \hat{M}_4 + \hat{M}_4^+ + \hat{N}_4 + 2\right), \tag{16}$$

$$\hat{\hat{H}}_5 = -\frac{1}{\omega^2}\left(\hat{M}_1 + \hat{M}_1^+ + \hat{N}_1 + \hat{M}_2 + \hat{M}_2^+ + \hat{N}_2 + 2\right)\left(\hat{M}_3 + \hat{M}_3^+ + \hat{N}_3 + \hat{M}_4 + \hat{M}_4^+ + \hat{N}_4 + 2\right)E, \tag{17}$$

$$\hat{\hat{H}}_6 = \left(\hat{M}_1 + \hat{M}_1^+ + \hat{N}_1 + \hat{M}_2 + \hat{M}_2^+ + \hat{N}_2 + 2\right)\left(\hat{M}_3 + \hat{M}_3^+ + \hat{N}_3 + \hat{M}_4 + \hat{M}_4^+ + \hat{N}_4 + 2\right)\hat{S}, \tag{18}$$

và:

$$\hat{S} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}\,\omega^2}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dt_1dt_2dt_3}{\sqrt{t_1^2 + t_2^2 + t_3^2}}\hat{S}_1\hat{S}_2, \tag{19}$$

$$
\begin{aligned}
\hat{S}_1 = {} & \sum_{j_1=0}^{+\infty}\sum_{j_2=0}^{+\infty}\sum_{j_3=0}^{+\infty}\sum_{j_4=0}^{+\infty}\sum_{j_5=0}^{+\infty}\sum_{j_6=0}^{+\infty}\sum_{j_7=0}^{+\infty}\sum_{j_8=0}^{+\infty} \frac{1}{j_1!\,j_2!\,j_3!\,j_4!\,j_5!\,j_6!\,j_7!\,j_8!} \sum_{l_1=0}^{j_3}\sum_{l_2=0}^{j_4}\sum_{l_3=0}^{j_5}\sum_{l_4=0}^{j_6} C_{l_1}^{j_3} C_{l_2}^{j_4} C_{l_3}^{j_5} C_{l_4}^{j_6} \\
& \times \sum_{p_1=0}^{+\infty}\sum_{p_2=0}^{+\infty}\sum_{p_3=0}^{+\infty}\sum_{p_4=0}^{+\infty} \frac{1}{p_1!\,p_2!\,p_3!\,p_4!} \left(\frac{1}{1+t_1^2+t_2^2+t_3^2}\right)^{j_1+j_2+j_3+j_4+j_5+j_6+j_7+j_8-l_1-l_2-l_3-l_4} \\
& \times \left(it_1+t_2\right)^{j_1+j_7+p_3+p_4} \left(it_1-t_2\right)^{j_2+j_8+p_1+p_2} \left(1+it_3\right)^{j_3+j_6-p_1-p_4-l_1-l_4} \left(1-it_3\right)^{j_4+j_5-p_2-p_3-l_2-l_3} \\
& \times \left(\hat{a}_1^+\hat{b}_2^+\right)^{j_1} \left(\hat{a}_2^+\hat{b}_1^+\right)^{j_2} \left(\hat{a}_1^+\hat{b}_1^+\right)^{j_3} \left(\hat{a}_2^+\hat{b}_2^+\right)^{j_4} \left(\hat{a}_1\hat{a}_2^+\right)^{p_1} \left(\hat{b}_1^+\hat{b}_2\right)^{p_2} \\
& \times \left[\frac{\left(1+it_3\right)^2}{1+t_1^2+t_2^2+t_3^2}\right]^{\frac{1}{2}\left(\hat{a}_1^+\hat{a}_1-\hat{a}_2^+\hat{a}_2\right)} \left[\frac{\left(1-it_3\right)^2}{1+t_1^2+t_2^2+t_3^2}\right]^{\frac{1}{2}\left(\hat{b}_2^+\hat{b}_2-\hat{b}_1^+\hat{b}_1\right)} \left(\hat{b}_1\hat{b}_2^+\right)^{p_3} \left(\hat{a}_1^+\hat{a}_2\right)^{p_4} \\
& \times \left(\frac{1}{1+t_1^2+t_2^2+t_3^2}\right)^{\frac{1}{2}\left(\hat{a}_1^+\hat{a}_1+\hat{b}_1^+\hat{b}_1+\hat{a}_2^+\hat{a}_2+\hat{b}_2^+\hat{b}_2+2\right)} \left(\hat{a}_2\hat{b}_2\right)^{j_5} \left(\hat{a}_1\hat{b}_1\right)^{j_6} \left(\hat{a}_2\hat{b}_1\right)^{j_7} \left(\hat{a}_1\hat{b}_2\right)^{j_8},
\end{aligned}
\tag{20}
$$

$$
\begin{aligned}
\hat{S}_2 = {} & \sum_{j_9=0}^{+\infty}\sum_{j_{10}=0}^{+\infty}\sum_{j_{11}=0}^{+\infty}\sum_{j_{12}=0}^{+\infty}\sum_{j_{13}=0}^{+\infty}\sum_{j_{14}=0}^{+\infty}\sum_{j_{15}=0}^{+\infty}\sum_{j_{16}=0}^{+\infty} \frac{(-1)^{j_9+j_{10}+j_{15}+j_{16}}}{j_9!\,j_{10}!\,j_{11}!\,j_{12}!\,j_{13}!\,j_{14}!\,j_{15}!\,j_{16}!} \\
& \times \sum_{l_5=0}^{j_{11}}\sum_{l_6=0}^{j_{12}}\sum_{l_7=0}^{j_{13}}\sum_{l_8=0}^{j_{14}} C_{l_5}^{j_{11}} C_{l_6}^{j_{12}} C_{l_7}^{j_{13}} C_{l_8}^{j_{14}} \sum_{p_5=0}^{+\infty}\sum_{p_6=0}^{+\infty}\sum_{p_7=0}^{+\infty}\sum_{p_8=0}^{+\infty} \frac{(-1)^{p_5+p_6+p_7+p_8}}{p_5!\,p_6!\,p_7!\,p_8!} \\
& \times \left(\frac{1}{1+t_1^2+t_2^2+t_3^2}\right)^{j_9+j_{10}+j_{11}+j_{12}+j_{13}+j_{14}+j_{15}+j_{16}-l_5-l_6-l_7-l_8} \\
& \times \left(it_1+t_2\right)^{j_9+j_{15}+p_5+p_6} \left(it_1-t_2\right)^{j_{10}+j_{16}+p_7+p_8} \left(1-it_3\right)^{j_{11}+j_{14}-p_6-p_7-l_5-l_8} \left(1+it_3\right)^{j_{12}+j_{13}-p_5-p_8-l_6-l_7} \\
& \times \left(\hat{a}_3^+\hat{b}_4^+\right)^{j_9} \left(\hat{a}_4^+\hat{b}_3^+\right)^{j_{10}} \left(\hat{a}_3^+\hat{b}_3^+\right)^{j_{11}} \left(\hat{a}_4^+\hat{b}_4^+\right)^{j_{12}} \left(\hat{a}_3^+\hat{a}_4\right)^{p_5} \left(\hat{b}_3\hat{b}_4^+\right)^{p_6} \\
& \times \left[\frac{\left(1+it_3\right)^2}{1+t_1^2+t_2^2+t_3^2}\right]^{\frac{1}{2}\left(\hat{a}_4^+\hat{a}_4-\hat{a}_3^+\hat{a}_3\right)} \left[\frac{\left(1-it_3\right)^2}{1+t_1^2+t_2^2+t_3^2}\right]^{\frac{1}{2}\left(\hat{b}_3^+\hat{b}_3-\hat{b}_4^+\hat{b}_4\right)} \left(\hat{b}_3^+\hat{b}_4\right)^{p_7} \left(\hat{a}_3\hat{a}_4^+\right)^{p_8} \\
& \times \left(\frac{1}{1+t_1^2+t_2^2+t_3^2}\right)^{\frac{1}{2}\left(\hat{a}_3^+\hat{a}_3+\hat{b}_3^+\hat{b}_3+\hat{a}_4^+\hat{a}_4+\hat{b}_4^+\hat{b}_4+2\right)} \left(\hat{a}_4\hat{b}_4\right)^{j_{13}} \left(\hat{a}_3\hat{b}_3\right)^{j_{14}} \left(\hat{a}_4\hat{b}_3\right)^{j_{15}} \left(\hat{a}_3\hat{b}_4\right)^{j_{16}},
\end{aligned}
\tag{21}
$$

$$
\begin{aligned}
& \hat{M}_i = \hat{a}_i\hat{b}_i,\ \hat{M}_i^+ = \hat{a}_i^+\hat{b}_i^+,\ \hat{N}_i = \hat{a}_i^+\hat{a}_i + \hat{b}_i^+\hat{b}_i,\ i = 1, 2, 3, 4, \\
& \left[\hat{M}_i, \hat{M}_i^+\right] = \hat{N}_i + 1,\ \left[\hat{M}_i, \hat{N}_i + 1\right] = 2\hat{M}_i,\ \left[\hat{N}_i + 1, \hat{M}_i^+\right] = 2\hat{M}_i^+.
\end{aligned}
\tag{22}
$$

Biểu thức (18) mô tả thành phần tương tác electron-electron trong nguyên tử heli.

3. Bộ hàm cơ sở dạng đại số

Bộ hàm cơ sở dạng đại số đã được xây dựng trong công trình [6], thỏa mãn hai điều kiện như sau: (1) là hàm sóng riêng của hệ hai dao động tử điều hòa bốn chiều (tám bậc tự do), (2) là hàm sóng riêng của toán tử $\hat{L}_z$, và có dạng tường minh như sau:

$$
\left|n_1, m_1, n_2, m_2, k_1, k_2(\omega)\right\rangle = \left|n_1, m_1, k_1(\omega)\right\rangle \left|n_2, m_2, k_2(\omega)\right\rangle, \tag{23}
$$

với

$$\left|n_1, m_1, k_1(\omega)\right\rangle = N_{n_1,m_1,k_1}\left(\hat{a}_1^+\right)^{n_1-k_1}\left(\hat{b}_1^+\right)^{n_1-m_1-k_1}\left(\hat{a}_2^+\right)^{k_1}\left(\hat{b}_2^+\right)^{k_1+m_1}\left|0(\omega)\right\rangle,$$
$$N_{n_1,m_1,k_1} = \frac{1}{\sqrt{(n_1-k_1)!k_1!(n_1-m_1-k_1)!(k_1+m_1)!}}, \tag{24}$$

$$\left|n_2, m_2, k_2(\omega)\right\rangle = N_{n_2,m_2,k_2}\left(\hat{a}_3^+\right)^{n_2-k_2}\left(\hat{b}_3^+\right)^{n_2-m_2-k_2}\left(\hat{a}_4^+\right)^{k_2}\left(\hat{b}_4^+\right)^{k_2+m_2}\left|0(\omega)\right\rangle,$$
$$N_{n_2,m_2,k_2} = \frac{1}{\sqrt{(n_2-k_2)!k_2!(n_2-m_2-k_2)!(k_2+m_2)!}}, \tag{25}$$

Chú ý rằng, trong bộ hàm cơ sở (23), các chỉ số n_1, m_1, k_1 liên quan đến electron một trong khi n_2, m_2, k_2 liên quan đến electron hai trong nguyên tử heli. Theo nguyên lí không phân biệt các hạt đồng nhất, chúng tôi sẽ đối xứng hóa bộ hàm sóng cơ sở theo hai electron khi tiến hành lập trình để tìm nghiệm số chính xác cho bài toán.

Đối với electron một, n_1 là chỉ số lượng tử chính, m_1 là chỉ số lượng tử từ và k_1 là chỉ số chạy, có các giá trị biến thiên như sau:

$$n_1 = 0,1,2,... \; ; \; k_1 \le n_1 ; \; -k_1 \le m_1 \le n_1 - k_1 . \tag{26}$$

Lập luận tương tự với electron hai, chúng tôi xác định được miền giá trị của các chỉ số lượng tử như sau:

$$n_2 = 0,1,2,... \; ; \; k_2 \le n_2 ; \; -k_2 \le m_2 \le n_2 - k_2 . \tag{27}$$

Bộ hàm cơ sở (23) có thể sử dụng cho việc giải phương trình Schrödinger cho nguyên tử heli bằng phương pháp đại số, và sử dụng cho các bài toán phức tạp hơn như nguyên tử heli trong từ trường.

4. Các yếu tố ma trận

Sử dụng bộ hàm cơ sở (23) để tính toán các yếu tố ma trận của Hamiltonian (12), chúng tôi thu được các yếu tố ma trận thành phần có dạng tổng quát như sau:

$$\left(\hat{\tilde{H}}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}} = \left\langle n_1+n_1s, k_1+k_1s, m_1; n_2+n_2s, k_2+k_2s, m_2\right|\hat{\tilde{H}}\left|n_1,k_1,m_1;n_2,k_2,m_2\right\rangle, \tag{28}$$

trong đó:

$$\left(\hat{\tilde{H}}_1\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}} = -\frac{1}{8}\left\langle n_1+n_1s, k_1+k_1s, m_1\right|\left(\hat{M}_1+\hat{M}_1^+-\hat{N}_1+\hat{M}_2+\hat{M}_2^+-\hat{N}_2-2\right)\left|n_1,k_1,m_1\right\rangle$$
$$*\left\langle n_2+n_2s, k_2+k_2s, m_2\right|\left(\hat{M}_3+\hat{M}_3^+ +\hat{N}_3+\hat{M}_4+\hat{M}_4^+ +\hat{N}_4+2\right)\left|n_2,k_2,m_2\right\rangle, \tag{29}$$

$$\left(\hat{\tilde{H}}_2\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}} = -\frac{1}{8}\left\langle n_1+n_1s, k_1+k_1s, m_1\right|\left(\hat{M}_1+\hat{M}_1^+ +\hat{N}_1+\hat{M}_2+\hat{M}_2^+ +\hat{N}_2+2\right)\left|n_1,k_1,m_1\right\rangle$$
$$*\left\langle n_2+n_2s, k_2+k_2s, m_2\right|\left(\hat{M}_3+\hat{M}_3^+-\hat{N}_3+\hat{M}_4+\hat{M}_4^+-\hat{N}_4-2\right)\left|n_2,k_2,m_2\right\rangle, \tag{30}$$

$$\left(\hat{\tilde{H}}_3\right)_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}^{m_1,m_2} = -\frac{Z}{\omega}\left\langle n_1+n_1s,k_1+k_1s,m_1\left|\left(\hat{M}_1+\hat{M}_1^{+}+\hat{N}_1+\hat{M}_2+\hat{M}_2^{+}+\hat{N}_2+2\right)\right|n_1,k_1,m_1\right\rangle$$
$$*\,\delta_{n_2+n_2s,n_2}\delta_{k_2+k_2s,k_2}, \tag{31}$$

$$\left(\hat{\tilde{H}}_4\right)_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}^{m_1,m_2} = -\frac{Z}{\omega}\left\langle n_2+n_2s,k_2+k_2s,m_2\left|\left(\hat{M}_3+\hat{M}_3^{+}+\hat{N}_3+\hat{M}_4+\hat{M}_4^{+}+\hat{N}_4+2\right)\right|n_2,k_2,m_2\right\rangle$$
$$*\,\delta_{n_1+n_1s,n_1}\delta_{k_1+k_1s,k_1}, \tag{32}$$

$$\left(\hat{\tilde{H}}_5\right)_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}^{m_1,m_2} = -\frac{E}{\omega^2}\left\langle n_1+n_1s,k_1+k_1s,m_1\left|\left(\hat{M}_1+\hat{M}_1^{+}+\hat{N}_1+\hat{M}_2+\hat{M}_2^{+}+\hat{N}_2+2\right)\right|n_1,k_1,m_1\right\rangle$$
$$*\left\langle n_2+n_2s,k_2+k_2s,m_2\left|\left(\hat{M}_3+\hat{M}_3^{+}+\hat{N}_3+\hat{M}_4+\hat{M}_4^{+}+\hat{N}_4+2\right)\right|n_2,k_2,m_2\right\rangle, \tag{33}$$

$$\left(\hat{\tilde{H}}_6\right)_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}^{m_1,m_2} = \frac{1}{(2\pi)^3\omega^2}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dt_1dt_2dt_3}{\sqrt{t_1^2+t_2^2+t_3^2}}$$
$$*\left\langle n_1+n_1s,k_1+k_1s,m_1\left|\left(\hat{M}_1+\hat{M}_1^{+}+\hat{N}_1+\hat{M}_2+\hat{M}_2^{+}+\hat{N}_2+2\right)\hat{S}_1\right|n_1,k_1,m_1\right\rangle \tag{34}$$
$$*\left\langle n_2+n_2s,k_2+k_2s,m_2\left|\left(\hat{M}_3+\hat{M}_3^{+}+\hat{N}_3+\hat{M}_4+\hat{M}_4^{+}+\hat{N}_4+2\right)\hat{S}_2\right|n_2,k_2,m_2\right\rangle.$$

Yếu tố ma trận của các thành phần $\hat{\tilde{H}}_3$, $\hat{\tilde{H}}_4$ có 5 số hạng khác 0, yếu tố ma trận của các thành phần $\hat{\tilde{H}}_1$, $\hat{\tilde{H}}_2$, $\hat{\tilde{H}}_5$ có 25 số hạng khác 0. Dạng tường minh của các yếu tố ma trận thành phần nêu trên được trình bày trong phần phụ lục. Yếu tố ma trận của thành phần $\hat{\tilde{H}}_6$ là tổng của 25 số hạng được viết dưới dạng tổng quát như sau:

$$\left(\hat{\tilde{H}}_6\right)_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}^{m_1,m_2} = \left(\hat{\tilde{H}}_{6,1}\right)_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}^{m_1,m_2} + \left(\hat{\tilde{H}}_{6,2}\right)_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}^{m_1,m_2} + \left(\hat{\tilde{H}}_{6,3}\right)_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}^{m_1,m_2} + \left(\hat{\tilde{H}}_{6,4}\right)_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}^{m_1,m_2} + \left(\hat{\tilde{H}}_{6,5}\right)_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}^{m_1,m_2}$$
$$+ \left(\hat{\tilde{H}}_{6,6}\right)_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}^{m_1,m_2} + \left(\hat{\tilde{H}}_{6,7}\right)_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}^{m_1,m_2} + \left(\hat{\tilde{H}}_{6,8}\right)_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}^{m_1,m_2} + \left(\hat{\tilde{H}}_{6,9}\right)_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}^{m_1,m_2} + \left(\hat{\tilde{H}}_{6,10}\right)_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}^{m_1,m_2}$$
$$+ \left(\hat{\tilde{H}}_{6,11}\right)_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}^{m_1,m_2} + \left(\hat{\tilde{H}}_{6,12}\right)_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}^{m_1,m_2} + \left(\hat{\tilde{H}}_{6,13}\right)_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}^{m_1,m_2} + \left(\hat{\tilde{H}}_{6,14}\right)_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}^{m_1,m_2} + \left(\hat{\tilde{H}}_{6,15}\right)_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}^{m_1,m_2} \tag{35}$$
$$+ \left(\hat{\tilde{H}}_{6,16}\right)_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}^{m_1,m_2} + \left(\hat{\tilde{H}}_{6,17}\right)_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}^{m_1,m_2} + \left(\hat{\tilde{H}}_{6,18}\right)_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}^{m_1,m_2} + \left(\hat{\tilde{H}}_{6,19}\right)_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}^{m_1,m_2} + \left(\hat{\tilde{H}}_{6,20}\right)_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}^{m_1,m_2}$$
$$+ \left(\hat{\tilde{H}}_{6,21}\right)_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}^{m_1,m_2} + \left(\hat{\tilde{H}}_{6,22}\right)_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}^{m_1,m_2} + \left(\hat{\tilde{H}}_{6,23}\right)_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}^{m_1,m_2} + \left(\hat{\tilde{H}}_{6,24}\right)_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}^{m_1,m_2} + \left(\hat{\tilde{H}}_{6,25}\right)_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}^{m_1,m_2},$$

Dạng tường minh của 25 số hạng của biểu thức (35) được trình bày chi tiết trong phần phụ lục.

Để tìm nghiệm số chính xác của bài toán đang xét, chúng tôi sử dụng các yếu tố ma trận [28] giải trực tiếp hệ phương trình tuyến tính bằng gói LAPACK của thư viện Intel® Math Kernel. Kết quả tính số sẽ được công bố trong thời gian tới.

5. Kết luận

Trong công trình này, chúng tôi đã xây dựng các biểu thức tính các yếu tố ma trận cho bài toán nguyên tử heli theo phương pháp toán tử FK. Bộ hàm cơ sở được sử dụng vừa là hàm sóng của hệ hai dao động tử điều hòa bốn chiều, vừa mang đặc điểm vật lí của hàm sóng nguyên tử heli thuận tiện cho việc tính toán. Các kĩ thuật tính toán được trình bày trong công trình này có thể phát triển cho các bài toán phức tạp hơn, như nguyên tử heli trong từ trường. Nghiên cứu này có ý nghĩa trong việc lập trình tìm nghiệm số chính xác của bài toán đang xét, sẽ được trình bày trong công trình tiếp theo.

❖ ***Tuyên bố về quyền lợi:*** *Các tác giả xác nhận hoàn toàn không có xung đột về quyền lợi.*

❖ ***Lời cảm ơn:*** *Các tác giả cảm ơn GS. TSKH. Lê Văn Hoàng trong việc đặt vấn đề nghiên cứu và hướng dẫn thực hiện công trình này.*

TÀI LIỆU THAM KHẢO

[1] L. B. Zhao, O. Zatsarinny and K. Bartschat, "Continuous spectra of atomic hydrogen in a strong magnetic field," *Phys. Rev. A 94*, p. 033422, 2016.

[2] A. Thirumalai and J. S. Heyl, "Hydrogen and helium atom in strong magnetic fields," *Phys. Rev., A 79*, 012514, 2009.

[3] D. I. Feranchuk, A. Ivanov, Le Van Hoang and A. Ulyanhenkov, *Non Perturbative Description of Quantum Systems*. Springer – Switzerland, 2015.

[4] Hoang Do Ngoc Tram, Pham Dang Lan and Le Van Hoang, "Exact numerical solutions of the Schrödinger equation for a two-dimensional exciton in a homogeneous magnetic field of arbitrary strength," *Physica, B 423*, pp. 31-37, 2013.

[5] Cao Hồ Thanh Xuân, Lý Duy Nhất, Hoàng Đỗ Ngọc Trầm, "Năng lượng trạng thái cơ bản của nguyên tử hydro trong từ trường đều có cường độ bất kì," *Tạp chí Khoa học Trường Đại học Sư phạm Thành phố Hồ Chí Minh, 12*(90), tr. 39-51, 2016.

[6] Cao Hồ Thanh Xuân, Lý Duy Nhất, Hoàng Đỗ Ngọc Trầm, "Phương pháp đại số cho nguyên tử heli," *Tạp chí Khoa học Trường Đại học Sư phạm Thành phố Hồ Chí Minh, 15*(9), 2018.

PHỤ LỤC
DẠNG TƯỜNG MINH CỦA CÁC YẾU TỐ MA TRẬN THÀNH PHẦN

P1. Yếu tố ma trận của $\hat{\hat{H}}_1$**:**

$$\left(\hat{\hat{H}}_1\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\ k_1+k_1s,k_1\\ n_2+n_2s,n_2\\ k_2+k_2s,k_2}}=-\frac{1}{8}\Big[\sqrt{(n_1-k_1)(n_1-m_1-k_1)}\,\delta_{n_1+n_1s-k_1-k_1s,\,n_1-k_1-1}\,\delta_{k_1+k_1s,k_1}$$
$$+\sqrt{(n_1-k_1+1)(n_1-m_1-k_1+1)}\,\delta_{n_1+n_1s-k_1-k_1s,\,n_1-k_1+1}\,\delta_{k_1+k_1s,k_1}+\sqrt{k_1(k_1+m_1)}\,\delta_{n_1+n_1s-k_1-k_1s,\,n_1-k_1}\,\delta_{k_1+k_1s,k_1-1}$$
$$+\sqrt{(k_1+1)(k_1+m_1+1)}\,\delta_{n_1+n_1s-k_1-k_1s,\,n_1-k_1}\,\delta_{k_1+k_1s,k_1+1}-2(n_1+1)\,\delta_{n_1+n_1s-k_1-k_1s,\,n_1-k_1}\,\delta_{k_1+k_1s,k_1}\Big]$$
$$*\Big[\sqrt{(n_2-k_2)(n_2-m_2-k_2)}\,\delta_{n_2+n_2s-k_2-k_2s,\,n_2-k_2-1}\,\delta_{k_2+k_2s,k_2}$$
$$+\sqrt{(n_2-k_2+1)(n_2-m_2-k_2+1)}\,\delta_{n_2+n_2s-k_2-k_2s,\,n_2-k_2+1}\,\delta_{k_2+k_2s,k_2}+\sqrt{k_2(k_2+m_2)}\,\delta_{n_2+n_2s-k_2-k_2s,\,n_2-k_2}\,\delta_{k_2+k_2s,k_2-1}$$
$$+\sqrt{(k_2+1)(k_2+m_2+1)}\,\delta_{n_2+n_2s-k_2-k_2s,\,n_2-k_2}\,\delta_{k_2+k_2s,k_2+1}+2(n_2+1)\,\delta_{n_2+n_2s-k_2-k_2s,\,n_2-k_2}\,\delta_{k_2+k_2s,k_2}\Big].$$

P2. Yếu tố ma trận của $\hat{\hat{H}}_2$**:**

$$\left(\hat{\hat{H}}_2\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\ k_1+k_1s,k_1\\ n_2+n_2s,n_2\\ k_2+k_2s,k_2}}=-\frac{1}{8}\Big[\sqrt{(n_1-k_1)(n_1-m_1-k_1)}\,\delta_{n_1+n_1s-k_1-k_1s,\,n_1-k_1-1}\,\delta_{k_1+k_1s,k_1}$$
$$+\sqrt{(n_1-k_1+1)(n_1-m_1-k_1+1)}\,\delta_{n_1+n_1s-k_1-k_1s,\,n_1-k_1+1}\,\delta_{k_1+k_1s,k_1}+\sqrt{k_1(k_1+m_1)}\,\delta_{n_1+n_1s-k_1-k_1s,\,n_1-k_1}\,\delta_{k_1+k_1s,k_1-1}$$
$$+\sqrt{(k_1+1)(k_1+m_1+1)}\,\delta_{n_1+n_1s-k_1-k_1s,\,n_1-k_1}\,\delta_{k_1+k_1s,k_1+1}+2(n_1+1)\,\delta_{n_1+n_1s-k_1-k_1s,\,n_1-k_1}\,\delta_{k_1+k_1s,k_1}\Big]$$
$$*\Big[\sqrt{(n_2-k_2)(n_2-m_2-k_2)}\,\delta_{n_2+n_2s-k_2-k_2s,\,n_2-k_2-1}\,\delta_{k_2+k_2s,k_2}$$
$$+\sqrt{(n_2-k_2+1)(n_2-m_2-k_2+1)}\,\delta_{n_2+n_2s-k_2-k_2s,\,n_2-k_2+1}\,\delta_{k_2+k_2s,k_2}+\sqrt{k_2(k_2+m_2)}\,\delta_{n_2+n_2s-k_2-k_2s,\,n_2-k_2}\,\delta_{k_2+k_2s,k_2-1}$$
$$+\sqrt{(k_2+1)(k_2+m_2+1)}\,\delta_{n_2+n_2s-k_2-k_2s,\,n_2-k_2}\,\delta_{k_2+k_2s,k_2+1}-2(n_2+1)\,\delta_{n_2+n_2s-k_2-k_2s,\,n_2-k_2}\,\delta_{k_2+k_2s,k_2}\Big].$$

P3. Yếu tố ma trận của $\hat{\hat{H}}_3$**:**

$$\left(\hat{\hat{H}}_3\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\ k_1+k_1s,k_1\\ n_2+n_2s,n_2\\ k_2+k_2s,k_2}}=-\frac{Z}{\omega}\Big[\sqrt{(n_1-k_1)(n_1-m_1-k_1)}\,\delta_{n_1+n_1s-k_1-k_1s,\,n_1-k_1-1}\,\delta_{k_1+k_1s,k_1}$$
$$+\sqrt{(n_1-k_1+1)(n_1-m_1-k_1+1)}\,\delta_{n_1+n_1s-k_1-k_1s,\,n_1-k_1+1}\,\delta_{k_1+k_1s,k_1}+\sqrt{k_1(k_1+m_1)}\,\delta_{n_1+n_1s-k_1-k_1s,\,n_1-k_1}\,\delta_{k_1+k_1s,k_1-1}$$
$$+\sqrt{(k_1+1)(k_1+m_1+1)}\,\delta_{n_1+n_1s-k_1-k_1s,\,n_1-k_1}\,\delta_{k_1+k_1s,k_1+1}+2(n_1+1)\,\delta_{n_1+n_1s-k_1-k_1s,\,n_1-k_1}\,\delta_{k_1+k_1s,k_1}\Big]\delta_{n_2+n_2s,n_2}\,\delta_{k_2+k_2s,k_2}.$$

P4. Yếu tố ma trận của $\hat{\hat{H}}_4$**:**

$$\left(\hat{\hat{H}}_4\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\ k_1+k_1s,k_1\\ n_2+n_2s,n_2\\ k_2+k_2s,k_2}}=-\frac{Z}{\omega}\delta_{n_1+n_1s,n_1}\,\delta_{k_1+k_1s,k_1}\Big[\sqrt{(n_2-k_2)(n_2-m_2-k_2)}\,\delta_{n_2+n_2s-k_2-k_2s,\,n_2-k_2-1}\,\delta_{k_2+k_2s,k_2}$$
$$+\sqrt{(n_2-k_2+1)(n_2-m_2-k_2+1)}\,\delta_{n_2+n_2s-k_2-k_2s,\,n_2-k_2+1}\,\delta_{k_2+k_2s,k_2}+\sqrt{k_2(k_2+m_2)}\,\delta_{n_2+n_2s-k_2-k_2s,\,n_2-k_2}\,\delta_{k_2+k_2s,k_2-1}$$
$$+\sqrt{(k_2+1)(k_2+m_2+1)}\,\delta_{n_2+n_2s-k_2-k_2s,\,n_2-k_2}\,\delta_{k_2+k_2s,k_2+1}+2(n_2+1)\,\delta_{n_2+n_2s-k_2-k_2s,\,n_2-k_2}\,\delta_{k_2+k_2s,k_2}\Big].$$

P5. Yếu tố ma trận của $\hat{\tilde{H}}_5$:

$$\left(\hat{\tilde{H}}_5\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}=-\frac{E}{\omega^2}\Big[\sqrt{(n_1-k_1)(n_1-m_1-k_1)}\,\delta_{n_1+n_1s-k_1-k_1s,\,n_1-k_1-1}\,\delta_{k_1+k_1s,k_1}$$
$$+\sqrt{(n_1-k_1+1)(n_1-m_1-k_1+1)}\,\delta_{n_1+n_1s-k_1-k_1s,\,n_1-k_1+1}\,\delta_{k_1+k_1s,k_1}+\sqrt{k_1(k_1+m_1)}\,\delta_{n_1+n_1s-k_1-k_1s,\,n_1-k_1}\,\delta_{k_1+k_1s,k_1-1}$$
$$+\sqrt{(k_1+1)(k_1+m_1+1)}\,\delta_{n_1+n_1s-k_1-k_1s,\,n_1-k_1}\,\delta_{k_1+k_1s,k_1+1}+2(n_1+1)\,\delta_{n_1+n_1s-k_1-k_1s,\,n_1-k_1}\,\delta_{k_1+k_1s,k_1}\Big]$$
$$*\Big[\sqrt{(n_2-k_2)(n_2-m_2-k_2)}\,\delta_{n_2+n_2s-k_2-k_2s,\,n_2-k_2-1}\,\delta_{k_2+k_2s,k_2}$$
$$+\sqrt{(n_2-k_2+1)(n_2-m_2-k_2+1)}\,\delta_{n_2+n_2s-k_2-k_2s,\,n_2-k_2+1}\,\delta_{k_2+k_2s,k_2}+\sqrt{k_2(k_2+m_2)}\,\delta_{n_2+n_2s-k_2-k_2s,\,n_2-k_2}\,\delta_{k_2+k_2s,k_2-1}$$
$$+\sqrt{(k_2+1)(k_2+m_2+1)}\,\delta_{n_2+n_2s-k_2-k_2s,\,n_2-k_2}\,\delta_{k_2+k_2s,k_2+1}+2(n_2+1)\,\delta_{n_2+n_2s-k_2-k_2s,\,n_2-k_2}\,\delta_{k_2+k_2s,k_2}\Big].$$

P6. Yếu tố ma trận của $\hat{\tilde{H}}_6$:

$$\left(\hat{\tilde{H}}_{6,1}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}=4(n_1+n_1s+1)(n_2+n_2s+1)\left(\hat{S}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}},$$

$$\left(\hat{\tilde{H}}_{6,2}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}=2(n_1+n_1s+1)\sqrt{(n_2+n_2s-k_2-k_2s+1)(n_2+n_2s-m_2-k_2-k_2s+1)}\left(\hat{S}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s+1,n_2\\k_2+k_2s,k_2}},$$

$$\left(\hat{\tilde{H}}_{6,3}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}=2(n_1+n_1s+1)\sqrt{(n_2+n_2s-k_2-k_2s)(n_2+n_2s-m_2-k_2-k_2s)}\left(\hat{S}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s-1,n_2\\k_2+k_2s,k_2}},$$

$$\left(\hat{\tilde{H}}_{6,4}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}=2(n_1+n_1s+1)\sqrt{(k_2+k_2s+1)(k_2+k_2s+m_2+1)}\left(\hat{S}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s+1,k_2}},$$

$$\left(\hat{\tilde{H}}_{6,5}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}=2(n_1+n_1s+1)\sqrt{(k_2+k_2s)(k_2+k_2s+m_2)}\left(\hat{S}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s-1,k_2}},$$

$$\left(\hat{\tilde{H}}_{6,6}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}=2\sqrt{(n_1+n_1s-k_1-k_1s+1)(n_1+n_1s-m_1-k_1-k_1s+1)}\,(n_2+n_2s+1)\left(\hat{S}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s+1,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}},$$

$$\left(\hat{\tilde{H}}_{6,7}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}}=\sqrt{(n_1+n_1s-k_1-k_1s+1)(n_1+n_1s-m_1-k_1-k_1s+1)}$$
$$*\sqrt{(n_2+n_2s-k_2-k_2s+1)(n_2+n_2s-m_2-k_2-k_2s+1)}\left(\hat{S}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s+1,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s+1,n_2\\k_2+k_2s,k_2}},$$

$$\left(\hat{\hat{H}}_{6,8}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\ k_1+k_1s,k_1\\ n_2+n_2s,n_2\\ k_2+k_2s,k_2}} = \sqrt{\left(n_1+n_1s-k_1-k_1s+1\right)\left(n_1+n_1s-m_1-k_1-k_1s+1\right)}$$

$$*\sqrt{\left(n_2+n_2s-k_2-k_2s\right)\left(n_2+n_2s-m_2-k_2-k_2s\right)}\left(\hat{S}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s+1,n_1\\ k_1+k_1s,k_1\\ n_2+n_2s-1,n_2\\ k_2+k_2s,k_2}},$$

$$\left(\hat{\hat{H}}_{6,9}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\ k_1+k_1s,k_1\\ n_2+n_2s,n_2\\ k_2+k_2s,k_2}} = \sqrt{\left(n_1+n_1s-k_1-k_1s+1\right)\left(n_1+n_1s-m_1-k_1-k_1s+1\right)}$$

$$*\sqrt{\left(k_2+k_2s+1\right)\left(k_2+k_2s+m_2+1\right)}\left(\hat{S}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s+1,n_1\\ k_1+k_1s,k_1\\ n_2+n_2s,n_2\\ k_2+k_2s+1,k_2}},$$

$$\left(\hat{\hat{H}}_{6,10}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\ k_1+k_1s,k_1\\ n_2+n_2s,n_2\\ k_2+k_2s,k_2}} = \sqrt{\left(n_1+n_1s-k_1-k_1s+1\right)\left(n_1+n_1s-m_1-k_1-k_1s+1\right)}$$

$$*\sqrt{\left(k_2+k_2s\right)\left(k_2+k_2s+m_2\right)}\left(\hat{S}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s+1,n_1\\ k_1+k_1s,k_1\\ n_2+n_2s,n_2\\ k_2+k_2s-1,k_2}},$$

$$\left(\hat{\hat{H}}_{6,11}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\ k_1+k_1s,k_1\\ n_2+n_2s,n_2\\ k_2+k_2s,k_2}} = 2\sqrt{\left(n_1+n_1s-k_1-k_1s\right)\left(n_1+n_1s-m_1-k_1-k_1s\right)}\left(n_2+n_2s+1\right)\left(\hat{S}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s-1,n_1\\ k_1+k_1s,k_1\\ n_2+n_2s,n_2\\ k_2+k_2s,k_2}},$$

$$\left(\hat{\hat{H}}_{6,12}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\ k_1+k_1s,k_1\\ n_2+n_2s,n_2\\ k_2+k_2s,k_2}} = \sqrt{\left(n_1+n_1s-k_1-k_1s\right)\left(n_1+n_1s-m_1-k_1-k_1s\right)}$$

$$*\sqrt{\left(n_2+n_2s-k_2-k_2s+1\right)\left(n_2+n_2s-m_2-k_2-k_2s+1\right)}\left(\hat{S}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s-1,n_1\\ k_1+k_1s,k_1\\ n_2+n_2s+1,n_2\\ k_2+k_2s,k_2}},$$

$$\left(\hat{\hat{H}}_{6,13}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\ k_1+k_1s,k_1\\ n_2+n_2s,n_2\\ k_2+k_2s,k_2}} = \sqrt{\left(n_1+n_1s-k_1-k_1s\right)\left(n_1+n_1s-m_1-k_1-k_1s\right)}$$

$$*\sqrt{\left(n_2+n_2s-k_2-k_2s\right)\left(n_2+n_2s-m_2-k_2-k_2s\right)}\left(\hat{S}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s-1,n_1\\ k_1+k_1s,k_1\\ n_2+n_2s-1,n_2\\ k_2+k_2s,k_2}},$$

$$\left(\hat{\hat{H}}_{6,14}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\ k_1+k_1s,k_1\\ n_2+n_2s,n_2\\ k_2+k_2s,k_2}} = \sqrt{\left(n_1+n_1s-k_1-k_1s\right)\left(n_1+n_1s-m_1-k_1-k_1s\right)}$$

$$*\sqrt{\left(k_2+k_2s+1\right)\left(k_2+k_2s+m_2+1\right)}\left(\hat{S}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s-1,n_1\\ k_1+k_1s,k_1\\ n_2+n_2s,n_2\\ k_2+k_2s+1,k_2}},$$

$$\left(\hat{\hat{H}}_{6,15}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}} = \sqrt{\left(n_1+n_1s-k_1-k_1s\right)\left(n_1+n_1s-m_1-k_1-k_1s\right)}$$

$$*\sqrt{\left(k_2+k_2s\right)\left(k_2+k_2s+m_2\right)}\left(\hat{S}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s-1,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s-1,k_2}},$$

$$\left(\hat{\hat{H}}_{6,16}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}} = 2\sqrt{\left(k_1+k_1s+1\right)\left(k_1+k_1s+m_1+1\right)}\left(n_2+n_2s+1\right)\left(\hat{S}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s+1,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}},$$

$$\left(\hat{\hat{H}}_{6,17}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}} = \sqrt{\left(k_1+k_1s+1\right)\left(k_1+k_1s+m_1+1\right)}$$

$$*\sqrt{\left(n_2+n_2s-k_2-k_2s+1\right)\left(n_2+n_2s-m_2-k_2-k_2s+1\right)}\left(\hat{S}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s+1,k_1\\n_2+n_2s+1,n_2\\k_2+k_2s,k_2}},$$

$$\left(\hat{\hat{H}}_{6,18}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}} = \sqrt{\left(k_1+k_1s+1\right)\left(k_1+k_1s+m_1+1\right)}$$

$$*\sqrt{\left(n_2+n_2s-k_2-k_2s\right)\left(n_2+n_2s-m_2-k_2-k_2s\right)}\left(\hat{S}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s+1,k_1\\n_2+n_2s-1,n_2\\k_2+k_2s,k_2}},$$

$$\left(\hat{\hat{H}}_{6,19}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}} = \sqrt{\left(k_1+k_1s+1\right)\left(k_1+k_1s+m_1+1\right)}\sqrt{\left(k_2+k_2s+1\right)\left(k_2+k_2s+m_2+1\right)}\left(\hat{S}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s+1,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s+1,k_2}},$$

$$\left(\hat{\hat{H}}_{6,20}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}} = \sqrt{\left(k_1+k_1s+1\right)\left(k_1+k_1s+m_1+1\right)}\sqrt{\left(k_2+k_2s\right)\left(k_2+k_2s+m_2\right)}\left(\hat{S}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s+1,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s-1,k_2}},$$

$$\left(\hat{\hat{H}}_{6,21}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}} = 2\sqrt{\left(k_1+k_1s\right)\left(k_1+k_1s+m_1\right)}\left(n_2+n_2s+1\right)\left(\hat{S}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s-1,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}},$$

$$\left(\hat{\hat{H}}_{6,22}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}} = \sqrt{\left(k_1+k_1s\right)\left(k_1+k_1s+m_1\right)}$$

$$*\sqrt{\left(n_2+n_2s-k_2-k_2s+1\right)\left(n_2+n_2s-m_2-k_2-k_2s+1\right)}\left(\hat{S}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s-1,k_1\\n_2+n_2s+1,n_2\\k_2+k_2s,k_2}},$$

$$\left(\hat{\hat{H}}_{6,23}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}} = \sqrt{\left(k_1+k_1s\right)\left(k_1+k_1s+m_1\right)}$$

$$*\sqrt{\left(n_2+n_2s-k_2-k_2s\right)\left(n_2+n_2s-m_2-k_2-k_2s\right)}\left(\hat{S}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s-1,k_1\\n_2+n_2s-1,n_2\\k_2+k_2s,k_2}},$$

$$\left(\hat{\hat{H}}_{6,24}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}} = \sqrt{\left(k_1+k_1s\right)\left(k_1+k_1s+m_1\right)}\sqrt{\left(k_2+k_2s+1\right)\left(k_2+k_2s+m_2+1\right)}\left(\hat{S}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s-1,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s+1,k_2}},$$

$$\left(\hat{\hat{H}}_{6,25}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}} = \sqrt{\left(k_1+k_1s\right)\left(k_1+k_1s+m_1\right)}\sqrt{\left(k_2+k_2s\right)\left(k_2+k_2s+m_2\right)}\left(\hat{S}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s-1,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s-1,k_2}},$$

trong đó:

$$\left(\hat{S}\right)^{m_1,m_2}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1\\n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}} = \frac{1}{\left(2\pi\right)^{3/2}\omega^2}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dt_1dt_2dt_3}{\sqrt{t_1^2+t_2^2+t_3^2}}\left(\hat{S}_1\right)^{m_1}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1}}\left(\hat{S}_2\right)^{m_2}_{\substack{n_2+n_2s,n_2\\k_2+k_2s,k_2}},$$

$$\left(\hat{S}_1\right)^{m_1}_{\substack{n_1+n_1s,n_1\\k_1+k_1s,k_1}} = \sum_{j_1=0}^{\min\begin{bmatrix}n_1+n_1s-k_1-k_1s\\k_1+k_1s+m_1\end{bmatrix}}\ \sum_{j_3=0}^{\min\begin{bmatrix}n_1+n_1s-k_1-k_1s-j_1\\n_1-m_1-k_1-k_1s+j_1+j_3+j_4-j_5-j_6-j_7-j_8\end{bmatrix}}\ \sum_{j_4=0}^{\min\begin{bmatrix}k_1+k_1s-n_1s+j_1+j_3+j_4-j_5-j_6-j_7-j_8\\k_1+k_1s+m_1-j_1\end{bmatrix}}$$

$$\times\sum_{j_5=0}^{\min\begin{bmatrix}k_1-j_7\\k_1+m_1-j_8\end{bmatrix}}\ \sum_{j_6=0}^{\min\begin{bmatrix}n_1-k_1-j_8\\n_1-m_1-k_1-j_7\end{bmatrix}}\ \sum_{j_7=0}^{\min\begin{bmatrix}n_1-m_1-k_1\\k_1\end{bmatrix}}\ \sum_{j_8=0}^{\min\begin{bmatrix}n_1-k_1\\k_1+m_1\\-n_1s+j_1+j_3+j_4-j_5-j_6-j_7\end{bmatrix}}\ \sum_{l_1=0}^{j_3}\sum_{l_2=0}^{j_4}\sum_{l_3=0}^{j_5}\sum_{l_4=0}^{j_6}C_{l_1}^{j_3}C_{l_2}^{j_4}C_{l_3}^{j_5}C_{l_4}^{j_6}$$

$$\times\sum_{p_1=\max\begin{bmatrix}0\\-n_1s+k_1s+j_1+j_3-j_6-j_8\\-n_1-n_1s+k_1+k_1s+j_1+j_3\end{bmatrix}}^{-n_1s+k_1+k_1s+j_1+j_3-j_5-j_6-j_7-j_8}\ \sum_{p_3=\max\begin{bmatrix}0\\k_1s-j_1-j_4+j_5+j_8\\-k_1-m_1+j_5+j_8\end{bmatrix}}^{n_1-m_1-k_1-j_6-j_7}\left(it_1+t_2\right)^{n_1s-k_1s-j_3+j_6+j_7+j_8+p_1+p_3}$$

$$\times\left(it_1-t_2\right)^{n_1s-k_1s-j_3+j_6+j_7+j_8+p_1+p_3}\left(1+it_3\right)^{n_1+n_1s-2k_1-k_1s-j_1+j_5+j_6+j_7-l_1-l_4}\left(1-it_3\right)^{-n_1+2m_1+2k_1+k_1s-j_1+j_5+j_6+j_7-l_2-l_3}$$

$$\times\left(\frac{1}{1+t_1^2+t_2^2+t_3^2}\right)^{n_1+2n_1s-k_1s+m_1-j_1-j_3+j_5+2j_6+2j_7+j_8-l_1-l_2-l_3-l_4+p_1+p_3+1}$$

$$\times\sqrt{C_{j_1}^{n_1+n_1s-k_1-k_1s}C_{n_1s-j_1-j_3-j_4+j_5+j_6+j_7+j_8}^{n_1+n_1s-m_1-k_1-k_1s}}\sqrt{C_{n_1s-j_1-j_3-j_4+j_5+j_6+j_7+j_8}^{k_1+k_1s}C_{j_1}^{k_1+k_1s+m_1}}$$

$$\times\sqrt{C_{j_8}^{n_1-k_1}C_{j_7}^{n_1-m_1-k_1}C_{j_7}^{k_1}C_{j_8}^{k_1+m_1}}\sqrt{C_{j_3}^{n_1+n_1s-k_1-k_1s-j_1}C_{j_3}^{n_1-m_1-k_1-k_1s+j_1+j_3+j_4-j_5-j_6-j_7-j_8}}$$

$$\times\sqrt{C_{j_4}^{-n_1s+k_1+k_1s+j_1+j_3+j_4-j_5-j_6-j_7-j_8}C_{j_4}^{k_1+k_1s+m_1-j_1}}\sqrt{C_{j_6}^{n_1-k_1-j_8}C_{j_6}^{n_1-m_1-k_1-j_7}C_{j_5}^{k_1-j_7}C_{j_5}^{k_1+m_1-j_8}}$$

$$\times\sqrt{C_{p_1}^{n_1+n_1s-k_1-k_1s-j_1-j_3+p_1}C_{-k_1s+j_1+j_4-j_5-j_8+p_3}^{n_1-m_1-k_1-k_1s+j_1+j_4-j_5-j_6-j_7-j_8}}\sqrt{C_{p_1}^{-n_1s+k_1+k_1s+j_1+j_3-j_5-j_6-j_7-j_8}C_{-k_1s+j_1+j_4-j_5-j_8+p_3}^{k_1+m_1-j_5-j_8+p_3}}$$

$$\times\sqrt{C_{n_1s-k_1s-j_1-j_3+j_6+j_8+p_1}^{n_1+n_1s-k_1-k_1s-j_1-j_3+p_1}C_{p_3}^{n_1-m_1-k_1-j_6-j_7}}\sqrt{C_{n_1s-k_1s-j_1-j_3+j_6+j_8+p_1}^{k_1-j_5-j_7}C_{p_3}^{k_1+m_1-j_5-j_8+p_3}},$$

$$
\begin{aligned}
\left(\hat{S}_2\right)^{m_2}_{\substack{n_2+n_2s,n_2\\ k_2+k_2s,k_2}} = & \sum_{j_9=0}^{\min\begin{bmatrix} n_2+n_2s-k_2-k_2s \\ k_2+k_2s+m_2 \end{bmatrix}} \sum_{j_{11}=0}^{\min\begin{bmatrix} n_2+n_2s-k_2-k_2s-j_9 \\ n_2-m_2-k_2-k_2s+j_9+j_{11}+j_{12}-j_{13}-j_{14}-j_{15}-j_{16} \end{bmatrix}} \sum_{j_{12}=0}^{\min\begin{bmatrix} -n_2s+k_2+k_2s+j_9+j_{11}+j_{12}-j_{13}-j_{14}-j_{15}-j_{16} \\ k_2+k_2s+m_2-j_9 \end{bmatrix}} \\
& \times \sum_{j_{13}=0}^{\min\begin{bmatrix} k_2-j_{15} \\ k_2+m_2-j_{16} \end{bmatrix}} \sum_{j_{14}=0}^{\min\begin{bmatrix} n_2-k_2-j_{16} \\ n_2-m_2-k_2-j_{15} \end{bmatrix}} \sum_{j_{15}=0}^{\min\begin{bmatrix} n_2-m_2-k_2 \\ k_2 \end{bmatrix}} \sum_{j_{16}=0}^{\min\begin{bmatrix} n_2-k_2 \\ k_2+m_2 \\ -n_2s+j_9+j_{11}+j_{12}-j_{13}-j_{14}-j_{15} \end{bmatrix}} \sum_{l_5=0}^{j_{11}} \sum_{l_6=0}^{j_{12}} \sum_{l_7=0}^{j_{13}} \sum_{l_8=0}^{j_{14}} C^{j_{11}}_{l_5} C^{j_{12}}_{l_6} C^{j_{13}}_{l_7} C^{j_{14}}_{l_8} \\
& \times \sum_{p_5=\max\begin{bmatrix} 0 \\ n_2s-k_2s-j_9-j_{11}+j_{14}+j_{16} \\ n_2s-k_2-k_2s-j_9-j_{11}+j_{13}+j_{14}+j_{15}+j_{16} \end{bmatrix}}^{n_2+n_2s-k_2-k_2s-j_9-j_{11}} \sum_{p_7=\begin{bmatrix} 0 \\ -k_2s+j_9+j_{12}-j_{13}-j_{16} \\ -n_2+m_2+k_2+j_{14}+j_{15} \end{bmatrix}}^{k_2+m_2-j_{13}-j_{16}} \left(it_1+t_2\right)^{k_2s-j_{12}+j_{13}+j_{15}+j_{16}+p_5+p_7} \\
& \times \left(it_1-t_2\right)^{k_2s-j_{12}+j_{13}+j_{15}+j_{16}+p_5+p_7} \left(1+it_3\right)^{-n_2-n_2s+2k_2+k_2s+j_9+j_{11}+j_{12}-j_{15}-l_6-l_7} \\
& \times \left(1-it_3\right)^{n_2-2k_2-k_2s-2m_2+j_9+j_{11}+j_{12}-j_{15}-l_5-l_8} \left(\frac{1}{1+t_1^2+t_2^2+t_3^2}\right)^{n_2+k_2s-m_2+j_9+j_{11}+j_{13}+j_{16}-l_5-l_6-l_7-l_8+p_5+p_7+1} \\
& \times \sqrt{C^{n_2+n_2s-k_2-k_2s}_{j_9} C^{n_2+n_2s-m_2-k_2-k_2s}_{n_2s-j_9-j_{11}-j_{12}+j_{13}+j_{14}+j_{15}+j_{16}}} \sqrt{C^{k_2+k_2s}_{n_2s-j_9-j_{11}-j_{12}+j_{13}+j_{14}+j_{15}+j_{16}} C^{k_2+k_2s+m_2}_{j_9}} \\
& \times \sqrt{C^{n_2-k_2}_{j_{16}} C^{n_2-m_2-k_2}_{j_{15}} C^{k_2}_{j_{15}} C^{k_2+m_2}_{j_{16}}} \sqrt{C^{n_2+n_2s-k_2-k_2s-j_9}_{j_{11}} C^{n_2-m_2-k_2-k_2s+j_9+j_{11}+j_{12}-j_{13}-j_{14}-j_{15}-j_{16}}_{j_{11}}} \\
& \times \sqrt{C^{-n_2s+k_2+k_2s+j_9+j_{11}+j_{12}-j_{13}-j_{14}-j_{15}-j_{16}}_{j_{12}} C^{k_2+k_2s+m_2-j_9}_{j_{12}}} \sqrt{C^{n_2-k_2-j_{16}}_{j_{14}} C^{n_2-m_2-k_2-j_{15}}_{j_{14}} C^{k_2-j_{15}}_{j_{13}} C^{k_2+m_2-j_{16}}_{j_{13}}} \\
& \times \sqrt{C^{n_2+n_2s-k_2-k_2s-j_9-j_{11}}_{p_5} C^{n_2-m_2-k_2-j_{14}-j_{15}+p_7}_{k_2s-j_9-j_{12}+j_{13}+j_{16}+p_7}} \sqrt{C^{-n_2s+k_2+k_2s+j_9+j_{11}-j_{13}-j_{14}-j_{15}-j_{16}+p_5}_{p_5} C^{k_2+k_2s+m_2-j_9-j_{12}}_{k_2s-j_9-j_{12}+j_{13}+j_{16}+p_7}} \\
& \times \sqrt{C^{n_2-k_2-j_{14}-j_{16}}_{k_2s-j_{10}-j_{12}+p_5+j_{13}+j_{15}} C^{n_2-m_2-k_2-j_{14}-j_{15}+p_7}_{p_7}} \sqrt{C^{k_2+k_2s-j_{10}-j_{12}+p_5}_{k_2s-j_{10}-j_{12}+p_5+j_{13}+j_{15}} C^{k_2+m_2-j_{13}-j_{16}}_{p_7}}.
\end{aligned}
$$