

ТОЧНЫЕ НЕРЕЛЯТИВИСТСКИЕ ВЫРАЖЕНИЯ ТЕНЗОРА РАССЕЯНИЯ СВЕТА АТОМАМИ

М. А. Преображенский

*Воронежская государственная архитектурно-строительная академия
394000, Воронеж, Россия*

Поступила в редакцию 7 июня 1996 г.

Получены точные нерелятивистские аналитические выражения дипольных двухфотонных переходов между произвольными мультиплетами атома водорода и положительных водородоподобных ионов. Результат выражен через одну гипергеометрическую функцию Гаусса и полиномы, степень которых линейно растет с ростом числа узлов связанных состояний квантовой системы. В качестве примера приведены сечения упругого рассеяния света K - и L -оболочками атома водорода. Показано, что разложение волновых функций дискретного спектра по гиперсферическим полиномам позволяет получить аналитические выражения сечений двухфотонных переходов также и между состояниями, описываемыми модельным потенциалом Саймонса. Показано, что наилучшим базисом разложения является базис полиномов Чебышева. В широкой области изменения параметров задачи приведены коэффициенты этого разложения. В качестве примера рассчитана поляризуемость $5s$ -состояния атома рутидия. Проведено сравнение полученного значения с результатами экспериментальных и других теоретических работ.

1. ВВЕДЕНИЕ

Как известно [1], матричные элементы C_{ik} дипольного тензора рассеяния света атомом следующим образом выражаются через волновые функции исходного $|1\rangle$ и конечного $|2\rangle$ состояний:

$$C_{ik} = \langle 2 | d_i G_{E_1 + \omega_i} d_k + d_k G_{E_1 - \omega_i} d_i | 1 \rangle, \quad (1)$$

где d_i — компоненты оператора дипольного взаимодействия, G — функция Грина атома, E_1 — энергия начального уровня, $\omega_{1,2}$ — энергии поглощенного и рассеянного фотонов соответственно. (Здесь и далее используется атомная система единиц.) Применимость дипольного приближения к исследованию процессов взаимодействия связанных состояний атомов с электромагнитной волной обуславливается малостью их линейных размеров r по сравнению с длиной волны λ : $r \ll \lambda$. В оптическом диапазоне частот это условие справедливо вплоть до состояний с главным квантовым числом $n < 30$ [2].

Через элементы тензора C_{ik} выражаются вероятности упругого и неупругого рассеяния света и сдвиги энергетических уровней в электромагнитном поле. Так, например, для изолированного атомного уровня тензор C_{ik} вырождается в тензор поляризуемости α_{ik} , следующим образом связанный со сдвигом уровня ΔE :

$$\Delta E = -\alpha_{ik} \mathcal{E}_i \mathcal{E}_k / 2, \quad (2)$$

где \mathcal{E}_i — компоненты вектора напряженности электрического поля. Состояния атома с орбитальным квантовым числом $l > 0$ не могут быть изолированными и вырождены, по крайней мере, по проекции M полного момента J . Зависимость C_{ik} как от M , так

и от индексов i, k может быть найдена по теореме Вигнера–Экарта в общем виде, что позволяет определить зависимость ΔE от магнитных квантовых чисел [3]. При этом для изолированного уровня более удобным оказывается выражение ΔE не через тензор α_{ik} , а через пропорциональные его компонентам скалярную и тензорную поляризуемости.

Водородоподобные и ридберговские состояния вырождены кроме того и по l . В этом случае, вообще говоря, вклад в сдвиг атомного уровня вносят не только квадратичные по напряженности поля члены α_{ik} , но и члены, линейно зависящие от \mathcal{E} . Именно линейные члены полностью определяют ΔE в статическом пределе. Но в оптическом диапазоне частот ω их вклад в эффект Штарка мал [3]. В поле, достаточно сильном, для того чтобы можно было пренебречь тонкой структурой уровней, задача, вообще говоря, сводится к диагонализации трехдиагональной матрицы квазиэнергии ранга $n - |M|$ (n — главное квантовое число) с элементами пропорциональными (1) [4]. В частных случаях для полей, не полностью снимающих вырождение, расчет ΔE упрощается. Так, в линейно поляризованном поле сохраняется четность уровня и матрица квазиэнергий разлагается в прямую сумму матриц, перемешивающих состояния фиксированной четности [3].

Сложнее описывается эффект Штарка для атомного мультиплета. В этом случае ранг диагонализуемой матрицы зависит от частоты и напряженности поля и не может быть указан заранее. Он определяется числом уровней, для которых сдвиг отдельного уровня имеет порядок ширины мультиплета. Для возбужденных состояний большинства атомов в реальных полях все уровни мультиплета перемешиваются полем, а различные мультиплеты можно считать изолированными.

Поскольку в любом случае, за исключением статического поля, исследование сдвига уровней, вероятностей упругого и комбинационного рассеяния света, двухфотонной ионизации и других двухквантовых фотопроцессов включает как обязательный этап расчет тензора рассеяния, эта задача привлекала к себе большое внимание. Для ее решения использовался большой арсенал методов. Для основных состояний сложных атомов использовались нестационарная теория возмущений в методе Хартри–Фока [5], многочастичная теория возмущений [6] и метод случайных фаз с обменом [7]. Применение этих методов к возбужденным вырожденным состояниям наталкивается на большие технические трудности. В этом случае физически оправданным является кулоновское приближение. Но и в его рамках удалось получить точные аналитические выражения элементов тензора рассеяния лишь для основного и первого возбужденного состояний атома водорода [3, 8]. Прямое суммирование членов, порождаемых штурмовским разложением функции Грина, возможно только при закрытом канале однофотонной ионизации [4]. Метод, основанный на решении неоднородного дифференциального уравнения [9], в явном виде использует сферическую симметрию S -состояния. Но и в этом случае значительные технические трудности позволили исследовать лишь два нижних состояния. Использование спектрального разложения или интегрального представления [10] функции Грина приводит к громоздким численным расчетам, сложность которых быстро растет с ростом n .

Если n превышает два, в расчетах C_{ik} при произвольной частоте внешнего поля ω даже для уровней атома водорода и водородоподобных ионов использовались дополнительные приближения. Ряд авторов использовал разложение C_{ik} по обратным степеням ω [11]. При этом удалось получить лишь небольшое число членов разложения. Его слабая сходимоссть и неаналитический характер поведения мнимой части C_{ik} ограничивают область применимости данного приближения.

Слабо сходится также и квазиклассическое разложение по обратным степеням главного квантового числа n [12]. Технические трудности позволили выполнить его лишь с точностью до членов n^{-2} , а неаналитичность ширины уровня по энергии привела к невозможности получения в этом приближении мнимой части ΔE .

Методы, основанные на суммировании конечного числа сил осцилляторов, рассчитанных в приближении Крамерса [13], также обладают весьма узкой областью применимости. Поскольку в этом случае полностью отброшен вклад в α_{ik} непрерывного спектра, приближение неприменимо для частот ω , превышающих потенциал ионизации возмущаемого уровня. В этом случае, как показано в [3], для основных состояний атомов виртуальные переходы в непрерывный спектр определяют значения поляризуемости на 50–90%. Для возбужденных состояний вклад меняется в широких пределах и при значениях орбитального квантового числа $l > 1$ может оказаться существенным даже и при закрытом канале ионизации. С другой стороны, приближение несправедливо и при малых ω . Связано это с тем обстоятельством, что в приближении Крамерса силы осцилляторов не зависят от l . Это не позволяет учесть перемешивание вырожденных по l уровней, которым нельзя пренебречь при малых ω .

Все это приводит к необходимости разработки методов получения точных аналитических выражений C_{ik} . Решению этой задачи в дипольном нерелятивистском приближении посвящена данная работа.

2. ТОЧНЫЕ АНАЛИТИЧЕСКИЕ ВЫРАЖЕНИЯ КОМПОНЕНТ ТЕНЗОРА РАССЕЯНИЯ СВЕТА НА ВОДОРОДНЫХ УРОВНЯХ

Стандартные методы теории углового момента [14] позволяют в общем виде выполнить в (1) интегрирование по угловым переменным и определить зависимость C_{ik} от магнитных квантовых чисел исходного M , виртуального m и конечного M_f состояний атома. Применяя к (1) теорему Вигнера–Эккарта, выразим C_{ik} через коэффициенты Клебша–Гордана и приведенный составной матричный элемент теории возмущений:

$$C_{ik} = (-1)^{J-M+j-m} \begin{pmatrix} J & 1 & j \\ M & q_i & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j & 1 & J_f \\ M & q_k & M_f \end{pmatrix} (2 \parallel dG_{E_1+\omega_1} d + dG_{E_1-\omega_1} d \parallel 1), \quad (3)$$

$$q_{i,k} = 0, \pm 1.$$

Расчет (3) для различных схем связи угловых моментов проводился неоднократно и не представляет трудности (см., например, [3, 15]). Приведем сразу необходимое в дальнейшем конечное выражение C_{ik} в схеме LS -связи через радиальный составной матричный элемент T и коэффициенты Рака W :

$$C_{ik} = (-1)^{J-M-m-j+2S-L-L_1} \begin{pmatrix} J & 1 & j \\ M & q_i & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j & 1 & J_1 \\ M & q_k & M_1 \end{pmatrix} (2j+1) [(2J+1)(2J_1+1)]^{1/2} \times \\ \times W(LS l j; S1) W(l j L_1 J_1; S1) L_{max} L_{1max} [T(nL, \nu+l, n_1 L_1) + T(nL, \nu+l, n_1 L_1)]. \quad (4)$$

Здесь L, l, L_f — орбитальные квантовые числа исходного, виртуального и конечного состояний соответственно; L_{max} — большее из чисел L, l ; S — спиновое квантовое число; эффективное главное квантовое число виртуального уровня определяется как

$$\nu_{+,-} = [2(-E \pm \omega)]^{1/2}, \quad (5)$$

а радиальный составной матричный элемент теории возмущений T есть

$$T(n_f L_f, \nu l, nL) = \langle nL | r^3 g_l(\nu, r, r_1) r_1^3 | n_f L_f \rangle, \quad (6)$$

где $\langle nL |, |n_f L_f \rangle$ — радиальные части волновых функций исходного и конечного состояний атома, $g_l(\nu, r, r_1)$ — радиальная часть функции Грина. Именно расчет T и составляет единственную трудность задачи.

Общий алгоритм расчета двухфотонных дипольных радиальных матричных элементов для водородных состояний изложен в [15]. Получим, следуя этой работе, элементы тензора рассеяния. Подставим в (6) штурмовское представление радиальной части кулоновской функции Грина [3] через полиномы Лагерра L_k^{2l+1} [16]

$$g_l(\nu, r, r_1) = \frac{4}{\nu} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(rr_1)^l \exp(-r/\nu - r_1/\nu)}{k!(k+2l+1)!(k+l+1-\nu)} L_k^{2l+1}(2r/\nu) L_k^{2l+1}(2r_1/\nu) \quad (7)$$

и явное выражение для волновой функции связанного состояния

$$|nL\rangle = \frac{2^{L+1}}{n^{L+2}} [(n+L)!(n-L-1)!]^{1/2} \sum_{\alpha=0}^{n-L-1} \left(\frac{-2r}{\nu}\right)^{\alpha} \frac{1}{(n-L-1-\alpha)!(2L+1+\alpha)! \alpha!}. \quad (8)$$

Матричный элемент (6) выражается через трансформанту Лапласа для L_k^{2L+1} . Используя ее выражение через гипергеометрическую функцию [16], имеем

$$T(n_f L_f, \nu l, n_i L_i) = C_i C_f \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2l+k+1)!}{k!(k+l+1-\nu)} \left[\frac{\nu - n_i}{\nu + n_i} \frac{\nu - n_f}{\nu + n_f} \right]^k \times \\ \times I(n_i L_i, \nu, lk) I(n_f L_f, \nu, lk). \quad (9)$$

Здесь введены обозначения

$$C_i = \frac{[(n_i + L_i)!(n_i - l_i - 1)!]^{1/2}}{n_i^{L_i+2} \nu^{l_i+1/2} (2l+1)!} \left(\frac{\nu n_i}{\nu + n_i}\right)^{l_i+L_i+4}, \quad (10)$$

$$I(n_i L_i, \nu, lk) = \sum_{\alpha=0}^{n_i-L_i-1} \frac{(l+L_i+\alpha+3)!}{(n_i-l_i-\alpha-1)!(2L_i+\alpha+1)! \alpha!} \left(\frac{-2\nu}{\nu+n_i}\right)^{\alpha} \times \\ \times F[-k, l-L_i-\alpha-2, 2l+2, 2n_i/(\nu-n_i)], \quad (11)$$

где F — гипергеометрическая функция Гаусса, представляющая собой в данном случае конечный полином переменной $2n_i/(\nu-n_i)$, степень которого равна меньшему из чисел $k, L_i - l + \alpha + 2$. С другой стороны, F можно рассматривать как полином степени $L_i + \alpha + 2 - l$ параметра k .

Это свойство позволяет провести аналитическое продолжение $T(n_f L_f, \nu l, n_i L_i)$ в область мнимых ν , в которой разложение (9) расходится. Физически эта область соответствует открытому каналу однофотонной ионизации исходного состояния атома. Представим $I(n_i L_i, \nu, lk)$ в виде полинома $Q_{j_i}^{x_i, y_i}(k)$ переменной k с коэффициентами, зависящими от

$$x_i = n_i/(\nu - n_i), \quad y_i = \nu/(\nu + n_i). \quad (12)$$

Степень j_i этого полинома определяется старшим членом разложения F с максимальным $\alpha_{max}^i = n_i - L_i - 1$ и равна $j_i = n_i + 1 - l$, вследствие чего степень j произведения $P_{if}(k)$ полиномов Q_i и Q_f определяется суммарным числом узлов волновых функций n_{r_i}, n_{r_f} исходного и конечного состояний и равна

$$j = n_{r_i} + n_{r_f} + 2 - 2l; \tag{13}$$

$P_{if}(k)$ представляют собой полиномы переменной k , коэффициенты которых зависят от параметров x_i, y_i, x_f, y_f . Разлагая $P_{if}(k)$ по полиномам

$$R_m = \prod_{\gamma=0}^m (k + 2l + 2 + \gamma), \quad m = 1, \dots, j, \quad R_0 = 1, \tag{14}$$

получим

$$P_{if}(k) = \sum_{m=0}^j b_m(x_i, y_i, x_f, y_f) R_m. \tag{15}$$

Поскольку система полиномов (14) не является ортогональной, замкнутые выражения коэффициентов $b_m(x_i, y_i, x_f, y_f)$ разложения (15) не могут быть получены. Это разложение может быть проведено стандартными методами: либо последовательным делением $P_{if}(k)$ на R_m ($m = 0, \dots, j$) по схеме Горнера, либо решением системы $j + 1$ линейных уравнений, получаемых путем сравнения коэффициентов при одинаковых степенях переменной k в правой и левой частях равенства (15). Тот факт, что старшие коэффициенты всех полиномов системы (14) равны единице, позволяет построить более экономную рекуррентную процедуру получения $b_m(x_i, y_i, x_f, y_f)$, являющуюся обобщением техники подвижной полосы [17, гл. 1] на случай несимметрических функций. Вычитая из $P_{if}(k)$ полином R_j с весом, равным старшему коэффициенту $P_{if}(k)$, мы имеем в остатке полином степени $j - 1$. Рекуррентно повторяя с остатками эту процедуру $j - 1$ раз, мы получаем систему коэффициентов b_m . Данный алгоритм содержит только операции вычитания полиномов с целыми коэффициентами, свободен от вычислительных ошибок и легко поддается программированию.

Учтем теперь, что

$$(k + 2l + 1)! R_m = (k + 2l + m + 1)!, \tag{16}$$

и приведем (9) к виду

$$T(n_f L_f, \nu l, n_i L_i) = C_i C_f \sum_{m=0}^j b_{i,l,f,m}(x_i, y_i, x_f, y_f) \times \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2l + k + 1 + m)!}{k!(k + l + 1 - \nu)} \left[\frac{\nu - n_i}{\nu + n_i} \frac{\nu - n_f}{\nu + n_f} \right]^k. \tag{17}$$

Поскольку внутренняя сумма по k выражается через гипергеометрический ряд [16]

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2l + k + 1 + m)!}{k!(k + l + 1 - \nu)} \left[\frac{\nu - n_i}{\nu + n_i} \frac{\nu - n_f}{\nu + n_f} \right]^k = \frac{(2l + 1 + m)!}{l + 1 - \nu} {}_2F_1 \left[2l + m + 1, l + 1 - \nu, l + 2 - \nu, \frac{\nu - n_i}{\nu + n_i} \frac{\nu - n_f}{\nu + n_f} \right], \tag{18}$$

(17) представляет собой конечную сумму смежных гипергеометрических функций Гаусса:

$$T(n_f L_f, \nu l, n_i L_i) = \sum_{m=0}^j d_{i,l,f,m}(x_i, y_i, x_f, y_f) F_{if}(m). \quad (19)$$

Здесь введены обозначения:

$$d_{i,l,f,m}(x_i, y_i, x_f, y_f) = C_i C_f \frac{(2l+1+m)!}{l+1-\nu} b_{i,l,f,m}(x_i, y_i, x_f, y_f), \quad (20)$$

$$F_{if}(m) = {}_2F_1 \left[2l+m+1, l+1-\nu, l+2-\nu, \frac{\nu-n_i}{\nu+n_i} \frac{\nu-n_f}{\nu+n_f} \right].$$

Данный алгоритм позволяет описывать поведение тензора рассеяния не только в области аналитичности, но и дает правильное положение полюсов: $\nu = l + n + 1$ при $n = 0, 1, \dots, \infty$.

Изложенный выше алгоритм получения аналитических выражений компонент тензора рассеяния через гипергеометрические функции содержит только процедуры деления полиномов с рациональными коэффициентами и приведения подобных по переменным x, y и легко поддается программированию. Реализующая данный алгоритм программа содержит только целочисленные операции и свободна от вычислительных ошибок.

В качестве примера приведем явные выражения для диагональных по главным квантовым числам ($x_i = x_f = x, y_i = y_f = y$) переходов из основного и первого возбужденного состояний атома водорода:

$$T(1s, \nu 1, 1s)/2^8 3^2 = F(0)(1 - 4x + 4x^2) + xF(1)(4 - 9x) + 5x^2 F(2),$$

$$T(2s, \nu 1, 2s)/2^{11} 3^3 5 = F(0) [(1/5 - 2y + 5y^2)/8 + x(-1/5 + 3y - 10y^2)/2 +$$

$$+ 2x^2(1/5 - 6y + 300y^2) + 16x^3 y(1 - 10y) + 160x^4 y^2] + F(1)x [(1/5 - 3y + 10y^2)/8 +$$

$$+ x(-9/10 + 26y - 130y^2) - 56x^2 y(1 - 10y) - 800x^3 y^2] + 2x^2 F(2) [(1/4 - 7y + 35y^2) +$$

$$+ 32xy(1 - 10y) + 728x^2 + y^2] - 64x^3 y F(3) [(1 - 10y + 48xy)] + 336x^4 F(4)y^2,$$

$$T(2p, \nu 1, 2s)/2^{10} 3^2 5 = F(0) [(1 - 5y)/16 + x(-3 + 20y)/4 + 3x^2(1 - 10y) +$$

$$+ 4x^3(-1 + 20y) - 80x^4 y] + xF(1) [(3/4 - 5y) + 13x(-1/2 + 5y) + 14x^2(1 - 20y) +$$

$$+ 400x^3 y] + x^2 F(2) [(7/2 - 5y) + 16x(-1 + 20y) - 728x^2 + y] +$$

$$+ x^3 F(3) [6(1 - 20y) + 576xy] + 168x^4 F(4)(-1 + y), \quad (21)$$

$$T(2p, \nu 0, 2p)/2^7 3 = F(0) (1/24 - x + 10x^2 - 160/3x^3 + 160x^4 - 256x^5 + 512/3x^6) +$$

$$+ xF(1) (1 - 23x - 208x^2 - 928x^3 + 2048x^4 - 1792x^5) + 16x^2 F(2)(13/16 -$$

$$- 16x + 116x^2 - 368x^3 + 432x^4) + 16x^3 F(3) (19/3 - 98x + 496x^2 - 824x^3) +$$

$$+ 160x^4 F(4)(3 - 32x + 84x^2) + 640x^5 F(5)(2 - 11x) + x^6 F(6)4480/3,$$

$$T(2p, \nu 1, 2p)/2^9 3 \cdot 5^2 = F(0) (1/16 - x + 6x^2 - 16x^3 + 16x^4) + xF(1)(1 - 13x + 56x^2 - 80x^3) + x^2 F(2)(7 - 64x + 738x^2/5) + 24x^3 F(3)(1 - 24x/5) + 168x^4 F(4)/5,$$

$$T(2p, \nu 2, 2p)/2^{12} 3^2 5^3 = 3F(0)(1/8 - x + 2x^2) + xF(1)(3 - 13x) + 7x^2 F(2).$$

В формальном статическом пределе $\nu = n_{i,f} + l_{i,f} + 1$ исходный ряд (17) может иметь лишь полюс первого порядка при $n_{r_{i,f}} = l - l_{i,f}$, что возможно только при $\Delta l = 0, -1$. В остальных случаях (17) стремится к конечному пределу. Легко убедиться, что и в конечных суммах (21) все члены $x_{i,f}^j$, содержащие полюсы более высокого чем (17) порядка, сокращаются. Так, например $T(1s, \nu 1, 1s)$ имеет конечный статический предел: $T(1s, 1, 1s) = 27/4$, что дает правильную статическую поляризуемость основного состояния атома водорода: $\alpha_{1s} = -9/2$.

Изложенный выше алгоритм позволяет выразить тензор рассеяния света произвольным водородоподобным состоянием атома через конечную сумму смежных гипергеометрических функций Гаусса. Трехчленные рекуррентные соотношения Куммера позволяют свести любые смежные гипергеометрические функции к двум функциям. Тот факт, что второй и третий аргументы $F_{i,f}(m)$ отличаются на единицу, позволяет свести (20) к одной гипергеометрической и элементарным функциям. Докажем это утверждение.

Применяя соотношение Куммера

$$F(a + 1, b, c, z) = [F(a, b, c, z) + bF(a, b + 1, c, z)]/a \tag{22}$$

к $F_{i,f}(m)$ и учитывая, что $F(a, b, b, z)$ есть элементарная функция:

$$F(a, b, b, z) = (1 - z)^{-a}, \tag{23}$$

получим

$$F_{i,f}(m) = \frac{l + m + 1 + \nu}{2l + 2 + m} F(m - 1) + \frac{l + 1 - \nu}{2l + 2 + m} Q^{2l+2+m}. \tag{24}$$

Здесь введено обозначение

$$Q = \frac{(\nu + n_i)(\nu + n_f)}{2\nu(n_i + n_f)}. \tag{25}$$

Последовательное применение (24) позволяет выразить $F_{i,f}(m)$ с произвольным m , а следовательно, и сумму (20) через $F_{i,f}(0)$ и элементарную функцию:

$$F_{i,f}(m) = \frac{l + m - 1 + \nu}{2l + 2 + m} P_m F_{i,f}(0) + (l + 1 - \nu) \sum_{j=0}^{m-1} \frac{P_j Q^{2l+2+m-j}}{2l + 1 + m - j}, \tag{26}$$

где

$$P_j = \prod_{k=0}^{j-1} \frac{l + j + \nu - k}{2l + 1 + j - k}. \tag{27}$$

В качестве иллюстрации приведем два примера выражения радиальных составных матричных элементов через одну гипергеометрическую функцию $F(0)$:

$$T(1s, \nu 1, 1s) = \frac{3}{2} \left(\frac{2\nu}{1+\nu} \right)^{10} \frac{(7\nu^2 - 18\nu + 12)F(0) + (2-\nu) [(3\nu-8)Q^4 + 4Q^5]}{\nu^3(\nu-1)^2(2-\nu)},$$

$$T(2p, \nu 2, 2p) = \frac{2^7 15^3}{\nu^5(\nu-2)^2} \left(\frac{2\nu}{2+\nu} \right)^{14} \left\{ \frac{(49\nu^2 - 162\nu + 324)F(0)}{24} + (3-\nu) \left[\frac{(5\nu-24)Q^6}{3} + \frac{(3\nu-32)Q^7}{4} \right] \right\}. \quad (28)$$

Пользуясь соотношениями между смежными гипергеометрическими функциями, можно доказать и более общее утверждение: не только отдельная компонента тензора рассеяния света атомной оболочкой, но и весь тензор может быть выражен через одну гипергеометрическую функцию. Это свойство позволяет значительно упростить как суммирование и усреднение по компонентам атомного мультиплета, так и диагонализацию матрицы квазиэнергии.

В соответствии с правилами отбора в дипольном приближении угловой момент виртуального состояния $l = L_i, L_i \pm 1$, вследствие чего $F_{if}(0)$ следующим образом выражается через угловое квантовое число исходного состояния:

$$F_{if}^+(0) = F(2L_i + 4, L_i + 2 - \nu, L_i + 3 - \nu, z),$$

$$F_{if}(0) = F(2L_i + 2, L_i + 1 - \nu, L_i + 2 - \nu, z), \quad (29)$$

$$F_{if}^-(0) = F(2L_i, L_i - \nu, L_i + 1 - \nu, z).$$

Выразим $F_{if}^+(0)$ через $F_{if}(0)$. Приведение первого параметра функции $F_{if}^+(0)$ к значению $2L_i + 2$ проводится двукратным применением преобразования (22). Одновременное уменьшение второго и третьего параметров на единицу может быть осуществлено одним преобразованием Куммера:

$$F(a, b, c + 1, z) = c[F(a, b - 1, c, z) - (1 - z)F(a, b, c, z)] / z(a - c). \quad (30)$$

Вследствие того что в (29) $c = b$, $F(a, b, c, z)$ в соответствии с (23) представляет собой элементарную функцию, и окончательный результат имеет вид

$$F_{if}^+(0) = \frac{L_i + 2 - \nu}{2L_i + 3} \left\{ Q^{2L_i+3} + \frac{L_i + 1 + \nu}{(2L_i + 2)z} [Q^{2L_i+2} - F_{if}(0)] \right\}. \quad (31)$$

Двукратно применяя к $F_{if}^-(0)$ преобразование

$$F(a - 1, b, c, z) = [bF(a, b + 1, c, z) / z - (c - b - a)F(a, b, c, z)] / (c - a) \quad (32)$$

и учитывая, что $F(a, b + 1, c, z)$ есть элементарная функция, можно свести первый параметр функции $F_{if}^-(0)$ к величине $2L_i + 2$. Преобразование Куммера

$$F(a, b, c - 1, z) = [bF(a, b + 1, c, z) / z + (c - b - 1)F(a, b, c, z)] / (c - a) \quad (33)$$

позволяет выразить $F_{if}^-(0)$ через $F_{if}(0)$ следующим образом:

$$F_{if}^-(0) = \frac{Q^{2L_i}}{L_i + \nu} (2L_i Q - L_i + \nu) - \frac{z 2L_i (2L_i + 1)}{(L_i - \nu)(L_i + \nu + 1)} F_{if}(0). \quad (34)$$

В частности, для P -состояний имеем

$$F_{if}^+(0) = \frac{3 - \nu}{5} \left[Q^5 + \frac{2 + \nu}{4z} (Q^4 - F_{if}(0)) \right], \quad (35)$$

$$F_{if}^-(0) = \frac{Q^2}{\nu + 1} (2Q - 1 + \nu) - \frac{6z}{(1 - \nu)(2 + \nu)} F_{if}(0).$$

3. АНАЛИТИЧЕСКИЕ ВЫРАЖЕНИЯ ЭЛЕМЕНТОВ ТЕНЗОРА РАССЕЯНИЯ СВЕТА ВОДОРОДОПОДОБНЫМИ СОСТОЯНИЯМИ СЛОЖНЫХ АТОМОВ

В тех случаях, когда для описания поведения оптического электрона сложного атома можно использовать одноэлектронное приближение, для построения волновой функции и функции Грина может быть использован метод модельного потенциала. Единственным позволяющим получить аналитические результаты и поэтому наиболее часто применяемым в многофотонных расчетах является модельный потенциал Саймонса [3]

$$V(\mathbf{r}) = -Z/r + \sum_l B_l(E) P_l / r^2. \quad (36)$$

Здесь $B_l(E)$ — параметр, определяемый из условия совпадения полюсов функции Грина и экспериментального спектра атома, P_l — оператор проектирования на подпространство собственных функций углового момента с данным l . Так же, как и все одноэлектронные методы, он неверно описывает область атомного кора, в которой сильно сказывается корреляционное взаимодействие. Однако при расчетах вероятностей фотопроцессов оператор дипольного взаимодействия d уменьшает относительный вклад этой области в интеграл (6).

Потенциал Саймонса имеет неверную асимптотику и в противоположном пределе больших r . Однако волновые функции и функция Грина в области больших r экспоненциально малы и, кроме того, неколлектность потенциала по угловым переменным позволяет соответствующим выбором его параметров $B_l(E)$ отчасти скомпенсировать и этот недостаток [3]. Как показывают многочисленные расчеты, существует широкая область частот излучения и энергий уровней, для которых в этом потенциале хорошо описываются фотопроцессы на возбужденных состояниях атомов щелочных, щелочноземельных металлов, благородных газов и других элементов. Кроме того, он описывает также и фотопереходы из основных состояний атомов с одним валентным электроном. Это позволяет использовать приближение модельного потенциала Саймонса в расчетах тензора рассеяния света сложным атомом [3].

Волновая функция $|\nu_i \lambda\rangle$ и функция Грина оптического электрона $g_\lambda(\nu, r, r_1)$ в этом потенциале имеют вид [3]

$$|\nu_i \lambda\rangle = \frac{2^{\lambda+1}}{\nu^{\lambda+2}} [(\nu_i + \lambda)! n_r!]^{1/2} \sum_{\alpha=0}^{n_r} \left(\frac{-2r}{\nu_i} \right)^\alpha \frac{1}{n_r! (2\lambda + 1 + \alpha)! \alpha!}, \quad (37)$$

$$g_\lambda(\nu, r, r_1) = \frac{4}{\nu} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(r r_1)^\lambda \exp(-r/\nu - r_1/\nu)}{k! (k + 2\lambda + 1)! (k + \lambda + 1 - \nu)} L_k^{2\lambda+1}(2r/\nu) L_k^{2\lambda+1}(2r_1/\nu).$$

Здесь n_r — радиальное квантовое число. Эффективное главное квантовое число связанного состояния $\nu_{i,f}$ определяется как $\nu_{i,f} = (-2E_{i,f})^{-1/2}$, а параметр λ есть функция энергии оптического электрона E и углового квантового числа l . Он выбирается так, чтобы обеспечить совпадение экспериментальных энергий связанных состояний с полюсами функции Грина. Необходимым условием применимости метода модельного потенциала Саймонса к расчетам вероятностей фотопроцессов является гладкость функции $\lambda(E)$:

$$\left| \frac{\partial \lambda}{\partial E} \right| \ll 1.$$

Подставляя (37) в (6), получим обобщение выражений (9)–(11) на случай сложных атомов:

$$T(\nu_f \lambda_f, \nu \lambda, \nu_i \lambda_i) = C_i C_f \sum_{k=0}^{\infty} \frac{F(2\lambda + k + 2)!}{k!(k + \lambda + 1 - \nu)} \left[\frac{\nu - \nu_i}{\nu + \nu_i} \frac{\nu - \nu_f}{\nu + \nu_f} \right]^k \times \\ \times I(\nu_i \lambda_i, \nu, \lambda k) I(\nu_f \lambda_f, \nu, \lambda k), \quad (38)$$

где

$$C_i = \frac{[\Gamma(n_i + L_i + 1) n_{ri}!]^{1/2}}{n_i^{\lambda_i + 2} \nu^{\lambda_i + 1/2} \Gamma(2\lambda_i + 2)} \left(\frac{\nu n_i}{\nu + n_i} \right)^{\lambda_i + \lambda_i + 4}, \quad (39)$$

$$I(n_i \lambda_i, \nu, \lambda k) = \sum_{\alpha=0}^{n_{ri}} \frac{\Gamma(\lambda + \lambda_i + \alpha + 4)}{\Gamma(n_{ri} - \alpha) \Gamma(2\lambda_i + \alpha + 2)! \alpha!} \left(\frac{-2\nu}{\nu + n_i} \right)^{\alpha} \times \\ \times F[-k, \lambda - \lambda_i - \alpha - 2, 2\lambda + 2, 2n_i/(\nu - n_i)].$$

Частный случай (37), (38) для диагональных по главному квантовому числу переходов получен в [10].

Разложение (37) сходится только при действительных ν , что физически соответствует закрытому каналу однофотонной ионизации. Непосредственное применение изложенного выше алгоритма аналитического продолжения $T(n_f L_f, \nu l, n_i L_i)$ в область мнимых ν невозможно, вследствие того что $F[-k, \lambda - \lambda_i - \alpha - 2, 2\lambda + 2, 2n_i/(\nu - n_i)]$ при нецелочисленных значениях параметра $\lambda_i - \lambda$ не является конечным полиномом переменной k . Для того чтобы использование алгоритма аналитического продолжения стало возможным, необходимо свести $I(n_i \lambda_i, \nu, \lambda k)$ к нецелым λ, λ_i к сумме многочленов $Q_{j_i}^{x_i, y_i}(k)$. Разложим для этого $r^{\lambda_i + 2 - \lambda}$ по целым степеням переменной r :

$$r^{\lambda_i + 2 - \lambda} = \sum_{\delta=0}^{\delta_{max}} h_{\delta} (\lambda - \lambda_i) r^{\delta}. \quad (40)$$

Одна и та же функция может быть бесконечным числом способов разложена в степенные ряды по ортогональным полиномам Якоби, отличающимся друг от друга весовой функцией, относительно которой имеет место их ортогональность. Приводя подобные при одинаковых степенях r , мы получим степенные разложения (40). При $\delta_{max} \rightarrow \infty$ все они в области сходимости точны и равнозначны. Однако, если целью разложения является достижение заранее заданной на конечном отрезке точности при

минимальном числе членов разложения δ_{max} , их сходимость будет различной. Вследствие того, что погрешность расчета сечения фотопроцесса на сложном атоме во всяком случае ограничивается снизу одноэлектронным приближением модельного потенциала, нет необходимости стремиться к абсолютной точности разложения и именно эта ситуация имеет место в нашем случае.

Базис разложения необходимо выбирать так, чтобы обеспечить наиболее экономичное для данной точности описание подынтегральной функции в (6) в области изменения переменной $0 > r \geq \nu$, вносящей основной вклад в интеграл. Для этой цели, вообще говоря, максимально неэффективны локальные разложения Тейлора или Маклорена, в которых используется только информация о поведении функции в одной точке. Намного эффективней процедура разложения по ортогональным полиномам, из которых наилучшим в интегральном смысле является разложение по ультрасферическим полиномам [17].

При различных значениях параметров задачи вклад разных частей области интегрирования в (6) неодинаков. Этот факт может быть учтен соответствующим выбором весового коэффициента ортогонального разложения, а следовательно, и вида ультрасферического полинома [17]. Равномерную оценку относительного максимального отклонения Δ_{max} аппроксимационного полинома от разлагаемой функции во всем интервале изменения r обеспечивает базис полиномов Чебышева $T_k(x)$. Это свойство полиномов Чебышева и определяет их преимущество при аппроксимации функции в широком интервале изменения параметров. Такой выбор базиса позволяет определить вид степенного разложения вне зависимости от вида атома и параметров поля. При этом относительная ошибка интеграла Δ ограничена Δ_{max} сверху. На интервале $-1 < r < 1$ полиномы $T_k(x)$ определяются рекуррентными соотношениями

$$T_{k+1}(x) = 2xT_k(x) - T_{k-1}(x), \quad T_0(x) = 1, \quad T_1(x) = x. \tag{41}$$

Коэффициенты разложения a_k функции $f(x)$ по полиномам Чебышева определяются равенством

$$a_k = \int_{-1}^1 f(x)T_k(x)(1-x^2)^{1/2}dx. \tag{42}$$

Подставляя (40) в (6), получим

$$I(n_i \lambda_i, \nu, \lambda k) = \sum_{\delta=0}^{\delta_i} h_{\delta}(\lambda - \lambda_i) \sum_{\alpha=0}^{n_{ri}} \frac{\Gamma(\lambda + \lambda_i + \alpha + 4)}{\Gamma(n_{ri} - \alpha)\Gamma(2\lambda_i + \alpha + 2)\alpha!} \left(\frac{-2\nu}{\nu + n_i}\right)^{\alpha} \times \\ \times F[-k, -\delta - \alpha, 2\lambda + 2, 2n_i/(\nu - n_i)]. \tag{43}$$

Поскольку теперь второй параметр функции F есть целое отрицательное число, аналогично (15), имеем

$$P_{if}(k) = \sum_{m=0}^j B_m(x_i, y_i, x_f, y_f)R_m, \tag{44}$$

где $B_m(x_i, y_i, x_f, y_f)$ есть просто линейная комбинация определенных ранее величин $b_m(x_i, y_i, x_f, y_f)$ с весами, определяемыми коэффициентами аппроксимации (40):

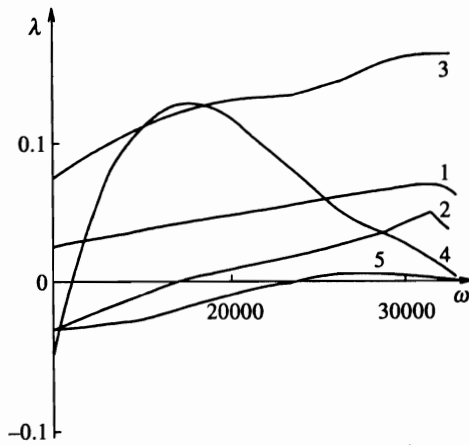
$$B_m(x_i, y_i, x_f, y_f) = \sum_{\delta=0}^{\delta_i} h_{\delta}(\lambda - \lambda_i) \sum_{\delta_1=0}^{\delta_f} h_{\delta_1}(\lambda - \lambda_f) b_m(x_i, y_i, x_f, y_f). \tag{45}$$

Таблица 1

| ρ | δ | | | | | | | | |
|--------|----------|-------|--------|----------|----------|-----------|----------|-----------|----------|
| | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 |
| 0.6 | 1 | 4 | -7 | 8.7 | -8 | 4.541 | -1.788 | 0.506 | -0.1059 |
| 0.7 | -2 | 3.5 | -7 | 6.5 | -4.9 | 2.83 | -1.09 | 0.309 | -0.06482 |
| 0.8 | -1 | 2.1 | -3.5 | 2.8 | -2.7 | 1.5 | -0.59 | 0.167 | -0.03455 |
| 0.9 | | 2.6 | -1.227 | 1.339 | -0.99 | 0.594 | -0.233 | 0.06621 | -0.01385 |
| 1.0 | | 1 | | | | | | | |
| 1.1 | 0.1 | 0.5 | 0.95 | -0.733 | 0.67 | -0.3712 | 0.145 | -0.04077 | 0.008526 |
| 1.2 | 0.5 | 0.2 | 1.4 | -1.464 | 1.07 | -0.595 | 0.225 | -0.0629 | 0.01308 |
| 1.3 | -0.4 | 1.2 | 1.2 | -1.272 | 1.15 | -0.64 | 0.253 | -0.0705 | 0.0147 |
| 1.4 | 0.05 | 0.31 | 1.08 | -0.6713 | 0.344 | -0.1241 | 0.3142 | -0.00569 | 0.7485/4 |
| 1.5 | 0.1 | 0.3 | 0.9655 | -0.3927 | 0.14148 | -0.03759 | 0.006787 | -8.585/4 | 0.7659/4 |
| 1.6 | -0.027 | 0.274 | 0.903 | -0.2188 | 0.05504 | -0.009698 | 0.001162 | -0.9382/4 | 0.502/5 |
| 1.7 | 0.033 | 0.215 | 0.9106 | -0.1463 | 0.02905 | -0.004056 | 0.3778/3 | -0.2293/4 | 0.8688/6 |
| 1.8 | 0.041 | 0.16 | 0.9234 | -0.8634 | 0.01314 | -0.001406 | 0.9748/4 | -0.4156/5 | 0.9878/7 |
| 1.9 | -0.038 | 0.12 | 0.9851 | -0.02804 | 0.002309 | -0.1252/3 | 0.3728/5 | -0.4612/7 | |
| 2.0 | | 1 | | | | | | | |
| 2.1 | -0.0089 | -0.11 | 1.056 | 0.03913 | -0.00291 | 0.1528/3 | -0.445/5 | 0.548/7 | |
| 2.2 | 0.085 | -0.18 | 1.089 | 0.09076 | -0.00634 | 0.3261/3 | -0.947/5 | 0.1153/7 | |
| 2.3 | 0.074 | -0.27 | 1.092 | 0.1561 | -0.0101 | 0.5089/3 | -0.146/4 | 0.1772/6 | |
| 2.4 | 0.438 | -0.36 | 1.063 | 0.2362 | -0.01392 | 0.6851/3 | -0.195/4 | 0.2347/6 | |
| 2.5 | 0.01 | -0.29 | 0.993 | 0.3315 | -0.01736 | 0.8334/3 | -0.234/4 | 0.2806/6 | |
| 2.6 | -0.02 | -0.4 | 0.883 | 0.4421 | -0.01985 | 0.9261/3 | -0.257/4 | 0.3061/6 | |
| 2.7 | 1.73 | -0.5 | 0.746 | 0.5667 | -0.02056 | 0.9294/3 | -0.255/4 | 0.3013/6 | |
| 2.8 | 0.95 | -0.5 | 0.6835 | 0.6572 | -0.01173 | 0.3128/3 | -0.391/5 | | |
| 2.9 | 0.39 | -0.1 | 0.3815 | 0.8213 | -0.008 | 0.2049/3 | -0.252/5 | | |
| 3.0 | | 1 | | | | | | | |
| 3.1 | -0.096 | 0.8 | -0.708 | 1.243 | 0.008875 | -0.9342/4 | | | |
| 3.2 | -0.4 | 0.8 | -0.936 | 1.1375 | 0.03685 | -0.8004/3 | 0.9357/5 | | |
| 3.3 | -1 | 1.1 | -1.483 | 1.547 | 0.07107 | -0.001431 | 0.1638/4 | | |
| 3.4 | 1 | 1.8 | -1.893 | 1.687 | 0.1205 | -0.002209 | 0.2471/4 | | |
| 3.5 | -10.1 | 5 | -2.451 | 1.766 | 0.1894 | -0.003086 | 0.3366/4 | | |
| 3.6 | -11 | 3 | -2.821 | 1.763 | 0.2825 | -0.003948 | 0.4186/4 | | |

Задача вычисления элементов тензора рассеяния сложным атомом сводится, таким образом, к определению энергетической зависимости параметров модельного потенциала λ , $\lambda_{i,f}$ и вычислению коэффициентов $h_\delta(\lambda - \lambda_{i,f} + 2)$. Первая часть этой задачи для каждого атома легко решается аппроксимацией рассчитанных по экспериментальному спектру [19] значений λ . В качестве примера на рисунке приведена использованная ниже для конкретных расчетов энергетическая зависимость параметров λ для атома рубидия.

Решение второй части задачи уже не зависит от специфики конкретного атома. В табл. 1 приведены значения младших, а в табл. 2 — старших коэффициентов разложения $h_\delta(\rho)$, обеспечивающих точность аппроксимации $\Delta_{max} = 10^{-4}$ для $0 < r < 40$. Эти данные позволяют рассчитать вероятности фотопроцессов, в которых $\nu, \nu_{i,f}, \nu \leq 40$. Интервал изменения параметра ρ описывает все переходы между уровнями щелочных,



Энергетическая зависимость параметров модельного потенциала λ атома рубидия. Кривые 1–5 соответствуют s -, $p_{1/2}$ -, $p_{3/2}$ -, d -, f -состояниям. Энергии выражены в см^{-1} . Приведенные значения λ_l нормированы условием $\lambda_l = \lambda - a_l$, где $a_s = 0.8$, $a_{p_{1/2}} = 1.3$, $a_{p_{3/2}} = 1.2$, $a_d = 1.68$, $a_f = 2.98$

щелочноземельных металлов и благородных газов. Нулевые для данной точности аппроксимации значения коэффициентов опущены. Запись c/n означает $c \cdot 10^{-n}$. Из таблиц видно, что кроме тривиальных случаев окрестностей целых значений ρ , в которых достаточно одного члена суммы (40) с $\delta = \rho$, разложение быстро сходится при $\nu \approx 10^0$, а при произвольном ν также и при $\rho > 1.5$. В этом случае необходимую точность обеспечивает небольшое число членов с $\delta \leq 5$ даже при больших ν . При малых ρ для высоковозбужденных состояний число необходимых членов δ_{max} в (40) растет и становится необходимым учет старших членов разложения (табл. 2), что значительно усложняет применение данного метода к расчету тензора рассеяния света.

В этом случае базис ультрасферических полиномов и, в частности, полиномов Чебышева, дающий равномерную для всего интервала аппроксимации оценку погрешности, уже не является адекватным задаче. Для различных интервалов параметров область r , вносящая определяющий вклад в (6), будет различной. В этом случае более экономичным оказывается не базис ультрасферических полиномов, а базис полиномов Якоби с несимметричными весовыми коэффициентами, подчеркивающими именно эту область r . Естественно, при таком выборе базиса разложение (40), выигрывая в экономичности, проигрывает в общности. Существует важный предельный случай резкой асимметрии подынтегральной функции, для которого базис Чебышева может быть использован в том числе и при больших ν и малых ρ .

Как показано в [10], с ростом энергии связанных состояний атома и частоты электромагнитной волны область r , дающая вклад в интеграл (6), уменьшается. Вследствие того что модельный потенциал неверно описывает поведение волновых функций при $r \leq r_c$ (r_c — радиус атомного кора), этот факт накладывает ограничения на применимость модельного потенциала Саймонса, а следовательно, и данного метода, к расчету тензора рассеяния электромагнитного излучения ридберговскими состояниями. Для высоковозбужденных состояний сужается также и область применимости дипольного приближения. Все это значительно усложняет теоретическое изучение взаимодействия света с такими уровнями. В то же время в области применимости данного метода для

Таблица 2

| ρ | δ | | | | | | | | |
|--------|----------|---------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 | 14 | 15 | 16 | 17 |
| 0.6 | 0.01668 | -0.2/2 | 0.183/3 | -0.128/4 | 0.677/6 | -0.267/7 | 0.7567/9 | -0.15/10 | 0.172/12 |
| 0.7 | 0.01016 | -0.12/2 | 0.111/3 | -0.778/5 | 0.412/6 | -0.162/7 | 0.46/9 | -0.89/11 | 0.104/12 |
| 0.8 | 0.00545 | -0.65/3 | 0.6/4 | -0.417/5 | 0.221/6 | -0.869/8 | 0.2465/9 | -0.48/11 | 0.56/13 |
| 0.9 | 0.00218 | -0.26/3 | 0.238/4 | -0.166/5 | 0.88/7 | -0.346/8 | 0.982/10 | -0.19/11 | 0.223/13 |
| 1.0 | | | | | | | | | |
| 1.1 | -0.00134 | 0.16/3 | -0.146/4 | 0.1017/5 | -0.54/7 | 0.2121/8 | -0.6/11 | 0.116/11 | -0.14/13 |
| 1.2 | -0.00205 | 0.245/3 | -0.224/4 | 0.156/5 | -0.825/7 | 0.3247/8 | -0.92/10 | 0.178/11 | -0.21/13 |
| 1.3 | -0.0023 | 0.275/3 | -0.251/4 | 0.175/5 | -0.235/7 | 0.3648/8 | -0.103/9 | 0.2/11 | -0.23/13 |
| 1.4 | -0.748/3 | 0.505/5 | -0.256/6 | 0.913/5 | -0.217/9 | 0.307/11 | -0.2/13 | | |
| 1.5 | -0.479/5 | 0.205/6 | -0.574/8 | 0.943/10 | -0.7/12 | | | | |
| 1.6 | -0.17/6 | 0.332/8 | -0.28/10 | | | | | | |
| 1.7 | -0.19/7 | 0.173/9 | | | | | | | |
| 1.8 | -0.1/8 | | | | | | | | |

состояний с главным квантовым числом $n \cong 10^1$ с ростом $n_{i,f}$ и ω и с уменьшением области аппроксимации необходимая точность обеспечивается меньшим числом членов разложения (40). Это позволяет использовать базис полиномов Чебышева для расчета тензора рассеяния сложным атомом в этом случае в том числе и при малых ρ .

Проиллюстрируем применение данного метода к расчету тензора рассеяния на конкретном примере. Рассчитаем исследованный недавно теоретически и экспериментально [18] сдвиг основного $5S$ -состояния атома рубидия на частоте неодимового лазера $\omega = 9434 \text{ см}^{-1}$. Поскольку расстройка до ближайшего уровня превышает 0.1 ат.ед., в реальных лазерных полях справедливо приближение изолированного уровня и, в соответствии с (4), поляризуемость α_{5S} следующим образом выражается через радиальные матричные элементы (6):

$$\alpha_{5S} = - [T(5, 0, \nu+1, 5, 0) + T(5, 0, \nu-1, 5, 0)] / 12. \quad (46)$$

Энергии виртуальных состояний равны $E_1^{+,-} = \pm \omega_n$. Экстраполяция данных рисунка дает $\lambda_0 = 0.8236$, $\lambda_1^+ = 1.26124$ и $\lambda_1^- = 0.945$, вследствие чего $\rho^+ = 1.5624$ и $\rho^- = 1.8786$. Интерполяция по табл. 1 дает

$$\begin{aligned} r^{1.5624} &= -0.22 + 0.3128r + 0.914r^2 - 0.27r^3 + 0.09r^4 - 0.024r^5 + \\ &+ 0.0061r^6 - 0.00012r^7 + 0.00084r^8 - 0.000045r^9, \\ r^{1.8786} &= -0.03235 + 0.1335r + 0.9196r^2 - 0.038r^3 + 0.0088r^4 - \\ &- 0.00015r^5 - 0.0003r^6 + 1.6 \cdot 10^{-4}r^7 - 2.9 \cdot 10^{-5}r^8 + 4.8 \cdot 10^{-6}r^9. \end{aligned} \quad (47)$$

Поскольку ν исходного и виртуальных состояний (а следовательно, и область r , вносящая вклад в интеграл (6)) имеет порядок ≈ 2 , в (47) нет необходимости учитывать старшие по δ члены из табл. 1, 2. Отброшенные члены вносят относительную поправку меньше 10^{-4} . Подставляя (47) в (45) и учитывая (20), имеем $\alpha_{5S} = 707$ ат.ед., что

находится в хорошем согласии с другими теоретическими $\alpha_{5S} = 692$ [3] и экспериментальными $\alpha_{5S} = 769 \pm 61$ [18] значениями.

Литература

1. А. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1969).
2. М. А. Преображенский, *Опт. и спектр.* **77**, 559 (1994).
3. Л. П. Рапопорт, Б. А. Зон, Н. Л. Манаков, *Теория многофотонных процессов в атомах*, Атомиздат, Москва (1978).
4. В. И. Ритус, *ЖЭТФ* **51**, 1544 (1966).
5. I. Epstein, *J. Chem. Phys.* **53**, 1881 (1970).
6. Н. Р. Kelly, *Phys. Rev.* **182**, 84 (1969).
7. М. Я. Амусья, Н. А. Черпаков, С. Г. Шапиро, *ЖЭТФ* **63**, 889 (1972).
8. M. Gavril, *Phys. Rev.* **163**, 147 (1967).
9. M. Marinescu, H. R. Sadeghpoure, and A. Dalgarno, *Phys. Rev. A* **49**, 5103 (1994); V. L. Yakhontov and K. Jungmann, in *Europhys. Conf. Abstracts*, (1996), p. 74.
10. N. L. Manakov and V. D. Ovsiannikov, *J. Phys. B* **10**, 569 (1976).
11. Н. Л. Манаков, В. А. Свиридов, А. Г. Файнштейн, *ЖЭТФ* **95**, 790 (1989).
12. В. М. Вайсберг, В. Д. Мур, В. С. Попов, А. В. Сергеев, *Письма в ЖЭТФ* **44**, 9 (1986).
13. Н. Б. Делоне, В. П. Крайнов, *ЖЭТФ* **83**, 2021 (1982); И. Л. Бейгман, *ЖЭТФ* **100**, 125 (1991); I. L. Beigman, L. A. Bureyeva, and R. H. Pratt, *Phys. Rev. A* **49**, 5833 (1994).
14. И. И. Собельман, *Введение в теорию атомных спектров*, Физматгиз, Москва (1963).
15. M. A. Preobragenskii, *Laser Phys.* **3**, 688 (1993).
16. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, Наука, Москва (1973).
17. К. Ланцош, *Практические методы прикладного анализа*, Физматгиз, Москва (1961).
18. K. D. Bonin and M. A. Kadan-Kelly, *Phys. Rev. A* **47**, 999 (1993).
19. C. E. Moore, in *National Bureau of Standards, Circular № 488*, Washington (1950).