

ЭФФЕКТЫ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ В РЕЛЯТИВИСТСКИХ РАСЧЕТАХ СТАТИЧЕСКОЙ ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ АТОМА ГЕЛИЯ

А. Деревянко, В. Р. Джонсон**

*Университет Нотр-Дам
Нотр Дам, IN 46556 США*

В. Д. Овсянников

*Воронежский государственный университет
394693, Воронеж, Россия*

В. Г. Пальчиков†

*Государственное предприятие
«Всероссийский научно-исследовательский институт физико-технических и радиотехнических измерений»
141570, Менделеево, Московская обл., Россия*

Д. Р. Плантэ‡

*Университет Стетсон
Де Ланд, FL 32720 США*

Г. фон Оппен§

*Технический университет
D-10623, Берлин, Германия*

Поступила в редакцию 20 июля 1998 г.

Для возбужденных состояний атома гелия $1s3p^3P_0$ и $1s3p^3P_2$ выполнены расчеты скалярных и тензорных компонент дипольных поляризуемостей с использованием релятивистского метода взаимодействия конфигураций и метода модельного потенциала. Вычисления приведенных матричных элементов для резонансных слагаемых в спектральном разложении поляризуемостей основывались на применении двухэлектронных базисных функций релятивистского гамильтониана атома, включающего кулоновское и брейтовское взаимодействия электронов. Сформулирован новый подход к определению параметров модельного потенциала Фьюса. Показано, что значения поляризуемостей чувствительны к выбору волновых функций, используемых в расчетах.

*A. Derevianko, W. R. Johnson, Department of Physics, Notre Dame University, Notre Dame, IN 46556 USA.

†E-mail: pal@kalium.physik.tu-berlin.de, bpt97@ftri.extech.msk.ru

‡D. R. Plante, Department of Mathematics & Computer Science, Stetson University, DeLand, FL 32720 USA.

§G. von Oppen, Institut für Atomare und Analytische Physik, Technische Universität, D-10623 Berlin, Deutschland.

1. ВВЕДЕНИЕ

Метод антикроссинга атомных уровней во внешнем поле является эффективным инструментом для прецизионных измерений интервалов тонкой и сверхтонкой структуры, а также ряда других спектроскопических констант — обменной энергии, диагональных и недиагональных матричных элементов для операторов спин-орбитальной связи и т. д. В недавней работе [1] исследовался $0^- \times 0^-$ -антикроссинг $1s3p^3P_J$ ($J = 0, 2$)-уровней гелия с применением лазерной спектроскопии высокого разрешения. В точке антикроссинга погрешность измерений интервала тонкой структуры $\delta = E_{3^3P_0} - E_{3^3P_2}$ составила ± 5 МГц, причем применение здесь микроволновой техники позволит снизить эту величину как минимум на два порядка. Тем не менее уже достигнутый в настоящее время уровень точности дает основание для ряда важных заключений, относящихся к оптимальному выбору теоретических подходов, описывающих воздействие электрических полей порядка 100–200 кВ/см на спектр атома гелия.

В частности, широко используемый в настоящее время полуэмпирический подход, позволяющий анализировать наблюдаемый спектр в терминах усредненных значений гамильтониана атома с учетом зависящих и не зависящих от спина релятивистских поправок порядка $\alpha^2 R_y$ [2, 3] (α — постоянная тонкой структуры), не требует учета эффектов высших порядков теории возмущений, необходимых для адекватной интерпретации результатов измерений. В этой связи в [1] была обоснована необходимость применения методов релятивистской квантовой механики и квантовой электродинамики для анализа измерений отношения δ к $\delta^{(0)}$ ($\delta^{(0)} = 8772.517(16)$ МГц — интервал тонкой структуры в отсутствие поля [4]) в точке антикроссинга $1s3p^3P_0$ - и $1s3p^3P_2$ -уровней гелия. Другим интересным следствием этой работы является возможность экспериментального исследования эффектов спин-спинового смешивания уровней гелия с различными значениями орбитального момента L одинаковой четности [5, 6].

Целью настоящей работы является теоретический анализ вклада релятивистских эффектов в расчетах скалярных и тензорных компонент дипольных поляризуемостей, определяющих сдвиг и расщепление $1s3p^3P_J$ ($J = 0, 2$)-уровней гелия. В работе использовались два альтернативных подхода, основанных на применении релятивистского метода конфигурационного взаимодействия [7] и метода модельного потенциала Фьюса [8].

2. УЧЕТ РЕЛЯТИВИСТСКИХ ЭФФЕКТОВ В РАСЧЕТАХ ДИПОЛЬНЫХ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЕЙ АТОМА ГЕЛИЯ

Сдвиг и расщепление уровня $|nJLM\rangle$ в однородном поле F описывается формулой

$$\Delta E_{nJLM} = -\frac{1}{2}\alpha_{nJLM}F^2, \quad (1)$$

в которой поляризуемость α_{nJLM} содержит скалярную, α_{nJL}^s , и тензорную, α_{nJL}^t , компоненты:

$$\alpha_{nJLM} = \alpha_{nJL}^s + \alpha_{nJL}^t \frac{3M^2 - J(J+1)}{J(2J-1)}. \quad (2)$$

С увеличением F расщепление уровней может достигать значения, сравнимого с расстоянием между близко расположенными уровнями с той же четностью (компонентами тонкой структуры атомного мультиплета). Поэтому в интересующем нас случае $1s3p^3P_0$ - и $1s3p^3P_2$ -уровней с $M = 0$ и напряженности поля F порядка нескольких сот кВ/см сдвиг уровней $\Delta E_{nJLM} = E - E_{nJLM}$ определяется из решений секулярного уравнения

$$\det \|\Delta E_{nJLM} \delta_{JJ'} - V_{JJ'}\| = 0. \tag{3}$$

При этом отличные от нуля недиагональные матричные элементы $V_{JJ'}$ соответствуют дипольным переходам между компонентами тонкой структуры во втором порядке теории возмущений по внешнему полю F .

Для получения формулы, описывающей зависимость δ от F , воспользуемся решениями уравнения (3) и определением скалярных и тензорных компонент поляризуемости (2), что в итоге приводит к результату

$$\begin{aligned} \delta &= \sqrt{\left[\delta^{(0)} - \frac{1}{2} F^2 (\alpha_{3^3P_0}^s - \alpha_{3^3P_2}^s + \alpha_{3^3P_1}^t) \right]^2 + 2F^4 (\alpha_{3^3P_1}^t)^2} \simeq \\ &\simeq \delta^{(0)} - \frac{1}{2} F^2 (\alpha_{3^3P_0}^s - \alpha_{3^3P_2}^s + \alpha_{3^3P_1}^t) + \frac{F^4}{\delta^{(0)}} (\alpha_{3^3P_1}^t)^2 + \dots \end{aligned} \tag{4}$$

Выражение (4) учитывает главную, «резонансную», часть гиперполяризуемости (поправки четвертого порядка по внешнему полю) взаимодействующих подуровней мультиплета 3^3P_J с проекцией полного момента $M = 0$. Вклад нерезонансной части в гиперполяризуемость не превышает нескольких процентов [9]. При выводе (4) учитывался факт, что матричный элемент $V_{JJ'}$ отличен от нуля при $J' = J \pm 1, J \pm 2$ и содержит лишь «тензорную» часть, зависящую от проекции M полного момента J . Если пренебречь мультиплетным расщеплением $E_{nJL}^{(0)} - E_{nJ'L}^{(0)}$ по сравнению с разностью энергий $E_{nJL}^{(0)} - E_{n'J'L}^{(0)}$ между различными мультиплетами с $n' \neq n$, то $V_{JJ'}$ можно выразить через тензорную поляризуемость $1s3p^3P_2$ -состояния. В указанном приближении V_{02} определяется соотношением¹⁾

$$V_{02} = -\frac{F^2}{\sqrt{2}} \alpha_{3^3P_2}^t. \tag{5}$$

Разность скалярных поляризуемостей $\alpha_{3^3P_0}^s - \alpha_{3^3P_2}^s$ в (4) определяется вкладом релятивистских эффектов и, следовательно, имеет порядок малости $\sim \alpha^2$. Заметим, что при $M = 0$ матричный элемент $V_{JJ \pm 1} \equiv 0$ (см., например, [10]), так что состояние 3^3P_1 остается изолированным, не примешиваясь к состояниям с $J = 0$ и $J = 2$.

Из формулы (4) также следует, что минимальное значение для δ в электрическом поле (антикроссинг подуровней тонкой структуры) достигается при

$$F = \bar{F} = \sqrt{\frac{2\delta^{(0)} (\alpha_{3^3P_0}^s - \alpha_{3^3P_2}^s + \alpha_{3^3P_1}^t)}{(\alpha_{3^3P_0}^s - \alpha_{3^3P_2}^s + \alpha_{3^3P_1}^t)^2 + 8 (\alpha_{3^3P_1}^t)^2}}. \tag{6}$$

¹⁾ Здесь и далее по тексту используется атомная система единиц.

Точные *ab initio* релятивистские расчеты величин $\alpha_{3^2P_0}^s - \alpha_{3^2P_2}^s, \alpha_{3^2P_2}^t$, входящих в формулы (4) и (6), представляют собой весьма трудоемкую задачу, связанную с вычислением спектральных сумм по полному набору невозмущенных состояний. Необходимость такого суммирования (независимо от общего подхода) возникает при определении возмущенных волновых функций или сдвигов энергии атомных уровней в рамках теории возмущений. Помимо прямого суммирования по дискретному и интегрирования по непрерывному спектрам промежуточных состояний, что в релятивистском случае крайне затруднительно, для эффективного вычисления такого рода спектральных сумм (составных матричных элементов) применяются в основном два способа: метод интегрирования неоднородных дифференциальных уравнений и метод, заключающийся в использовании формализма функций Грина.

В рамках первого подхода поляризуемость состояния $|0\rangle$ определяется формулой

$$\alpha_{|0\rangle} = -2\langle\Psi|D|\Psi_0\rangle, \quad (7)$$

в которой возмущенная волновая функция $|\Psi\rangle$ удовлетворяет неоднородному уравнению

$$(\hat{H} - E_0)\Psi = -D\Psi_0. \quad (8)$$

В формулах (7), (8) D — оператор дипольного момента, \hat{H} — релятивистский гамильтониан.

Существенным достоинством данного метода является возможность использования различных выражений для атомного потенциала при численном интегрировании уравнения (8), и расчеты могут быть выполнены не только для чисто кулоновского поля, но и в приближениях многоконфигурационного взаимодействия [7], Хартри—Фока—Дирака [11], а также в релятивистском приближении случайных фаз с обменом [12]. Наиболее точные релятивистские расчеты были представлены в [13] для поляризуемости основного состояния He-подобного атома с $2 \leq Z \leq 30$, однако подобные результаты для возбужденных состояний гелия с $L \neq 0$ в настоящее время отсутствуют.

Эффективность применения метода функций Грина в значительной степени определяется наличием удобных представлений для этих функций. Поскольку в релятивистском варианте выражения для функций Грина известны лишь для кулоновского поля, применение этого подхода, как правило, ограничивается кругом задач, в которых отличие потенциала от кулоновского несущественно или может быть учтено по теории возмущений [14, 15].

В настоящей работе для учета вклада релятивистских поправок в расчетах скалярных и тензорных компонент поляризуемостей использовалось резонансное приближение для составных матричных элементов второго порядка, т. е. в спектре промежуточных состояний выделялись слагаемые, соответствующие переходам без изменения главного квантового числа.

Например, для скалярной поляризуемости триплетного $|nJLM\rangle$ -состояния

$$\alpha_{nJL}^s = -\frac{2}{3(2J+1)} \sum_{n'J'L'} \frac{|\langle nJL||r||n'J'L'\rangle|^2}{E_{nJL} - E_{n'J'L'}} \quad (9)$$

резонансное слагаемое $\alpha_{nJL}^{s(r)}$ в (9) имеет вид

$$\alpha_{nJL}^{s(r)} = -\frac{2\beta_{nJL}^2}{3} \left\{ \sum_{J'} \frac{L(2J'+1)}{E_{nJL} - E_{nJ'L-1}} \left[\beta_{nJ'L-1} R_{nJL}^{nJ'L-1} \left\{ \begin{matrix} L & J & 1 \\ J' & L-1 & 1 \end{matrix} \right\} \right]^2 + \right.$$

$$+ \sum_{J'} \frac{(L+1)(2J'+1)}{E_{nJL} - E_{nJ'L+1}} \left[\beta_{nJ'L+1} R_{nJL}^{n'J'L+1} \left\{ \begin{matrix} L & J & 1 \\ J' & L+1 & 1 \end{matrix} \right\}^2 \right]. \quad (10)$$

Здесь $\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{matrix} \right\}$ — $6j$ -символ Вигнера [16], $R_{nJL}^{n'J'L'}$ — радиальные матричные элементы. В формуле (10) эффекты синглет-триплетного смешивания уровней учтены посредством ввода параметра

$$\beta_{nJL} = \begin{cases} \cos(\theta_{nL}), & J = L, \\ 1, & J \neq L, \end{cases} \quad (11)$$

где θ_{nL} — угол синглет-триплетного смешивания. В [17] отмечено, что θ_{nL} практически не зависит от n и типичные значения для $L = 1, 2, 3$ равны $0.02^\circ, 0.5^\circ, 30^\circ$ соответственно. Тензорная часть поляризуемости имеет аналогичную структуру, отличаясь от (10) лишь угловыми коэффициентами, и здесь для краткости не приводится.

В настоящей работе вычисления $\alpha_{nJL}^{s(r)}$ и $\alpha_{nJL}^{t(r)}$ осуществлялись с применением точных релятивистских результатов для радиальных интегралов, а для энергетических знаменателей использовались прецизионные экспериментальные данные [18]. Расчеты остальных слагаемых в (9) с $n' \neq n$ осуществлялись с применением нерелятивистских значений для радиальных матричных элементов оператора дипольного момента. Для этой цели использовались точные численные данные для сил осцилляторов переходов $s-p$ и $p-d$ в гелии, вычисленные с применением многопараметрических вариационных волновых функций [19, 20].

Применимость описанного выше подхода обосновывается прежде всего тем, что вклад состояний с $n' = n$ в (9) является численно доминирующим и составляет приблизительно 95% в случае возбужденных $1s3p^3P_J (J = 0, 2)$ -уровней гелия (см. ниже табл. 2, 3).

3. ВЫБОР БАЗИСНЫХ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ РАСЧЕТОВ

В последние годы метод конфигурационного взаимодействия успешно применялся для получения прецизионных волновых функций и матричных элементов в случае атомов с малым числом электронов, в частности, для гелиеподобных систем. В настоящей работе для вычисления приведенных матричных элементов, соответствующих резонансным членам разложения (10), использовалась техника расчета, представленная в [7, 13].

Волновые функции начального (I) и конечного (F) состояний записывались в виде

$$\Psi_{I(F)} = \sum_{k \geq l} C_{kl}^{I(F)} \Phi_{kl}. \quad (12)$$

Здесь Φ_{kl} — двухчастичные базисные функции с фиксированными значениями полного углового момента J , проекции M и четности. Весовые коэффициенты $C_{kl}^{I(F)}$ определялись из вариационного принципа с использованием усредненного по (12) релятивистского непарного (*no-pair*) гамильтониана, включающего кулоновский и брейтовский операторы межэлектронного взаимодействия [21, 22]. Для исключения вклада состояний с отрицательной энергией (позитронного спектра) двухчастичные операторы,

Таблица 1

Приведенные матричные элементы для оператора дипольного момента

Переход	Матричный элемент
$1s3p^3P_0 \rightarrow 1s3s^3S_1$	-6.4797
$1s3p^3P_2 \rightarrow 1s3s^3S_1$	-14.489
$1s3p^3P_0 \rightarrow 1s3d^3D_1$	8.2923
$1s3p^3P_2 \rightarrow 1s3d^3D_1$	1.8542
$1s3p^3P_2 \rightarrow 1s3d^3D_2$	7.1805
$1s3p^3P_2 \rightarrow 1s3d^3D_3$	16.994

Таблица 2

Вклады S - и D -состояний промежуточного спектра в поляризуемость $1s3p^3P_0$ -состояния гелия

n'	$1sn's^3S_1(\lambda_0 = 0.698)$	$1sn's^3S_1(\lambda_0 = -0.302)$	$1sn's^3S_1$	$1sn'd^3D_1$
2	-0.34	-1.67	-1.57	
3	-2377.93	-2682.56	-2638.45	18742.21
4	451.87	319.37	312.17	623.53
5	25.38	18.27	17.92	86.01
6	6.36	4.60	4.72	27.16
7	2.59	1.88	1.85	12.29
8	1.34	0.97	0.96	6.72
9	0.79	0.57	0.57	4.13
10	0.51	0.37	0.34	2.59
Сумма	-1888.6	-2337.7	-2301.50	19504.63

входящие в релятивистский гамильтониан, умножались на произведения одночастичных операторов проектирования на подпространства решений уравнения Дирака с положительной энергией [7].

Волновые функции (12) нормированы условием

$$\sum_{k \geq l} |C_{kl}^{I(F)}|^2 = 1. \quad (13)$$

Одночастичные базисные орбитали, используемые в методе конфигурационного взаимодействия, включают s -, p -, d -, f -, g -парциальные волны с применением сплайновой аппроксимации для каждой из них. Оценки скорости сходимости метода (для заданной точности расчета) описаны в [13, 22].

Результаты релятивистских расчетов для приведенных матричных элементов (без учета эффектов запаздывания для оператора дипольного момента) представлены в табл. 1.

В табл. 2, 3 приведены результаты для вкладов промежуточных S - и D -состояний в расчетах скалярных поляризуемостей $1s3p^3P_J$ ($J = 0, 2$)-состояний гелия. Отличие

Таблица 3

Вклады *S*- и *D*-состояний промежуточного спектра в поляризуемость $1s3p^3P_2$ -состояния гелия

n'	$1sn's^3S_1$	$1sn'd^3D_1$	$1sn'd^3D_2$	$1sn'd^3D_3$
2	-1.57			
3	-2638.76	187.32	2809.37	15735.95
4	312.15	6.23	93.52	523.74
5	17.92	0.86	12.90	72.25
6	4.72	0.27	4.07	22.81
7	1.85	0.12	1.84	10.32
8	0.96	0.07	1.01	5.65
9	0.57	0.04	0.62	3.47
10	0.34	0.03	0.39	2.17
Сумма	-2301.83	194.94	2923.72	16376.36

Таблица 4

Скалярные и тензорные поляризуемости атома гелия

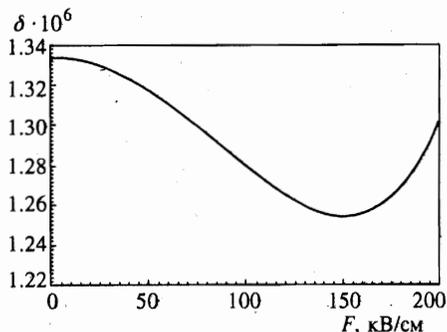
Величина	Численное значение
$\alpha_{3^3P_0}^s$	17203
$\alpha_{3^3P_2}^s$	17193
$\Delta\alpha = \alpha_{3^3P_0}^s - \alpha_{3^3P_2}^s$	10
$\frac{\alpha_{3^3P_2}^t}{F}$	351.65
	$0.29343 \cdot 10^{-4} =$
	$= 150.99 \text{ кВ/см}$

тензорной части поляризуемости $1s3p^3P_2$ -уровня от его скалярной компоненты состоит в следующем: вклады промежуточных состояний $1sn's^3S_1$, $1sn'd^3D_1$ имеют противоположный знак, а суммарный вклад состояний $1sn'd^3D_3$ содержит дополнительный численный множитель $-2/7$.

В табл. 4 суммированы данные численных расчетов скалярных и тензорных компонент поляризуемостей гелия. График зависимости δ от F в окрестности антикроссинга приведен на рисунке.

Заметим, что при использовании нерелятивистских вариационных значений для резонансных матричных элементов в (10) разность $\Delta\alpha$ остается практически неизменной: $\alpha_{3^3P_0}^s=17207$, $\alpha_{3^3P_2}^s=17198$, $\Delta\alpha=9$. Это обстоятельство объясняется тем, что основной вклад в $\Delta\alpha$ вносят релятивистские поправки для тонкой структуры уровней в энергетических знаменателях (12), а не релятивистские поправки для матричных элементов оператора дипольного момента (см. табл. 1).

Для тестирования представленных выше результатов нами проведены альтернативные расчеты поляризуемостей, основанные на применении метода функций Грина



Зависимость величины δ (в атомных единицах) от напряженности электрического поля F в окрестности анти-кроссинга \bar{F}

оптического электрона для суммирования по полному спектру промежуточных состояний в (9).

Важно подчеркнуть, что в конкретных вычислениях поляризуемостей большое значение имеет правильный выбор исходного аналитического представления для функций Грина $G_E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, позволяющего получить конечный результат в наиболее рациональном и удобном для дальнейших приложений виде. В настоящей работе используемая нами функция Грина для модельного потенциала Фьюса взята из работы [14]. Угловая часть $G_E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ представляет собой произведение сферических гармоник, а для радиальной части функции Грина $g_l(E; r_1, r_2)$ применялось разложение по функциям Штурма, обладающим только дискретным спектром [15]:

$$G_E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{lm} g_l(E; r_1, r_2) Y_{lm}(\mathbf{n}_1) Y_{lm}^*(\mathbf{n}_2), \quad (14)$$

$$g_l(E; r_1, r_2) = \frac{4Z}{\nu} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{U_{kl}(2Zr_1/\nu) U_{kl}(2Zr_2/\nu)}{k + \lambda_l + 1 - \nu}, \quad (15)$$

где $\nu = Z/\sqrt{-2E}$,

$$U_{kl}(x) = \sqrt{\frac{k!}{\Gamma(k+2+2\lambda_l)}} x^{\lambda_l} \exp\left(-\frac{x}{2}\right) L_k^{2\lambda_l+1}(x). \quad (16)$$

Радиальные волновые функции $R_{nl}(r)$ получаются из вычетов функций Грина в полюсах $g_l(E; r_1, r_2)$: $\nu = \nu_{nl} = n_r + \lambda_l + 1$; $n_r = 0, 1, 2, \dots$ — радиальное квантовое число, λ_l — эффективный орбитальный момент, ν_{nl} — эффективное главное квантовое число в формуле для энергии атомного состояния $|nl\rangle$

$$E_{nl} = -\frac{Z^2}{2\nu_{nl}^2}. \quad (17)$$

Здесь, а также в (15) Z — заряд остаточного иона. Явное выражение для $R_{nl}(r)$ совпадает по виду с водородоподобными волновыми функциями [23]:

$$R_{nl}(r) = \frac{2Z^{3/2}}{\nu_{nl}^2} U_{n_r, l} \left(\frac{2Zr}{\nu_{nl}} \right). \quad (18)$$

Параметр λ_l (l может соответствовать не только определенному угловому моменту, но и определенному набору спин-орбитальных квантовых чисел) определяется путем сравнения (17) с экспериментальным значением энергии самого низшего состояния валентного электрона с заданным l [23]. Радиальное квантовое число n_r этого состояния полагается равным нулю. Как показано в [8], λ_l достаточно хорошо воспроизводит весь экспериментальный спектр атома (слабой зависимостью λ_l от энергии уровня в большинстве случаев можно пренебречь).

При таком определении λ_l для атомных серий, наиболее низкими в которых являются основные или метастабильные состояния, погрешность расчета радиальных матричных элементов $\langle nl|r^L|n'l' \rangle$ с $L \geq 1$ с волновыми функциями (18) может достигать 50%. В связи с этим нами сформулирован модифицированный подход к определению n_r и λ_l в этих сериях [24], позволивший существенно уточнить расчеты спектроскопических характеристик атомов как в основных, так и в возбужденных состояниях. При этом радиальное квантовое число самого низкого (основного или метастабильного) состояния серии полагается равным единице, так что эффективный орбитальный момент λ_l приравнивается $\nu_g - 2$ (ν_g — эффективное главное квантовое число нижнего состояния). Заметим, что волновая функция нижнего уровня при $n_r = 1$ в точности совпадает с волновой функцией, получаемой по методу квантового дефекта в атомах [25].

Таким образом, наборы состояний атома со спин-орбитальными квантовыми числами основного и метастабильного уровней, строго говоря, являются неполными, поскольку не содержат состояния с $n_r = 0$. Следовательно, радиальные функции Грина в подпространствах указанных серий содержат дополнительные «мнимые» слагаемые с $n_r = 0$ и с эффективным главным квантовым числом $\nu_{im} = \nu_g - 1$. Энергия связи «мнимого» состояния, определяемая выражением (17), почти на порядок превышает энергию возбуждения любого уровня из серии, поэтому его вкладом в амплитуды оптических переходов можно пренебречь.

Следует также отметить, что волновая функция валентного электрона в состоянии $|nl\rangle$ будет иметь правильный знак в асимптотической области, дающей основной вклад в мультипольные матричные элементы, при домножении на дополнительный фазовый множитель $(-1)^k$, где $k = n - n_r - l - 1$.

Во втором и третьем столбцах табл. 2 приведены вклады промежуточных $1sn's^3S_1$ -состояний в скалярную поляризуемость $1s3p^3P_0$ -состояния, вычисленные с использованием «традиционного» и «модифицированного» подходов, дающих значения λ_0 , равные 0.698 и -0.302 соответственно. Из сравнения с данными прецизионных вариационных расчетов (четвертый столбец табл. 2) следует, что расхождение конечных результатов не превышает 2% при использовании значения $\lambda_0 = -0.302$, в то время как расчеты с $\lambda_0 = 0.698$ имеют погрешность более 20%.

Результаты расчетов поляризуемостей, основанные на применении функций Грина в методе модельного потенциала Фьюса, приведены в табл. 5. Численные различия данных табл. 4 и 5 обусловлены, с одной стороны, полуэмпирическим приближением метода модельного потенциала, а с другой, — учетом вклада непрерывного спектра в методе функций Грина. Интересно заметить, что результаты для разности скалярных поляризуемостей и для тензорной поляризуемости $1s3p^3P_2$ -состояния отличаются от приведенных в табл. 4 значений лишь на 10%. Чтобы получить численные значения разности скалярных поляризуемостей с точностью порядка 1%, расчеты радиальных интегралов следует проводить с точностью до пятого-шестого знака, поскольку, как следует из табл. 5, происходит взаимное сокращение первых трех значащих цифр.

Таблица 5

Скалярные и тензорные поляризуемости атома гелия,
рассчитанные методом модельного потенциала

Величина	Численное значение
$\alpha_{3^1P_0}^s$	17266
$\alpha_{3^1P_2}^s$	17255
$\Delta\alpha = \alpha_{3^1P_0}^s - \alpha_{3^1P_2}^s$	11
$\alpha_{3^1P_2}^t$	374.16
$\frac{t}{F}$	$0.28458 \cdot 10^{-4} =$ $= 146.45 \text{ кВ/см}$

Подобной потери точности можно избежать, разложив поляризуемости как функции энергии атомного уровня в ряд Тейлора. В этом случае расчет сведется к определению производных от поляризуемостей по энергии, которые могут быть выражены через дипольные матричные элементы третьего порядка с двумя функциями Грина, входящими, в частности, в выражение для гиперполяризуемости состояний атомов [26].

Близость численных результатов в табл. 4 и 5 не является случайной, поскольку метод модельного потенциала дает правильную зависимость в матричных элементах высших порядков для энергии атомных уровней [23] при условии использования точных (экспериментальных) значений для энергий подуровней тонкой структуры. Данное условие позволяет также учитывать вклады релятивистских и корреляционных эффектов в методе модельного потенциала. Кроме того, с помощью этого метода можно легко показать, что вклад состояний из полного набора, не учитывающихся в релятивистских расчетах (состояния континуума и дискретного спектра с $n' > 10$), в численные значения рассчитываемых величин, не превышает 0.2%.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 97-02-16407, международный грант с Немецким научно-исследовательским обществом 96-02-00257, 436 RUS 113/164/O(R,S)) и Национального научного фонда США (грант RNY 95-13179).

Литература

1. R. Schumann, M. Dammasch, U. Eichmann, Y. Kriescher, G. Ritter, and G. von Oppen, J. Phys. **30**, 2581 (1997).
2. D. R. Cok and S. R. Lundeen, Phys. Rev. A **19**, 1830 (1979).
3. D. R. Cok and S. R. Lundeen, Phys. Rev. A **24**, 3283 (1981).
4. H. D. Yang, P. McNicholl, and H. Metcalf, Phys. Rev. A **53**, 1725 (1996).
5. V. G. Pal'chikov and G. von Oppen, Phys. Scripta **52**, 366 (1995).
6. В. Г. Пальчиков, Г. фон Оппен, ЖЭТФ **110**, 876 (1996).
7. W. R. Johnson, D. R. Plante, and J. Sapirstein, Adv. in At. Mol. and Opt. Phys. **35**, 255 (1995).
8. G. Simons, J. Chem. Phys. **55**, 766 (1971).

9. A. Derevianko, W. R. Johnson, V. D. Ovsiannikov, V. G. Pal'chikov, D. R. Plante, and G. von Oppen, in *Proc. Int. Conf. on At. Phys. (ICAP-98, Windsor)* (1998), p. 168.
10. N. L. Manakov and V. D. Ovsiannikov, *J. Phys. B* **10**, 569 (1977).
11. W. R. Johnson and C. D. Lin, *Phys. Rev. A* **9**, 1486 (1974).
12. W. R. Johnson, D. Kolb, and K. N. Huang, *At. Data Nucl. Data Tables* **28**, 333 (1983).
13. W. R. Johnson and K. T. Cheng, *Phys. Rev. A* **53**, 1375 (1996).
14. С. А. Запрягаев, Н. Л. Манаков, В. Г. Пальчиков, *Теория многозарядных ионов с одним и двумя электронами*, Энергоатомиздат, Москва (1985).
15. N. L. Manakov, V. D. Ovsiannikov, and L. P. Rapoport, *Phys. Reports* **141**, 319 (1986).
16. Д. А. Варшалович, А. Н. Москалев, В. К. Херсонский, *Квантовая теория углового момента*, Наука, Ленинград (1974).
17. E. S. Chang, *Phys. Rev. A* **35**, 2777 (1987).
18. W. C. Martin, *Phys. Rev. A* **36**, 3575 (1987).
19. A. Kono and S. Hattori, *Phys. Rev. A* **29**, 2981 (1984).
20. M. K. Chen, *J. Phys.* **27**, 865 (1994).
21. M. H. Chen, K. T. Cheng, and W. R. Johnson, *Phys. Rev. A* **47**, 3692 (1993).
22. K. T. Cheng, M. H. Chen, W. R. Johnson, and J. Sapirstein, *Phys. Rev. A* **50**, 247 (1994).
23. Н. Л. Манаков, В. Д. Овсянников, Л. П. Рапопорт, *Опт. и спектр.* **38**, 206 (1975).
24. V. D. Ovsiannikov and V. G. Pal'chikov, in *Proc. Int. Conf. on At. Phys. (ICAP-98, Windsor)* (1998), p. 166.
25. M. J. Seaton, *Rep. Prog. Phys.* **46**, 167 (1983).
26. V. A. Davydkin and V. D. Ovsiannikov, *J. Phys. B* **19**, 2071 (1986).