

РАДИАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ДИАМАГНИТНЫХ УРОВНЕЙ В АТОМАХ: ЗАВИСИМОСТЬ ВЕРОЯТНОСТИ ПЕРЕХОДОВ ОТ НАПРЯЖЕННОСТИ МАГНИТНОГО ПОЛЯ

В. Д. Овсянников, В. В. Чернушкин*

*Воронежский государственный университет
394693, Воронеж, Россия*

Поступила в редакцию 4 марта 1999 г.

Исследуется влияние диамагнитного взаимодействия на вероятность радиационных переходов атома из расщепленных полем состояний. Выписаны аналитические выражения диамагнитных поправок к матричным элементам серий Лаймана и Бальмера, а также для переходов между произвольными невырожденными состояниями в водороде. Излагается теория возмущений для переходов из вырожденных диамагнитных состояний, основанная на разложении в ряд по полю собственных функций и собственных значений матрицы диамагнитного взаимодействия в подпространстве состояний с фиксированными главным и магнитным квантовыми числами. Действие поля приводит к изменению как коэффициентов суперпозиции, так и вырожденного базиса. Для отыскания аналитических выражений матричных элементов высших порядков используется штурмовское разложение редуцированной кулоновской функции Грина. Обсуждаются особенности частотной зависимости поправок к радиационным матричным элементам, коррелирующие со структурой диамагнитного спектра возбужденных уровней. Обнаружено селективное воздействие магнитного поля на диамагнитные компоненты линий излучения: с ростом напряженности поля усиление одних компонент сопровождается ослаблением других.

PACS: 32.60.+i; 32.70.Fw; 32.30.-г

1. ВВЕДЕНИЕ

Изменение характеристик атомного спектра в магнитном поле представляет собой фундаментальную проблему экспериментальной и теоретической физики со времени открытия эффекта Зеемана [1]. Расщепление, поляризация и интенсивности зеемановских линий достаточно полно описаны как классической, так и квантовомеханической теориями. Однако нелинейные эффекты воздействия магнитного поля на атом изучены сравнительно недавно. Работы, выполненные в этом направлении, касаются, главным образом, сдвига и расщепления атомных линий в низшем порядке по диамагнитному взаимодействию (см., например, обзор [2]). Недостаточное внимание к квадратичному по полю взаимодействию объяснялось слишком малой величиной вносимых им поправок к энергии атомных уровней в условиях, типичных для лабораторных экспериментов, при которых линейное по полю парамагнитное взаимодействие практически полностью определяет положение атомных линий в спектре, а диамагнитное дает относительно малую поправку для низших связанных состояний.

* E-mail: vit@ovd.vsu.ru

Ситуация существенно изменяется с ростом напряженности магнитного поля и/или энергии возбужденного состояния. Поэтому интерес к диамагнитной части оператора взаимодействия появился вместе с обнаружением астрономических объектов с сильными магнитными полями (белые карлики, нейтронные звезды), а также с развитием нового раздела физики атомов и молекул — спектроскопии высоковозбужденных ридберговских состояний [3]. К началу 80-х годов было проведено интенсивное исследование расщепления в первом порядке по диамагнитному взаимодействию для зеемановских состояний атомов водорода и щелочных металлов (обзор соответствующей литературы дан в работе [2]). Диамагнитные поправки второго порядка рассчитаны в [4] с помощью эффективного гамильтониана, использующего дополнительную симметрию возбужденных состояний атома водорода [5].

Расщепление на диамагнитные подуровни сопровождается перераспределением интенсивности испускаемых линий по всему расщепленному набору. Определение интенсивности отдельных компонент этого набора сводилось к расчету распределения дипольных сил осцилляторов, пропорционального вкладу в начальное и конечное состояния векторов с фиксированными угловыми моментами [2–4]. Поскольку волновые функции атома в поле определялись собственными векторами диамагнитной матрицы в низшем порядке, ни структура таких состояний (коэффициенты разложения по сферическим функциям), ни соответствующие им матричные элементы радиационных переходов от силы поля не зависели. Зависимость указанных характеристик от силы поля может быть обнаружена лишь при учете поправок высших порядков. Знание такой зависимости не только дополняет имеющуюся информацию о свойствах атома и его взаимодействии с полем, но и позволяет использовать ее для развития новых методов определения силы действующих на атом полей, а также для магнитоиндуцированного контроля интенсивности излучения.

Наряду с усилением или ослаблением интенсивности конкретной линии возможно появление новых линий, отсутствующих в спектре свободного атома. Диамагнитная часть оператора взаимодействия смешивает состояния одинаковой четности с различными орбитальными квантовыми числами, что приводит к появлению в магнитном поле B линий с правилами отбора для орбитального момента $|\Delta l| = 2L + 1$, $L = 1, 2, \dots$. Соответствующие дипольные матричные элементы пропорциональны B^{2L} . Таким образом, наряду с линиями излучения, соответствующими, например, дипольным переходам $p - s$, в магнитном поле возникают магнитоиндуцированные линии, соответствующие переходам $f - s$, $h - s$ и т. д., матричные элементы которых пропорциональны B^2, B^4, \dots

Специфическая ситуация возникает для переходов между водородоподобными состояниями. Оставшееся при учете только парамагнитного расщепления вырождение по орбитальному моменту полностью устраняется с учетом диамагнитного взаимодействия. При этом волновая функция каждого диамагнитного состояния представляет собой суперпозицию волновых функций с фиксированными орбитальными моментами определенной четности. Коэффициенты такой суперпозиции в нулевом приближении не зависят от поля. Тем не менее вклад каждого слагаемого в матричный элемент дипольного перехода между водородоподобными уровнями в поле появляется в строго определенной диаграмме теории возмущений для вырожденных состояний [6], так что, например, переходы $f - s$ также дают вклад, пропорциональный B^2 , как и для невырожденных состояний многоэлектронных атомов.

В настоящей работе рассчитываются поправки к матричным элементам диполь-

ных радиационных переходов между водородоподобными состояниями, индуцированные взаимодействием атома с постоянным магнитным полем. В разд. 2 получены общие формулы для поправок теории возмущений для невырожденных атомных уровней, которые могут быть использованы, в частности, для переходов между состояниями, соответствующими «циркулярным» орбитам электрона в кулоновском поле. Поправки первого порядка записаны через радиальные матричные элементы операторов дипольного момента и диамагнитного взаимодействия. Расчет матричных элементов выполнен аналитически с помощью штурмовского разложения для кулоновской функции Грина.

Магнитоиндуцированные поправки к матричным элементам радиационных переходов из вырожденных состояний водородоподобного атома рассматриваются в разд. 3. Учитывается влияние магнитного поля как на базисные функции, так и на коэффициенты их суперпозиции. В разд. 4 приводятся результаты численного расчета поправок к интенсивности зеемановских компонент излучения серий Лаймана и Бальмера. Анализируются магнитоиндуцированные поправки к далеким компонентам обеих серий, соответствующим радиационному распаду высоковозбужденных состояний.

2. ДИАМАГНИТНЫЕ ПОПРАВКИ К МАТРИЧНЫМ ЭЛЕМЕНТАМ ДИПОЛЬНЫХ ПЕРЕХОДОВ МЕЖДУ НЕВЫРОЖДЕННЫМИ СОСТОЯНИЯМИ

Вероятность W_{if} (интенсивность I_{if}) электродипольного излучения, соответствующего переходу атома между состояниями $|i\rangle$ и $|f\rangle$ с энергиями E_i и E_f , пропорциональна третьей (четвертой) степени частоты перехода $\omega_{if} = E_i - E_f$ и квадрату матричного элемента оператора дипольного момента $d_{if} = \langle i|d_z|f\rangle$ (см., например, [7]):

$$I_{if} \propto \omega_{if} W_{if} \propto \omega_{if}^4 |d_{if}|^2. \quad (1)$$

Под действием магнитного поля происходит изменение как частоты, так и матричного элемента перехода, так что зависимость интенсивности линии от напряженности поля B можно определить, зная зависимости от B для обоих сомножителей в (1). Для поля $B \ll B_0/n^3$ ($B_0 = 2.35 \cdot 10^5$ Тл, n — главное квантовое число атомного уровня) магнитоиндуцированные поправки к частотам и матричным элементам определяются по теории возмущений. При этом для центральной (несмещенной) зеемановской линии с поляризацией, параллельной магнитному полю (π -поляризация), и частотный сдвиг, и изменение матричного элемента квадратичны по полю. Для боковых линий с поляризацией, перпендикулярной магнитному полю (σ -поляризация), основной вклад в изменение интенсивности в слабых полях вносят линейные поправки к частоте линий. Тем не менее и для этих линий знание квадратичных поправок может быть важным, особенно если в переходе участвует состояние с большим главным квантовым числом. Поскольку поправки к частотам атомных линий изучены достаточно подробно [2, 4, 6], ограничимся далее рассмотрением поправок к матричным элементам, которые до настоящего времени в литературе не обсуждались.

Оператор взаимодействия атома с постоянным магнитным полем V содержит два слагаемых, $V_B = V_m + V_D$, где¹⁾

$$V_m = -mB \quad (2)$$

¹⁾ В работе используется атомная система единиц.

— магнитодипольное взаимодействие, $\mathbf{m} = -(\mathbf{L} + 2\mathbf{S})/2$ — оператор магнитного дипольного момента (постоянная тонкой структуры $\alpha \approx 1/137$ включена в определение единичного магнитного поля B_0),

$$V_D = \frac{B^2}{12} r^2 \left[1 - C_{20} \left(\frac{\mathbf{r}}{r} \right) \right] \quad (3)$$

— диамагнитное взаимодействие, r и \mathbf{r}/r — соответственно, радиальная и угловые переменные атома. В одноэлектронном приближении радиус-вектор \mathbf{r} определяет положение внешнего электрона относительно атомного ядра ($C_{20}(\mathbf{r}/r)$ — модифицированная сферическая функция), а $\mathbf{L} = \mathbf{l}$ и $\mathbf{S} = \mathbf{s}$ — орбитальный и спиновый моменты валентного электрона.

Если пренебречь влиянием спина на спектр энергий E_n невозмущенного атома и учесть независимость радиационных переходов от спина, оператор (2) можно включить в основной гамильтониан, оставив в качестве возмущения только диамагнитное взаимодействие (3). При этом волновые функции невозмущенного базиса не изменяются, а энергии расщепляются по магнитному квантовому числу, $E_{nm} = E_n + mB$. Поскольку оператор диамагнитного взаимодействия при действии на волновую функцию не изменяет магнитного квантового числа, можно строить теорию возмущений для него в подпространстве состояний с фиксированным m (в дальнейшем считаем m положительным).

Предположим, что невырожденные начальное и конечное состояния в (1) в отсутствие магнитного поля совпадают с состояниями $|1\rangle$ и $|0\rangle$ (с энергиями E_1 и E_0). Тогда уравнения для волновой функции и энергии атома в поле могут быть записаны в удобном для итерации интегральном виде с помощью функции Грина, $G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ невозмущенного атома [8]

$$\begin{aligned} E_{i(f)} &= E_{1(0)} + \langle 1(0) | V_D | i(f) \rangle, \\ |i(f)\rangle &= |1(0)\rangle - G'_{E_{i(f)}} V_D | i(f) \rangle. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь

$$G'_{E_{i(f)}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_{E_{i(f)}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \frac{\langle \mathbf{r} | 1(0) \rangle \langle 1(0) | \mathbf{r}' \rangle}{E_{1(0)} - E_{i(f)}} \quad (5)$$

— редуцированная функция Грина.

Используя стандартную итерационную процедуру теории возмущений для решения уравнений (4), получим разложения в ряд по степеням малого параметра $B^2 \ll 1$ для волновых функций и энергий, из которых можно получить степенные ряды для частоты и матричного элемента перехода:

$$\omega_{if}(B) = \omega_{10} \left(1 + \sum_{s=1}^{\infty} w_{10}^{(s)} B^{2s} \right), \quad d_{if}(B) = d_{10} \left(1 + \sum_{s=1}^{\infty} q_{10}^{(s)} B^{2s} \right). \quad (6)$$

Коэффициент $w_{10}^{(s)}$ в разложении для частоты представляет собой отношение к невозмущенной частоте ω_{10} разности диамагнитных восприимчивостей $\chi_0^{(s)} - \chi_1^{(s)}$, определяющих поправки s -го порядка к энергии нижнего и верхнего уровней, $\Delta E_{f(i)}^{(s)} = -\chi_{0(1)}^{(s)} B^{2s} / 2s!$ [9]:

$$w_{10}^{(s)} = \frac{\chi_0^{(s)} - \chi_1^{(s)}}{2s! \omega_{10}}. \quad (7)$$

Аналитические выражения для восприимчивостей первого порядка $\chi_{nlm}^{(1)}$ невырожденных водородоподобных состояний (состояний с $m \leq l < n \leq m+4$ — наиболее низких в зеemanовском наборе с фиксированным магнитным квантовым числом, называемых состояниями с циркулярными или почти циркулярными орбитами) нетрудно получить из диагональной части матричного элемента оператора V_D (см., например, [2-4]):

$$V_{ll'} = \langle nlm | V_D | nl'm \rangle = -\frac{B^2}{2} v_{ll'}^{(1)}, \quad (8)$$

$$v_{ll'}^{(1)} = -\frac{(l^2 + l - 1 + m^2)n^2}{4Z^2(2l-1)(2l+3)} [5n^2 + 1 - 3l(l+1)] \delta_{ll'} +$$

$$+ \left\{ \frac{[(l+1)^2 - m^2][(l+2)^2 - m^2]}{(2l+1)(2l+3)^2(2l+5)} [n^2 - (l+1)^2][n^2 - (l+2)^2] \right\}^{1/2} \frac{5n^2}{8Z^2} \delta_{l', l+2} +$$

$$+ \left\{ \frac{[(l-1)^2 - m^2][l^2 - m^2]}{(2l-3)(2l-1)^2(2l+1)} [n^2 - (l-1)^2][n^2 - l^2] \right\}^{1/2} \frac{5n^2}{8Z^2} \delta_{l', l-2},$$

где $\delta_{ll'}$ — символ Кронекера.

Разложение тензора $\chi^{(2)}$ на неприводимые части для невырожденных уровней многоэлектронных атомов дано в [9], где также рассчитаны численные значения неприводимых компонент этого тензора для s -, p - и d -состояний щелочных элементов. В работе [6] предложен метод расчета $\chi^{(2)}$ в высоковозбужденных ридберговских состояниях. Численные расчеты восприимчивостей $\chi^{(s)}$ очень высоких порядков (вплоть до $s = 75$) уровней водорода с главным квантовым числом $n \leq 3$ выполнены в работе [10]. Аналитические выражения для восприимчивостей третьего порядка в невырожденных состояниях водорода с произвольными n получены в работе [11].

Кроме теории возмущений в расчетах энергии атомных уровней в магнитном поле использовались и другие методы, позволяющие определить изменение радиационных частот в полях, выходящих за рамки применимости теории возмущений (см., например, [12-15]). Таким образом, в настоящее время имеется достаточно широкий набор аналитических и численных методов для расчета изменения частот радиационных переходов атомов в магнитном поле, а следовательно, для определения поправок (7). Вопрос же об изменении в магнитном поле матричного элемента $d_{if}(B)$ до сих пор не обсуждался.

Ответ на этот вопрос может быть получен на основе интегральных уравнений (4). Разлагая волновые функции начального и конечного состояний по степеням оператора (3), коэффициенты $q_{10}^{(s)}$ в (6) можно представить в виде отношения матричного элемента s -го порядка к невозмущенному. В частности, для $s = 1$ (в дальнейшем ограничимся поправкой первого порядка $q_{10}^{(1)} \equiv q_{10}$, опуская индекс порядка (s)) имеем

$$q_{10} = q_{10}(1) + q_{10}(0), \quad (9)$$

где

$$q_{10}(1) = -\frac{\langle 1 | V_D G'_{E_1} d_z | 0 \rangle}{B^2 d_{10}} \quad (10)$$

определяет вклад, обусловленный изменением под действием поля волновой функции верхнего уровня |1), слагаемое

$$q_{10}(0) = - \frac{\langle 1|d_z G'_{E_0} V_D|0\rangle}{B^2 d_{10}} \quad (11)$$

связано с изменением волновой функции нижнего уровня |0).

После интегрирования по угловым переменным валентного электрона величины (10) и (11) можно представить в виде отношения радиальных матричных элементов второго и первого порядков операторов электродипольного и диамагнитного взаимодействий (r и r^2). В частности, для π -перехода из $|nlm\rangle$ - в $|n'l'm\rangle$ -состояние с $m = l' = l - 1$ имеем

$$q_{nl,n'l'}^\pi(nl) = - \frac{l}{4(2l+3)} \frac{\langle nl|r^2 g_l^{(n)}(r, r')r'|n'l'\rangle}{\langle nl|r|n'l'\rangle},$$

$$q_{nl,n'l'}^\pi(n'l') = - \frac{l}{4(2l+1)} \frac{(2l+3)\langle nl|r g_{l-1}^{(n')}(r, r')r'^2|n'l'\rangle - 2\langle nl|r g_{l+1}^{(n')}(r, r')r'^2|n'l'\rangle}{(2l+3)\langle nl|r|n'l'\rangle}. \quad (12)$$

Аналогичные выражения для σ -перехода $|nlm\rangle \rightarrow |n'l'm\rangle$, где $m' = l' = m - 1 = l - 1$, имеют вид

$$q_{nl,n'l'}^\sigma(nl) = - \frac{l+1}{4(2l+3)} \frac{\langle nl|r^2 g_l^{(n)}(r, r')r'|n'l'\rangle}{\langle nl|r|n'l'\rangle},$$

$$q_{nl,n'l'}^\sigma(n'l') = - \frac{l}{4(2l+1)} \frac{\langle nl|r g_{l-1}^{(n')}(r, r')r'^2|n'l'\rangle}{\langle nl|r|n'l'\rangle} - \frac{\langle nl|r g_{l+1}^{(n')}(r, r')r'^2|n'l'\rangle}{4(2l+1)(2l+3)\langle nl|r|n'l'\rangle}. \quad (13)$$

В этих выражениях $g_{l_i}^{(n)}(r, r')$ — редуцированная радиальная функция Грина в подпространстве состояний валентного электрона с орбитальным моментом l_i [8].

Для переходов между водородоподобными состояниями в атомах все радиальные матричные элементы в выражениях (12), (13) могут быть вычислены аналитически и представлены в виде функций главных и орбитальных квантовых чисел. Для матричных элементов первого порядка эти выражения представляются формулами Гордона (см., например, [16]). С помощью штурмовского разложения функции Грина кулоновского потенциала заряда Z [6, 9, 11],

$$g_l^{(n)}(r, r') = \frac{4Z}{n} \left\{ \sum_{k \neq n_r}^{\infty} \frac{k!}{(k+2l+1)!} \frac{f_{kl}(2Zr/n) f_{kl}(2Zr'/n)}{k+l+1-n} + \frac{n_r!}{(n+l)!n} \left[\frac{5}{2} f_{n_r,l} \left(\frac{2Zr}{n} \right) \times \right. \right.$$

$$\left. \times f_{n_r,l} \left(\frac{2Zr'}{n} \right) + r \frac{df_{n_r,l}(2Zr/n)}{dr} f_{n_r,l} \left(\frac{2Zr'}{n} \right) + f_{n_r,l} \left(\frac{2Zr}{n} \right) r' \frac{df_{n_r,l}(2Zr/n)}{dr'} \right] \left. \right\}, \quad (14)$$

для матричных элементов второго порядка можно получить выражения, аналогичные формулам Гордона. Такая возможность обязана взаимной ортогональности функций Штурма

$$f_{kl}(x) = e^{-x/2} x^l L_k^{2l+1}(x) \quad (15)$$

и радиальной волновой функции

$$R_{nl}(r) = \frac{2Z^{3/2}}{n^2} \sqrt{\frac{n_r!}{(n+l)!}} f_{n_r l} \left(\frac{2Zr}{n} \right), \quad (16)$$

следующей из свойств ортогональности полиномов Лагерра $L_k^\alpha(x)$ [17]. Это свойство обрывает бесконечный ряд в (14), оставляя в нем конечное число слагаемых. В частности,

$$\begin{aligned} & \left\langle f_{kl} \left(\frac{2Zr}{n} \right) \middle| r^2 \middle| f_{k'l} \left(\frac{2Zr}{n} \right) \right\rangle = \\ & = \left(\frac{n}{2Z} \right)^5 \int_0^\infty e^{-x} x^{2l+4} L_k^{2l+1}(x) L_{k'}^{2l+1}(x) dx = \left(\frac{n}{2Z} \right)^5 \frac{(k+2l+1)!}{k!} \left\{ -(k-2)_3 \delta_{k'k-3} + \right. \\ & + 6(k+l)(k-1)_2 \delta_{k'k-2} - 3k[5k(k+2l+1) + 4l(l+1) + 2] \delta_{k'k-1} + \\ & + [(k+2l+2)_3 + 9k(k+2l+2)_2 + 9(k-1)_2(k+2l+2) + (k-2)_3] \delta_{k'k} - \\ & - 3(k+2l+2)[5k(k+2l+3) + 4l^2 + 14l + 12] \delta_{k'k+1} + \\ & \left. + 6(k+l+2)(k+2l+2)_2 \delta_{k'k+2} - (k+2l+2)_3 \delta_{k'k+3} \right\}, \quad (17) \end{aligned}$$

здесь $(a)_s = a(a+1)\dots(a+s-1)$ — символ Похгаммера. Заметим, что условие ортогональности выполняется только при совпадении энергии исходного (или конечного) состояния с энергией функции Грина.

Таким образом, после интегрирования по радиальной переменной оператора V_D с двумя функциями Штурма (15) в разложении (14) остается шесть слагаемых, каждое из которых подобно радиальному матричному элементу дипольного радиационного перехода первого порядка и имеет индекс k , отличающийся от радиального квантового числа $n_r = n-l-1$ не более чем на три единицы. В отличие от (17) аргументы функций Штурма в таком матричном элементе различны, так как энергии начального (конечного) и промежуточного (функции Грина) состояний не совпадают. Такой матричный элемент удобно выразить через гипергеометрическую функцию двух переменных — функцию Аппеля F_2 [17], представляемую двукратной суммой с числом слагаемых, зависящим от радиальных квантовых чисел верхнего и нижнего уровней:

$$\begin{aligned} \left\langle f_{kl} \left(\frac{2Zr}{n} \right) \middle| r \middle| f_{k'l'} \left(\frac{2Zr}{n'} \right) \right\rangle & = \left(\frac{nn'}{4Z^2} \right)^2 \frac{(k+b)!(k'+b')!}{k!k'!} \frac{a!}{b!b'!} x^{l+2} (x')^{l'+2} \times \\ & \times F_2(a+1; -k, -k'; b+1, b'+1; x, x'). \quad (18) \end{aligned}$$

Здесь введены обозначения:

$$a = l+l'+3, \quad b = 2l+1, \quad b' = 2l'+1, \quad x = 2n'/(n+n'), \quad x' = 2n/(n+n').$$

Матричные элементы второго порядка представляются в виде суперпозиции выражений типа (18), в которых один из целых параметров, k или k' , совпадает с радиальным квантовым числом верхнего $n_r = n-l-1$ или нижнего $n'_r = n'-l'-1$ уровня, а второй — с индексом суммирования ряда в (14). В практических расчетах радиальное квантовое число нижнего уровня обычно невелико, поэтому ряд F_2 удобно представить в виде суммы $n'_r + 1$ гипергеометрических функций Гаусса вида

$$F_2(a+1; -k, -n'_r; b+1, b'+1; x, x') = \sum_{s=0}^{n'_r} \frac{(a+1)_s (-n'_r)_s}{s!(b'+1)_s} (x')^s {}_2F_1(a+1+s, -k; b+1; x).$$

Так как $N_s = a + s - b = s + l' - l + 2$ — целое положительное число ($l' = l \pm 1$), то ${}_2F_1$ можно записать в виде суммы $N_s + 1$ степенных выражений от аргумента x [17]:

$${}_2F_1(a+1+s, -k; b+1; x) = (1-x)^{k-N_s} \sum_{s'=0}^{N_s} \frac{(b+k+1)_{s'} (-N_s)_{s'}}{s'!(b'+1)_{s'}} (x)^{s'}.$$

В результате матричный элемент первого порядка $\langle n'l | r | n'l' \rangle$ можно представить в виде формулы Гордона, а для поправочных факторов (10)–(13) можно получить дробно-рациональные выражения, зависящие от главных и орбитальных квантовых чисел начального и конечного состояний. Для линий серии Лаймана ($n' = 1, l' = 0$) эти выражения имеют вид

$$\begin{aligned} q_{np,1s}^\pi(np) &= \frac{1}{2} q_{np,1s}^\sigma(np) = \frac{n^4(15n^8 - 80n^6 + 152n^4 - 84n^2 + 189)}{60Z^4(n^2 - 1)^3}, \\ q_{np,1s}^\pi(1s) &= \frac{79n^6 - 677n^4 + 269n^2 - 55}{120Z^4(n^2 - 1)^3}, \\ q_{np,1s}^\sigma(1s) &= \frac{113n^6 - 1089n^4 + 263n^2 - 55}{120Z^4(n^2 - 1)^3}, \\ q_{np,1s}^\pi &= q_{np,1s}^\pi(np) + q_{np,1s}^\pi(1s) = \frac{30n^8 - 100n^6 + 74n^4 + 159n^2 - 55}{120Z^4(n^2 - 1)}, \\ q_{np,1s}^\sigma &= q_{np,1s}^\sigma(np) + q_{np,1s}^\sigma(1s) = \frac{60n^{10} - 260n^8 + 348n^6 + 125n^4 - 208n^2 + 55}{120Z^4(n^2 - 1)^2}. \end{aligned} \tag{19}$$

Аналогичные соотношения для переходов $|np\rangle \rightarrow |2s\rangle$ серии Бальмера ($n' = 2, l' = 0$) таковы:

$$\begin{aligned} q_{np,2s}^\pi(np) &= \frac{1}{2} q_{np,2s}^\sigma(np) = \frac{n^4(15n^8 - 280n^6 + 1684n^4 - 3168n^2 + 12096)}{60Z^4(n^2 - 4)^3}, \\ q_{np,2s}^\pi(2s) &= \frac{2(451n^6 - 6316n^4 + 15184n^2 - 13120)}{15Z^4(n^2 - 4)^3}, \\ q_{np,2s}^\sigma(2s) &= \frac{2(507n^6 - 8172n^4 + 15568n^2 - 13120)}{15Z^4(n^2 - 4)^3}, \\ q_{np,2s}^\pi &= q_{np,2s}^\pi(np) + q_{np,2s}^\pi(2s) = \frac{15n^8 - 160n^6 + 164n^4 + 4312n^2 - 6560}{60Z^4(n^2 - 4)}, \\ q_{np,2s}^\sigma &= q_{np,2s}^\sigma(np) + q_{np,2s}^\sigma(2s) = \frac{15n^{10} - 220n^8 + 804n^6 + 2076n^4 - 12288n^2 + 13120}{30Z^4(n^2 - 4)^2}. \end{aligned} \tag{20}$$

Для переходов $|ns\rangle \rightarrow |2p\rangle$ имеем (далее приводим только суммарный коэффициент, учитывающий вклады и верхнего, и нижнего уровней, $q^{\pi,\sigma} = q^{\pi,\sigma}(n) + q^{\pi,\sigma}(n')$)

$$\begin{aligned} q_{ns,2p}^\pi &= -\frac{100n^8 - 675n^6 + 1028n^4 - 5088n^2 + 7680}{120Z^4(n^2 - 4)}, \\ q_{ns,2p}^\sigma &= \frac{125n^{10} - 1630n^8 + 5224n^6 + 9280n^4 - 56064n^2 + 61440}{120Z^4(n^2 - 4)^2}. \end{aligned} \tag{21}$$

Для переходов $|ndm\rangle \rightarrow |2pm'\rangle$ суммарные коэффициенты таковы:

$$\begin{aligned} q_{nd0,2p0}^{\pi} &= \frac{1565n^8 - 20040n^6 + 50512n^4 + 196608n^2 - 344064}{5376Z^4(n^2 - 4)}; \\ q_{nd1,2p0}^{\sigma} &= \frac{15n^{10} - 268n^8 + 1392n^6 - 128n^4 - 8448n^2 + 10752}{42Z^4(n^2 - 4)^2}; \\ q_{nd1,2p1}^{\pi} &= \frac{15n^8 - 208n^6 + 560n^4 + 3008n^2 - 5376}{42Z^4(n^2 - 4)}; \\ q_{nd2,2p1}^{\sigma} &= \frac{45n^{10} - 804n^8 + 4176n^6 + 512n^4 - 34304n^2 + 43008}{84Z^4(n^2 - 4)^2}; \\ q_{nd0,2p1}^{\sigma} &= \frac{835n^{10} - 16580n^8 + 92048n^6 + 70976n^4 - 1081344n^2 + 1376256}{2688Z^4(n^2 - 4)^2}. \end{aligned} \quad (22)$$

С учетом соотношения симметрии для коэффициентов $q_{nlm,n'l'm'} = q_{nl-m,n'l'-m'}$, следующего из инвариантности оператора V_D относительно инверсии вектора \mathbf{B} , выражения (19)–(22) полностью определяют магнитоиндуцированные поправки к матричным элементам переходов серий Лаймана и Бальмера. Суммарные коэффициенты имеют общую для всех переходов асимптотическую зависимость от главного квантового числа n верхнего уровня: $q_{nl,n'l'} \sim n^6$. При этом основной вклад вносят поправки, обусловленные воздействием магнитного поля на верхнее состояние. Поправки к волновой функции нижнего уровня, определяющие слагаемое $q_{nl,n'l'}(n'l')$, при $n \gg 1$ практически не зависят от n и пренебрежимо малы по сравнению с $q_{nl,n'l'}(nl)$.

Интересным свойством величин q является одинаковая степень множителя $n^2 - n'^2$ в знаменателях всех выражений (19)–(22): третья — для отдельных компонент $q^{\pi,\sigma}(nl)$, $q^{\pi,\sigma}(n'l')$, вторая — для суммарной величины $q^{\sigma} = q^{\sigma}(nl) + q^{\sigma}(n'l')$, первая — для $q^{\pi} = q^{\pi}(nl) + q^{\pi}(n'l')$. Данная закономерность может служить одним из критериев правильности подобных выражений и для других переходов.

В таблице 1 приведены численные значения компонент $q_{nlm,n'l'm'}^{\pi,\sigma}(nl)$, $q_{nlm,n'l'm'}^{\pi,\sigma}(n'l')$, соответствующие вкладам магнитоиндуцированных поправок к верхнему и нижнему уровням дипольных переходов атома водорода из np - в $1s$ -, $2s$ -состояния и из ns -, nd_m -состояний в $2p_{m'}$ -состояния ($m = 0, 1, 2$, $m' = 0, 1$). В силу простой связи между поправками для π - и σ -переходов между p - и s -состояниями, как это следует из общих выражений (12), (13), $q_{np,n's}^{\sigma}(np) = 2q_{np,n's}^{\pi}(np)$, приводится только значение $q_{np,n's}^{\pi}(np)$. Данные табл. 1 наглядно демонстрируют соотношение между вкладами поправок к волновым функциям верхнего и нижнего состояний в суммарную поправку к матричному элементу, которая может быть получена сложением чисел из двух соседних строк. Как видно из таблицы, при $n \gg n'$ вкладом поправки к нижнему уровню можно пренебречь. Приведенные данные могут быть использованы непосредственно для матричных элементов переходов между невырожденными состояниями ($|2p\rangle, |3p\rangle \rightarrow |1s\rangle, |3p\rangle \rightarrow |2s\rangle, |3d_{1,2}\rangle, |4d_{1,2}\rangle \rightarrow |2p_{0,1}\rangle$). Остальные определяют поправку только частично, поскольку магнитное поле перемешивает высоковозбужденные уровни водорода так, что угловой момент перестает быть интегралом движения даже в нулевом приближении (см. следующий раздел данной статьи). Обратим внимание на положительный знак магнитоиндуцированной поправки к матричным элементам всех представленных в таблице переходов, за исключением $q_{ns,2p}^{\pi}$. Таким образом, для переходов из невырожденных состояний в сериях Лаймана и Бальмера магнитное поле увеличивает абсолютную величину радиационного матричного элемента.

Таблица 1

Множители $q^{\pi,\sigma}$ для магнитоиндуцированных поправок к матричным элементам радиационных π - и σ -переходов $np - 1s$, $2s$ и nd_m , $ns - 2p_m$ в атомах водорода; $(k) = 10^k$

q	$n = 2$	3	4	5	6	7	8
$q_{np,1s}^{\pi}(n)$	9.926	136.7	876.2	3.543(3)	1.091(4)	2.801(4)	6.315(4)
$q_{np,1s}^{\pi}(1s)$	-1.468	0.0833	0.3815	0.4931	0.5477	0.5788	0.5983
$q_{np,1s}^{\sigma}(1s)$	-2.838	-0.0573	0.4647	0.6580	0.7522	0.8057	0.8391
$q_{np,2s}^{\pi}(n)$		154.3	564.6	2.778(3)	9.368(3)	2.522(4)	5.846(4)
$q_{np,2s}^{\pi}(2s)$		-63.23	35.51	49.90	54.48	56.52	57.60
$q_{np,2s}^{\sigma}(2s)$		-176.4	17.02	45.93	55.38	59.66	61.99
$q_{ns,2p0}^{\pi}(n)$		-137.7	-2.706(3)	-1.149(4)	-3.582(4)	-9.245(4)	-2.090(5)
$q_{ns,2p0}^{\pi}(2s)$		-210.9	-56.89	-28.37	-17.75	-12.50	-9.482
$q_{ns,2p1}^{\sigma}(2s)$		-421.8	-113.8	-56.75	-35.50	-25.01	-18.96
$q_{nd0,2p0}^{\pi}(n)$		55.39	538.2	2.934(3)	1.023(4)	2.806(4)	6.576(4)
$q_{nd0,2p0}^{\pi}(2p)$		-11.65	23.11	28.00	29.50	30.15	30.49
$q_{nd1,2p0}^{\sigma}(n)$		117.6	568.9	3.360(3)	1.206(4)	3.351(4)	7.913(4)
$q_{nd1,2p0}^{\sigma}(2p)$		-54.27	44.44	55.82	58.75	59.82	60.30
$q_{nd1,2p1}^{\pi}(n)$		117.6	568.9	3.360(3)	1.206(4)	3.351(4)	7.913(4)
$q_{nd1,2p1}^{\pi}(2p)$		-51.71	60.44	74.54	78.50	80.08	80.85
$q_{nd2,2p1}^{\sigma}(n)$		176.4	853.3	5.040(3)	1.809(4)	5.027(4)	1.187(5)
$q_{nd2,2p1}^{\sigma}(2p)$		-80.13	74.67	93.09	98.00	99.86	110.72
$q_{nd0,2p1}^{\sigma}(n)$		183.3	345.8	2.533(3)	9.688(3)	2.766(4)	6.630(4)
$q_{nd0,2p1}^{\sigma}(2p)$		-108.5	88.89	111.6	117.5	119.6	120.6

Общие формулы для коэффициента q , определяющего поправки к матричным элементам переходов между невырожденными $|nlm\rangle$ -состояниями с произвольными главными квантовыми числами, тоже нетрудно получить из выражений для соответствующих радиальных интегралов. Все эти переходы сопровождаются понижением на единицу орбитального квантового числа, $|nlm\rangle \rightarrow |n' l - 1 m'\rangle$, при неизменном магнитном, $m' = m$, для π -переходов и при уменьшении на единицу магнитного квантового числа, $m' = m - 1$, для σ -переходов. Основной характеристикой этих переходов, как и в соотношениях (19)–(22), является главное квантовое число n верхнего уровня; орбитальное l и магнитное m отличаются от него не более чем на три единицы: $l = n - 1, n - 2, m = l, l - 1$. Поскольку $l - l' = 1$, а $m - m' = 0, 1$, изменение главного квантового числа в таких переходах тоже ограничено условием $n - n' = 1, 2$. Таким образом, в общем случае имеются три типа π -переходов и шесть типов σ -переходов между невырожденными состояниями, каждое из которых можно охарактеризовать набором из трех чисел:

$$\nu_l = n - l, \quad \nu_m = n - m \quad \nu_{n'} = n - n'.$$

В табл. 2 приводятся аналитические выражения для факторов $q^{\pi,\sigma} \equiv q^{(1)}$, определяющих квадратичные по полю поправки в (6) к матричным элементам переходов между невырожденными состояниями и характеризуемых определенными наборами чисел $\nu_l, \nu_m, \nu_{n'}$ (нижние индексы). Для всех этих выражений вклады поправок к волновым функциям верхнего и нижнего уровней — величины одного порядка, но противоположных знаков (данная противоположность знаков видна для α -линий серий Лаймана и Бальмера в табл. 1).

Поскольку для полной информации об изменении вероятности перехода необходимо знать поправки к обоим сомножителям выражения (1), вместе с q мы приводим в табл. 2 аналитические выражения и для соответствующих факторов $w^{\pi,\sigma} \equiv w^{(1)}$, определяющих поправки первого порядка к частотам дипольных переходов (6).

В табл. 3 даны численные значения величин $q_{nlm \rightarrow n'l'm'}^{\pi,\sigma}$, рассчитанные по формулам из табл. 2 для различных значений главного квантового числа n исходного состояния. При $n \leq 5$ для большинства переходов доминирует положительный вклад от верхнего уровня, при $n \geq 6$ фактор q^π становится отрицательным (для π -перехода с $l = n - 2, m = n - 3, n' = n - 1$ — при $n \geq 12$), поскольку в этой области значений n отрицательный вклад от поправок к волновой функции нижнего уровня становится главным. Асимптотическая при $n \gg 1$ зависимость $q^\pi \propto -n^6$ имеет знак, противоположный зависимости, представляемой уравнениями (19)–(22) для высоких компонент серий Лаймана и Бальмера. Этот результат, в частности, показывает, что действие магнитного поля приводит к уменьшению матричного элемента дипольного перехода между высокими ридберговскими состояниями с циркулярными орбитами.

Тем не менее второй фактор выражения (1) для вероятности — частота перехода $\omega_{nn'}$ — для водородоподобных линий всегда имеет положительную квадратичную поправку, как это видно из формул табл. 2, при $n \gg 1$ пропорциональную n^6 . Соотношение между коэффициентом при этой асимптотике и соответствующим коэффициентом при асимптотике для $q^{\pi,\sigma}$ определяет знак поправки к вероятности. Такая поправка положительна для всех переходов с $\nu_{n'} = 1$ и отрицательна для переходов с $\nu_{n'} = 2$. Таким образом, вероятность перехода между невырожденными состояниями соседних уровней водорода с усилением магнитного поля возрастает, тогда как для переходов через одну оболочку убывает.

Заметим, что подобное соотношение между поправками к частотам и к матричным элементам является специфическим именно для данной группы переходов, поскольку здесь возрастание разности диамагнитных восприимчивостей в числителе выражения (7) сопровождается убыванием частоты перехода в знаменателе. В результате асимптотическая зависимость от n фактора $w^{(1)}$ для поправки к частоте оказывается аналогичной зависимости поправки к матричному элементу. Если же повышается главное квантовое число только у верхнего уровня, то $w^{(1)} \propto n^4$ и основной вклад в изменение вероятности дает поправка к матричному элементу, $q^{(1)} \propto n^6$, одинаковая для переходов всех типов.

Перечисленные результаты вместе с формулами табл. 2 и численными данными табл. 3 для $n \geq 6$ применимы не только к водороду, но и к многоэлектронным атомам, поскольку практически все высоковозбужденные состояния валентного электрона с $m \geq 3$ водородоподобны [2, 3].

Таблица 2

Аналитические выражения для факторов $q_{\nu_l\nu_m\nu_n}^{\pi,\sigma}$ и $w_{\nu_l\nu_m\nu_n}^{\pi,\sigma}$ для магнитоиндуцированных поправок к матричным элементам и частотам радиационных π - и σ -переходов между невырожденными состояниями атома водорода $n'l m \rightarrow n'l - 1 m'$, где $l = n - \nu_l$, $m = n - \nu_m$, $n' = n - \nu_n$; $m' = m$ для π -переходов (первая часть таблицы), $m' = m - 1$ для σ -переходов

$q_{121}^{\pi} = -\frac{n(n-1)}{48(2n-1)} (18n^5 - 112n^4 + 76n^3 + 4n^2 - 9n + 1),$ $w_{121}^{\pi} = \frac{(n-1)^3 n^3 (3n-1)}{4(2n-1)},$ $q_{231}^{\pi} = -\frac{n-2}{48(2n-1)^2} (36n^7 - 502n^6 + 1272n^5 - 2350n^4 + 2698n^3 - 1677n^2 + 521n - 64),$ $w_{231}^{\pi} = \frac{(n-1)^2 n^2 (n-2)}{4(2n-1)} (3n^2 + 7n - 4),$ $q_{232}^{\pi} = -\frac{n-2}{24(n-1)} (25n^6 - 210n^5 + 460n^4 - 524n^3 + 400n^2 - 168n + 32),$ $w_{232}^{\pi} = \frac{n^2(n-2)^3}{8(n-1)} (5n^2 - 4n + 2).$
$q_{111}^{\sigma} = -\frac{n}{48(2n-1)^2} (48n^7 - 318n^6 + 445n^5 - 271n^4 + 80n^3 + n^2 - 8n + 1),$ $w_{111}^{\sigma} = \frac{n^3(n-1)^2}{4(2n-1)} (4n^2 - 3n + 1),$ $q_{121}^{\sigma} = -\frac{n(n-1)}{48(2n-1)^2} (48n^6 - 306n^5 + 381n^4 - 154n^3 - 6n^2 + 17n - 2),$ $w_{121}^{\sigma} = \frac{1}{2} n^3 (n-1)^3,$ $q_{221}^{\sigma} = -\frac{n-1}{48(2n-1)^2} (48n^7 - 486n^6 + 1385n^5 - 3170n^4 + 4204n^3 - 2897n^2 + 978n - 128),$ $w_{221}^{\sigma} = \frac{n^2(n-1)^3}{2(2n-1)} (2n^2 + 5n - 4),$ $q_{231}^{\sigma} = -\frac{48n^8 - 570n^7 + 2373n^6 - 5827n^5 + 9724n^4 - 9799n^3 + 5552n^2 - 1627n + 192}{48(2n-1)^2},$ $w_{231}^{\sigma} = \frac{n^2(n-1)^2}{4(2n-1)} (4n^3 + 3n^2 - 25n + 12),$ $q_{222}^{\sigma} = -\frac{57n^8 - 604n^7 + 2233n^6 - 4469n^5 + 5708n^4 - 4864n^3 + 2672n^2 - 864n + 128}{48(n-1)^2},$ $w_{222}^{\sigma} = \frac{n^2(n-2)^2}{16} (11n^2 - 12n + 8),$ $q_{232}^{\sigma} = -\frac{n-2}{48(n-1)^2} (57n^7 - 540n^6 + 1623n^5 - 2563n^4 + 2550n^3 - 1612n^2 + 584n - 96),$ $w_{232}^{\sigma} = \frac{n^2(n-2)^3}{16(n-1)} (11n^2 - 11n + 6).$

Таблица 3

Множители $q^{\pi, \sigma}$ для магнитоиндуцированных поправок к матричным элементам радиационных π - и σ -переходов между невырожденными состояниями атома водорода $n'l m \rightarrow n'l' - 1 m'$, где $l = n - \nu_l$, $m = n - \nu_m$, $n' = n - \nu_{n'}$; $m' = m$ для π -переходов (первые три строки таблицы), $m' = m - 1$ для σ -переходов; $(k) = 10^k$

ν_l	ν_m	$\nu_{n'}$	$n = 4$	5	6	7	8	9	10
1	2	1	1.910(2)	1.942(2)	-6.434(2)	-4.026(3)	-1.324(4)	-3.386(4)	-7.464(4)
2	3	1	5.252(2)	1.718(3)	4.113(3)	7.908(3)	1.265(4)	1.669(4)	1.651(4)
2	3	2	6.293(2)	1.076(3)	-9.947(2)	-1.232(4)	-4.687(4)	-1.295(5)	-3.005(5)
1	1	1	2.121(2)	-1.606(1)	-1.784(3)	-7.743(3)	-2.283(4)	-5.524(4)	-1.177(5)
1	2	1	1.484(2)	-6.460(1)	-1.655(3)	-7.072(3)	-2.093(4)	-5.101(4)	-1.094(5)
2	2	1	4.732(2)	1.069(3)	1.521(3)	4.986(2)	-4.949(3)	-2.026(4)	-5.439(4)
2	3	1	2.106(2)	4.961(2)	4.928(2)	-1.083(3)	-7.057(3)	-2.264(4)	-5.646(4)
2	2	2	9.280(2)	1.269(3)	-2.106(3)	-1.790(4)	-6.361(4)	-1.698(5)	-3.854(5)
2	3	2	6.133(2)	9.106(2)	-1.857(3)	-1.544(4)	-5.579(4)	-1.513(5)	-3.479(5)

3. ПОПРАВКИ К МАТРИЧНЫМ ЭЛЕМЕНТАМ ПЕРЕХОДОВ ИЗ ВЫРОЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ

Приведенные выше данные не учитывают того обстоятельства, что в общем случае возбужденные водородоподобные уровни вырождены, так что в чистом виде $n'l m$ -состояний не существует уже в достаточно слабом магнитном поле, за исключением четырех состояний с $m \geq n - 3$, аналитические соотношения и численные данные для которых представлены в табл. 2, 3. В случае $m < n - 3$ точными интегралами движения являются только магнитное квантовое число m и четность P . В области применимости теории возмущений главное квантовое число является приближенным интегралом движения. Орбитальный же момент l перестает быть интегралом движения в сколь угодно слабых полях, поскольку все состояния данной n -оболочки с различными l имеют одинаковую энергию, а диамагнитное взаимодействие (3) не является сферически-симметричным. Под действием магнитного поля происходит перемешивание состояний с различными моментами одинаковой четности (в силу четности диамагнитного оператора (3)) и атом переходит в состояние с четностью $P = (-1)^m$, являющееся суперпозицией состояний с $l = m, m + 2, \dots, n - 1$ или в состояние с четностью $P = (-1)^{m+1}$, представляющее собой суперпозицию состояний с $l = m + 1, m + 3, \dots, n - 1$. Общие свойства таких состояний были изучены к началу 80-х годов и описаны, например, в обзоре [2].

Таким образом, высоковозбужденные уровни, в частности np , представляют собой лишь компоненту зеemanовского состояния $|n m \lambda^- \rangle$ с $m = 0, 1$ и отрицательной четностью, в состав которого входят также состояния с моментами $l = 3, 5, \dots$, а уровни $|n s \rangle$ и $|n d \rangle$ — компоненты $|n m \lambda^+ \rangle$ -состояния с $m = 0$ и положительной четностью, в состав которого входят и компоненты с моментами $l = 4, 6, \dots$. Число состояний $|n m \lambda^\pm \rangle$ (в дальнейшем называем их диамагнитными, нумеруемыми «диамагнитным квантовым числом» λ) равно $n - m$ (поровну четных и нечетных, если n и m одинаковой четно-

сти, или состояний четности $P = (-1)^m$ на одно больше, чем состояний с $P = (-1)^n$, если четности n и m различны). Все эти уровни имеют различные квадратичные сдвиги, т. е. диамагнитное взаимодействие полностью снимает вырождение в спектре водорода. Таким образом, перераспределение интенсивности дипольного излучения по диамагнитным состояниям $|nml\rangle$ в серии Лаймана (соответствующей переходам $|np\rangle \rightarrow |1s\rangle$) определяется вкладом np -волновой функции сферического кулоновского базиса. В нулевом приближении этот вклад не зависит от напряженности поля B , поскольку энергии вырожденных состояний совпадают и переход к диамагнитным состояниям связан лишь с изменением симметрии волновой функции. Такая ситуация полностью аналогична перераспределению вероятности перехода по штарковским уровням в электрическом поле, описываемым с помощью параболических квантовых чисел [16].

С ростом B происходит как изменение матричного элемента перехода $|np\rangle \rightarrow |1s\rangle$, описанное в предыдущем разделе, так и изменение вклада np -состояния в диамагнитную волновую функцию. Кроме того, взаимодействие (3) индуцирует переходы и из состояний с моментами $l = 3, 5, \dots$, также входящих в волновую функцию нулевого приближения. Поэтому, наряду с поправками к матричным элементам типа (9)–(11), для переходов из вырожденных состояний появляются еще два вида поправок, связанных с указанными причинами. Для расчета этих поправок мы используем теорию возмущений высших порядков для вырожденных состояний [6].

Волновая функция диамагнитного состояния с фиксированными главным и магнитным квантовыми числами удовлетворяет интегральному уравнению

$$\varphi_{nm\lambda p}(\mathbf{r}) = \sum_{l=m+p}^{l_{max}} a_l(\lambda) [1 + G'_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V_D(\mathbf{r}')]^{-1} \varphi_{nlm}(\mathbf{r}'), \quad (23)$$

где $\varphi_{nlm}(\mathbf{r})$ — волновая функция невозмущенного состояния с фиксированным орбитальным моментом, $p = 0(1)$ определяет четность $P = (-1)^{m+p}$ состояния и входящих в сумму моментов l , параметр λ нумерует диамагнитные состояния, количество которых равно кратности вырождения, т. е. числу слагаемых в сумме (23). Верхний предел суммирования $l_{max} = n - 2$, если четности $m + p$ и n одинаковы, $l_{max} = n - 1$, если четности $m + p$ и n противоположны. Редуцированная функция Грина $G'_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ ортогональна состояниям невозмущенного базиса и учитывает примешивание магнитным полем состояний из полного набора, не входящих в базисные, включая континуум. В нулевом приближении по V_D слагаемое с функцией Грина может быть отброшено, при этом волновая функция остается суперпозицией волновых функций с одним и тем же главным квантовым числом n , но различающихся орбитальными моментами.

Таким образом, в отличие от невырожденных состояний радиационный переход в магнитном поле происходит между состояниями атома, не имеющими определенного момента. Это приводит к тому, что переход на нижний уровень, который мог происходить только из одного состояния φ_{nlm} с фиксированным орбитальным моментом l , согласующимся с дипольными правилами отбора, в магнитном поле может идти практически из всех смешанных состояний (23), в которых $a_l \neq 0$. При этом интенсивность излучения из $|nml\rangle$ -состояния составит часть интенсивности перехода из «чистого» состояния φ_{nlm} , пропорциональную $|a_l(\lambda)|^2$.

Коэффициенты суперпозиции a_l удовлетворяют системе однородных алгебраических уравнений, которую можно получить подстановкой волновой функции (23) в уравнение Шредингера и последующим проецированием его на сферические базисные со-

стояния $|\varphi_{nlm}\rangle$:

$$(E_n - E)a_l + \sum_{l'=m+p}^{l_{max}} a_{l'} \langle \varphi_{nlm}(\mathbf{r}) | \hat{W}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') | \varphi_{nl'm}(\mathbf{r}') \rangle = 0, \quad (24)$$

$$l = m + p, m + p + 2, \dots, l_{max},$$

здесь

$$\hat{W}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = V_D(\mathbf{r}) [1 + G'_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V_D(\mathbf{r}')]^{-1} = V_D(\mathbf{r}) \sum_{s=0}^{\infty} [-G'_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V_D(\mathbf{r}')]^s \quad (25)$$

— интегральный оператор, точно учитывающий диамагнитное взаимодействие.

При построении ряда теории возмущений по степеням V_D для оператора (25) следует учитывать зависимость от V_D функции Грина G'_E (E — энергия атома в поле). Далее строится ряд по степеням B^2 для матрицы

$$W_{ll'} = \langle \varphi_{nlm}(\mathbf{r}) | \hat{W}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') | \varphi_{nl'm}(\mathbf{r}') \rangle, \quad (26)$$

определяющей коэффициенты системы однородных алгебраических уравнений (24). Таким образом, теория возмущений для энергий и волновых функций диамагнитных состояний атома водорода сводится к теории возмущений для собственных векторов и собственных значений диамагнитной матрицы (26), представляемой в виде ряда по степеням B^2 .

По аналогии с разложением диамагнитной энергии,

$$\Delta E_\lambda = E_\lambda - E_n = - \sum_{s=1}^{\infty} \frac{\chi_\lambda^{(s)}}{2s!} B^{2s}, \quad (27)$$

где $\chi_\lambda^{(s)}$ — восприимчивость s -го порядка, запишем ряд для $W_{ll'}$ в виде

$$W_{ll'} = - \sum_{s=1}^{\infty} \frac{v_{ll'}^{(s)}}{2s!} B^{2s}. \quad (28)$$

Коэффициенты a_l тоже следует разложить в степенные ряды, которые в отличие от величин (27), (28), обращающихся в нуль при $B \rightarrow 0$, начинаются с нулевой степени:

$$a_l = \sum_{s=0}^{\infty} a_l^{(s)} B^{2s}, \quad (29)$$

так что при $B = 0$ эти величины остаются конечными, $\lim_{B \rightarrow 0} a_l = a_l^{(0)}$. После подстановки (27)–(29) в левую часть уравнения (24) и приравнивания нулю коэффициента при каждой степени параметра B^2 получим последовательность уравнений для $a_l^{(s)}$. В низшем порядке имеем

$$\sum_{l'=m+p}^{l_{max}} a_{l'}^{(0)} (v_{ll'}^{(1)} - \chi^{(1)} \delta_{ll'}) = 0. \quad (30)$$

Таким образом, набор коэффициентов $a_l^{(0)}$ является собственным вектором, а $\chi^{(1)}$ — собственным значением матрицы $v_{ll'}^{(1)}$, аналитические выражения для элементов которой определены выражением (8). Как видно из (30), разложения (27)–(29) устраняют магнитное поле B из уравнений (24), решение которых, таким образом, сведено к задаче на собственные векторы и значения не зависящей от магнитного поля матрицы. Собственные значения этой матрицы представляют собой диамагнитные восприимчивости первого порядка $\chi_\lambda^{(1)}$, где $\lambda = 1, 2, \dots, K$, а K определяет кратность вырождения, т. е. число слагаемых в сумме (23). Для $K = 1$ имеем $\chi_\lambda^{(1)} = v_{ll}^{(1)}$. При $K = 2$ также можно записать аналитические выражения для восприимчивостей в виде функций главного квантового числа n [4, 6, 9]. Собственные векторы представляют собой наборы коэффициентов суперпозиции нулевого приближения, т. е. не зависящую от поля часть рядов (29).

Полученные значения $\chi_\lambda^{(1)}$ и $a_l^{(0)}(\lambda)$ используются для решения системы уравнений (24) в следующем порядке по B^2 , которую можно представить в виде

$$\sum_{l'=m+p}^{l_{max}} a_{l'}^{(1)}(\lambda) \left(v_{ll'}^{(1)} - \chi_\lambda^{(1)} \delta_{ll'} \right) = \sum_{l'=m+p}^{l_{max}} a_{l'}^{(0)}(\lambda) \left(\chi_\lambda^{(2)} \delta_{ll'} - v_{ll'}^{(2)} \right). \quad (31)$$

Домножая обе части этого уравнения на $a_l^{(0)*}(\lambda)$ и суммируя по l , получим с учетом (30) и условия полноты, $\sum |a_l^{(0)}|^2 = 1$, выражение для восприимчивости второго порядка:

$$\chi_\lambda^{(2)} = \sum_{l=m+p}^{l_{max}} \sum_{l'=m+p}^{l_{max}} a_l^{(0)*}(\lambda) a_{l'}^{(0)}(\lambda) v_{ll'}^{(2)}. \quad (32)$$

Таким образом, квадратичная диамагнитная восприимчивость определяется собственным вектором $a_l^{(0)}(\lambda)$ матрицы первого порядка (8) и матричными элементами второго порядка, явные выражения для которых после вычисления угловых интегралов представляются в виде

$$v_{ll}^{(2)} = \beta_{nl}^{(0)} + \frac{3m^2 - l(l+1)}{l(2l-1)} \beta_{nl}^{(2)} + \frac{3(l^2 + 2l - 5m^2)(l^2 - 5m^2 - 1) - 10m^2(4m^2 - 1)}{l(2l-1)(2l-2)(2l-3)} \beta_{nl}^{(4)}, \quad (33)$$

$$v_{ll+2}^{(2)} = - \left[\frac{((l+1)^2 - m^2)((l+2)^2 - m^2)(n^2 - (l+1)^2)(n^2 - (l+2)^2)}{(2l-1)^2(2l+1)(2l+3)^2(2l+5)(2l+7)^2} \right]^{1/2} \times \frac{n^6}{32} [\gamma_{nl}^{(0)} + m^2 \gamma_{nl}^{(2)}], \quad (34)$$

$$v_{ll+4}^{(2)} = \left[\frac{(l+1-m)_4(l+1+m)_4(n+l+1)_4(n-l-4)_4}{(2l+1)(2l+3)^2(2l+5)^2(2l+7)^2(2l+9)} \right]^{1/2} \frac{205n^6}{128}. \quad (35)$$

Не зависящие от m параметры в этих выражениях являются суперпозициями радиальных матричных элементов второго порядка от оператора r^2 , которые, благодаря соотношениям ортогональности типа (17), могут быть представлены в замкнутом виде как функции главного и орбитального квантовых чисел [6]:

$$\beta_{nl}^{(0)} = \frac{n^6}{240} \{5n^2[97n^2 - 33l(l+1) + 365] - 12(21l^4 + 42l^3 + 179l^2 + 158l + 60)\}, \quad (36)$$

$$\beta_{nl}^{(2)} = \frac{ln^6}{336(2l+3)} \{n^2[802n^2 - 1005l(l+1) + 2000] + 3(175l^4 + 350l^3 + 523l^2 + 348l - 480)\}, \quad (37)$$

$$\beta_{nl}^{(4)} = \frac{l(l-1)n^6}{1120(2l+3)(2l+5)} \{15n^2[41n^2 + 22l(l+1) - 185] - 1001l^3(l+2) + 3421l^2 + 4422l - 2160\}, \quad (38)$$

$$\gamma_{nl}^{(0)} = n^2[429l(l+3) - 802] + 237l^3(l+6) + 3145l^2 + 3036l - 2484, \quad (39)$$

$$\gamma_{nl}^{(2)} = 5(41n^2 + 37l^2 + 111l - 75). \quad (40)$$

Рассчитав восприимчивости $\chi_\lambda^{(2)}$, можно решать систему уравнений (31) для поправок $a_{l'}^{(1)}(\lambda)$ к коэффициентам (29). Однако определитель системы (31) в точности совпадает с определителем системы однородных уравнений (30) и, следовательно, обращается в нуль. Поэтому в дополнение к (31) следует использовать условие сохранения нормировки волновой функции (23) в первом порядке по V_D :

$$\sum_{l=m+p}^{l_{max}} a_l^{(0)}(\lambda) a_l^{(1)}(\lambda) = 0. \quad (41)$$

Значения восприимчивостей (32) вместе с коэффициентами $a_l^{(1)}(\lambda)$ рассчитываются для каждого собственного вектора диамагнитной матрицы (8), соответствующего конкретному собственному значению $\chi_\lambda^{(1)}$. Величины $a_l^{(1)}(\lambda)$ определяют поправки первого порядка по B^2 к волновой функции (23) вырожденного состояния, связанные с изменением в сильном поле вклада базисных векторов φ_{nlm} . Изменение вклада остальных состояний, не входящих в вырожденный базис, определяется слагаемым с функцией Грина. Эта часть полностью аналогична поправкам для невырожденных уровней.

Поскольку для всех переходов серий Лаймана и Бальмера нижние уровни являются невырожденными, ограничимся рассмотрением наиболее интересного для практики перехода из вырожденного состояния $|n\ell m\rangle$ в невырожденное $|n'\ell' m'\rangle$. В нулевом приближении выражение для матричного элемента определяется суперпозицией вида

$$d_{10}^{(0)}(\lambda) = \langle n\ell m | d_z | n'\ell' m'\rangle = a_{\ell'-1}^{(0)}(\lambda) \langle \varphi_{n\ell'-1 m} | d_z | \varphi_{n'\ell' m'} \rangle + a_{\ell'+1}^{(0)}(\lambda) \langle \varphi_{n\ell'+1 m} | d_z | \varphi_{n'\ell' m'} \rangle. \quad (42)$$

В случае $m' = \ell'$ первое слагаемое в правой части этого выражения обращается в нуль. Таким образом, перестройка возбужденных состояний приводит к расщеплению линии перехода $|n\ell m\rangle \rightarrow |n'\ell' m\rangle$ на диамагнитные компоненты $|n\ell m\rangle \rightarrow |n'\ell' m\rangle$, число которых определяется кратностью вырождения K ($\lambda = 1, \dots, K$), частоты — собственными значениями $\chi_\lambda^{(1)}$, а интенсивности — компонентами $a_{\ell'+1}^{(0)}$ собственного вектора диамагнитной матрицы (8). Иными словами, действие магнитного поля на спектр атома сводится к перераспределению интенсивности $I_{n,n'\ell'}$ перехода $|n\ell'+1 m\rangle \rightarrow |n'\ell' m\rangle$ по диамагнитным подуровням $|n\ell m\rangle$ с различными квантовыми числами $\lambda = 1, \dots, K$ пропорционально вкладу в эти подуровни состояния $|n\ell'+1 m\rangle$,

т. е. $I_{nm\lambda, n'} = |a_{l'+1}^{(0)}(\lambda)|^2 I_{n, n'l'}$. Это соотношение характеризует не зависящее от амплитуды поля B распределение сил осцилляторов дипольных переходов по диамагнитным подуровням $|n m \lambda\rangle$ возбужденного состояния [2, 3] аналогично распределению по штарковским состояниям параболического базиса в электрическом поле [16].

С ростом B становится существенным вклад зависящих от поля поправок к матричным элементам, выражение для которых в первом порядке по B^2 имеет вид

$$a_{10}^{(1)}(\lambda) = a_{l'+1}^{(1)}(\lambda) B^2 \langle \varphi_{n'l'+1m} | d_z | \varphi_{n'l'm'} \rangle + a_{l'+1}^{(0)}(\lambda) B^2 \left[\langle \varphi_{n'l'+1m} | V_D G'_{E_n} d_z | \varphi_{n'l'm'} \rangle + \langle \varphi_{n'l'+1m} | d_z G'_{E_n} d_z | \varphi_{n'l'm'} \rangle \right] + a_{l'+3}^{(0)}(\lambda) B^2 \left[\langle \varphi_{n'l'+3m} | V_D G'_{E_n} d_z | \varphi_{n'l'm'} \rangle + \langle \varphi_{n'l'+3m} | d_z G'_{E_n} d_z | \varphi_{n'l'm'} \rangle \right]. \quad (43)$$

Разделив это выражение на $a_{10}^{(0)}(\lambda)$, представим фактор первого зависящего от B слагаемого в разложении матричного элемента (6) в виде

$$q_{n\lambda, n'l'}^\pi = q_{n'l'+1, n'l'}^\pi + \frac{a_{l'+1}^{(1)}(\lambda)}{a_{l'+1}^{(0)}(\lambda)} + \frac{a_{l'+3}^{(0)}(\lambda)}{a_{l'+1}^{(0)}(\lambda)} q_{n'l'+3, n'l'}^\pi, \quad (44)$$

где $q_{n'l'+1, n'l'}^\pi = q_{n'l'+1, n'l'}^\pi(n) + q_{n'l'+1, n'l'}^\pi(n')$ — фактор для перехода между невырожденными состояниями, компоненты которого определены выражениями (12). Аналогичные выражения можно записать и для компонент фактора $q_{n'l'+3, n'l'}^\pi = q_{n'l'+3, n'l'}^\pi(n) + q_{n'l'+3, n'l'}^\pi(n')$:

$$q_{n'l'+3, n'l'}^\pi(n) = \frac{1}{4(2l'+5)} \sqrt{\frac{3(l'+1)}{2l'+7}} \frac{\langle nl'+3 | r^2 g_{l'+1}^{(n)}(r, r') r' | n'l' \rangle}{\langle nl'+1 | r | n'l' \rangle}, \quad (45)$$

$$q_{n'l'+3, n'l'}^\pi(n') = \frac{1}{4(2l'+5)} \sqrt{\frac{3(l'+1)}{2l'+7}} \frac{\langle nl'+3 | r g_{l'+2}^{(n')}(r, r') r'^2 | n'l' \rangle}{\langle nl'+1 | r | n'l' \rangle}.$$

При каждом конкретном наборе значений квантовых чисел нижнего уровня $n'l'$ можно получить простые формулы для этих параметров. В частности, для переходов серии Лаймана имеем

$$q_{nf, 1s}^\pi(n) = \frac{n^4 \sqrt{3(n^2-4)(n^2-9)}/7}{480Z^4(n^2-1)^3} (55n^6 + 115n^4 - 411n^2 - 527), \quad (46)$$

$$q_{nf, 1s}^\pi(1s) = \frac{n^2 \sqrt{3(n^2-4)(n^2-9)}/7}{30Z^4(n^2-1)^3} (49n^2 - 1).$$

Для переходов $|n0\lambda^- \rangle \rightarrow |2s\rangle$ серии Бальмера:

$$q_{nf, 2s}^\pi(n) = \frac{n^4 \sqrt{3(n^2-4)(n^2-9)}/7}{480Z^4(n^2-4)^4} (55n^8 - 80n^6 - 4832n^4 + 81664n^2 + 134912), \quad (47)$$

$$q_{nf, 2s}^\pi(2s) = -\frac{256n^2 \sqrt{3(n^2-4)(n^2-9)}/7}{15Z^4(n^2-4)^4} (7n^2 + 4)(n^2 + 2).$$

Для $|n1\lambda^+ \rangle \rightarrow |2p\rangle$ -переходов:

$$q_{ng,2p}^{\pi}(n) = \frac{n^4 \sqrt{2(n^2-9)(n^2-16)}/3}{672Z^4(n^2-4)^3} (125n^6 - 220n^4 - 4752n^2 - 34624),$$

$$q_{ng,2p}^{\pi}(2p) = -\frac{64n^2 \sqrt{2(n^2-9)(n^2-16)}/3}{21Z^4(n^2-4)^3} (25n^2 - 4). \quad (48)$$

Обратим внимание на повторение в этих выражениях закономерностей, отмечавшихся выше для компонент факторов (19), (20): с ростом n составляющая $q^{\pi}(n)$ в (46)–(48) возрастает как n^6 , тогда как величина $q^{\pi}(n')$ при больших n остается практически постоянной. Кроме того, выражение для суммы $q^{\pi} = q^{\pi}(n) + q^{\pi}(n')$ упрощается по сравнению с выражениями для отдельных компонент:

$$q_{nf,1s}^{\pi} = q_{nf,1s}^{\pi}(n) + q_{nf,1s}^{\pi}(1s) = \frac{n^2 \sqrt{3(n^2-4)(n^2-9)}/7}{480(n^2-1)} (55n^4 + 225n^2 - 16),$$

$$q_{nf,2s}^{\pi} = q_{nf,2s}^{\pi}(n) + q_{nf,2s}^{\pi}(2s) = \frac{n^2 \sqrt{3(n^2-4)(n^2-9)}/7}{480(n^2-4)^2} (55n^6 + 360n^4 - 2832n^2 - 4096), \quad (49)$$

$$q_{ng,2p}^{\pi} = q_{ng,2p}^{\pi}(ng) + q_{ng,2p}^{\pi}(2p) = \frac{n^2 \sqrt{2(n^2-9)(n^2-16)}/3}{672(n^2-4)} (125n^4 + 780n^2 - 512).$$

Следует также отметить, что фактор $q_{n'l'+3, n'l'}$ в случае невырожденных состояний определяет матричный элемент магнитоиндуцированного дипольного перехода, запрещенного в отсутствие магнитного поля, а приведенные выше выражения могут служить для оценки численных значений таких матричных элементов.

Приведем также выражение для фактора q , соответствующего переходу серии Бальмера из четной компоненты зеемановских состояний с $m = 0$, т. е. переходу $|n0\lambda^+ \rightarrow \rightarrow |2p0\rangle$:

$$q_{n0\lambda^+, 2p0}^{\pi} = \left[q_{nd0, 2p0}^{\pi} + \frac{\sqrt{5}a_0^{(0)}}{2a_2^{(0)}} q_{ns, 2p}^{\pi} + \frac{a_2^{(1)}(\lambda)}{a_2^{(0)}} + \frac{a_0^{(1)}(\lambda)}{8a_2^{(0)}} \sqrt{\frac{5(n^2-4)}{n^2-1}} + \right. \\ \left. + 2\sqrt{\frac{3}{10}} \frac{a_4^{(0)}}{a_2^{(0)}} q_{ng, 2p}^{\pi} \right] \left[1 + \sqrt{\frac{5(n^2-4)}{n^2-1}} \frac{a_0^{(0)}}{8a_2^{(0)}} \right]^{-1}, \quad (50)$$

где $q_{ns, 2p}^{\pi}$, $q_{nd0, 2p0}^{\pi}$ и $q_{ng, 2p}^{\pi}$ определены в (21), (22) и (49).

В общем случае $m \leq l' - 3$ в правую часть выражения (43) добавятся три слагаемых, получаемых из тех, что уже выписаны, заменой $l' + 1 \rightarrow l' - 1$ и $l' + 3 \rightarrow l' - 3$ и соответствующих вкладу в диамагнитное состояние $|nml\rangle$ состояний $|nlm\rangle$ с орбитальными моментами $l = l' - 1$ и $l = l' - 3$.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ И ОБСУЖДЕНИЯ

Выражений (44)–(50) достаточно для расчета численных значений фактора q^{π} любых переходов первых двух серий водородоподобного атома. Мы провели расчеты коэффициентов q^{π} для переходов $|n0\lambda^- \rightarrow |1s\rangle$ серии Лаймана. Для серии Бальмера рассмотрены три типа переходов: $|n0\lambda^- \rightarrow |2s\rangle$, $|n0\lambda^+ \rightarrow |2p0\rangle$ и $|n1\lambda^+ \rightarrow |2p1\rangle$.

Переходы в $1s$ - и в $2s$ -состояния происходят из одних и тех же возбужденных состояний отрицательной четности $|n0\lambda^- \rangle$ и определяются одними и теми же коэффициентами $a_1^{(0)}$, $a_3^{(0)}$ и $a_1^{(1)}$ волновой функции (23) верхнего уровня, различаясь только параметрами $q_{n,p,n's}^\pi$ и $q_{n,f,n's}^\pi$. Как видно из выражений (19)–(20) и (49), при больших n различие между этими параметрами исчезает. Следовательно, поправочные факторы (44) для матричных элементов радиационных переходов из высоковозбужденных диамагнитных состояний в сериях Лаймана и Бальмера практически совпадают.

Различие π -переходов в состояния $2p_0$ и $2p_1$ не только количественное, но и качественное уже в нулевом приближении, поскольку первые в отличие от вторых содержат вклад, соответствующий переходам из ns -состояний. Это обстоятельство проявляется в зависимости фактора (50) от коэффициентов $a_0^{(0)}$ и $a_0^{(1)}$, а также от параметра $q_{n,s,2p}^\pi$, имеющего отрицательные значения, примерно вдвое превышающие по абсолютной величине положительные значения параметра $q_{n,d0,2p0}^\pi$ (см. (21), (22) и данные в табл. 1).

В табл. 4 представлены численные значения факторов $q_{nm\lambda,n'l'm}^\pi$ для переходов серий Лаймана и Бальмера из состояний с $n \leq 8$. Для нумерации переходов (для определения численного значения параметра λ) мы используем распределение по энергии, определяемое в первом порядке восприимчивостью $\chi_{nm\lambda}^{(1)}$ верхнего уровня с главным квантовым числом n . Численные значения этой восприимчивости приведены в таблице вместе с факторами q для каждой группы переходов, начинающихся из одних и тех же возбужденных состояний. Следует обратить внимание на корреляцию между магнитоиндуцированными поправками к энергии, $\chi_{nm\lambda}^{(1)}$, и к матричным элементам радиационных переходов, $q_{nm\lambda,n'l'm}^\pi$. Вопрос об энергии тривиален, поскольку при больших n диамагнитная восприимчивость $\chi_0^{(1)}$ нижнего уровня мала по сравнению с восприимчивостью $\chi_1^{(1)}$ верхнего, так что в выражении для поправки (7) величиной χ_0 можно пренебречь. Таким образом, поправочный коэффициент $w_{nm\lambda,n'}^{(1)}$ для частоты перехода диамагнитных линий серии Лаймана примерно в четыре раза меньше соответствующих коэффициентов серии Бальмера (пропорционально отношению невозмущенных энергий связи состояний с $n = 1$ и $n = 2$). Идентичность коэффициентов (44) для серий Лаймана и Бальмера при больших n заранее не очевидна, поскольку даже невозмущенные матричные элементы в этих сериях различаются в асимптотике более чем в 20 раз [16]. Тем не менее близость коэффициентов $q_{nm\lambda,1s}^\pi$ и $q_{nm\lambda,2s}^\pi$ наблюдается из данных табл. 4 уже при $n = 5$. При этом различие этих коэффициентов минимально для нижних диамагнитных компонент линии излучения ($\lambda = 1$) и максимально для верхних ($\lambda = K$). Расчеты показывают, что при $n \geq 30$ максимальное различие не превышает 1%: $(q_{nmK,1s}^\pi - q_{nmK,2s}^\pi)/q_{nmK,1s}^\pi \leq 0.01$.

Распад возбужденных состояний положительной четности с $m = 0$, не дающий вклада в серию Лаймана, может осуществляться π -переходом серии Бальмера в $2p0$ -состояние. Несмотря на то что восприимчивости $|n0\lambda^+ \rangle$ -состояний отличаются от восприимчивостей нечетных диамагнитных уровней $|n0\lambda^- \rangle$ не более чем в два раза, как это видно из табл. 4 (при $n \gg 1$ восприимчивости самых низких диамагнитных уровней противоположной четности — так называемых диамагнитных дублетов — практически совпадают друг с другом [2]), поправочные факторы q для переходов $|n0\lambda^+ \rangle \rightarrow |2p0 \rangle$ существенно отличаются от соответствующих факторов переходов $|n0\lambda^- \rangle \rightarrow |2s \rangle$ как по абсолютной величине, так и по знаку.

Основным состоянием в наборе с $m = 1$ является $|2p1 \rangle$, поэтому π -переходы внутри этого набора встречаются только в серии Бальмера. Поправочный фактор $q_{n1\lambda,2p1}^\pi$

Таблица 4

Множители $q_{nm\lambda^\pm, n'l'}$ для магнитоиндуцированных поправок к матричным элементам радиационных π -переходов серий Лаймана, $|n0\lambda\rangle \rightarrow |1s\rangle$, и Бальмера, $|n0\lambda\rangle \rightarrow |2s\rangle$ и $|n\pi\lambda\rangle \rightarrow |2p\pi\rangle$, $m = 0, 1$. Индекс λ определяется абсолютной величиной, представленной в отдельных колонках диамагнитной восприимчивости верхнего уровня, $\chi_{nm\lambda^\pm}^{(1)}$; $(k) = 10^k$

n	λ	$-\chi_{n0\lambda^-}^{(1)}/2$	$q_{n0\lambda, 1s}^\pi$	$q_{n0\lambda, 2s}^\pi$	$-\chi_{n0\lambda^+}^{(1)}/2$	$q_{n0\lambda, 2p0}^\pi$	$-\chi_{n1\lambda^-}^{(1)}/2$	$q_{n1\lambda, 2p1}^\pi$
3	1	9.0	1.368(2)	9.107(1)	5.171	-1.179(2)	9.0	6.609(1)
	2	-	-	-	1.958(1)	1.920(3)	-	-
4	1	1.335(1)	1.525(3)	1.439(3)	1.868(1)	-1.014(3)	3.60(1)	6.293(2)
	2	3.865(1)	5.396(2)	1.646(2)	6.532(1)	1.044(4)	-	-
5	1	3.425(1)	4.451(3)	4.158(3)	2.834(1)	1.539(2)	4.438(1)	7.788(3)
	2	1.095(2)	2.776(3)	1.701(3)	6.875(1)	-2.033(3)	1.056(2)	2.666(3)
	3	-	-	-	1.654(2)	3.579(4)	-	-
6	1	5.215(1)	2.070(4)	2.025(4)	5.759(1)	-4.188(3)	1.056(2)	2.021(4)
	2	1.150(2)	4.168(3)	3.098(3)	1.710(2)	-3.473(4)	2.454(2)	9.364(3)
	3	2.513(2)	8.941(3)	6.529(3)	3.519(2)	9.876(4)	-	-
7	1	9.064(1)	3.912(4)	3.831(4)	8.631(1)	5.290(3)	1.396(2)	8.490(4)
	2	2.545(2)	2.200(4)	1.964(4)	1.842(2)	-5.906(4)	2.507(2)	3.762(4)
	3	5.001(2)	2.393(4)	1.923(4)	3.636(2)	-1.142(5)	4.918(2)	2.571(4)
	4	-	-	-	6.643(2)	2.349(5)	-	-
8	1	1.322(2)	1.070(5)	1.058(5)	1.352(2)	-6.683(3)	2.444(2)	1.468(5)
	2	2.842(2)	3.637(4)	3.379(4)	3.655(2)	-1.145(5)	4.992(2)	8.790(4)
	3	5.081(2)	4.635(4)	4.168(4)	6.854(2)	-3.249(5)	8.885(2)	6.056(4)
	4	8.995(2)	5.549(4)	4.717(4)	1.150(3)	5.003(5)	-	-

определяется выражением (44), как и для переходов в $2s$ -состояния. Поэтому и количественно, и качественно распределение данного фактора по четным диамагнитным подуровням $|n0\lambda^+ \rangle$ идентично распределению фактора $q_{n0\lambda, 2s}^\pi$ по нечетным подуровням. Сравнение этих распределений дано на рис. 1, представляющем численные значения факторов $q_{n1\lambda, 2p1}^\pi$ (темные точки) и $q_{n0\lambda, 2s}^\pi$ (светлые точки) для матричных элементов диамагнитных компонент серии Бальмера, соответствующих радиационному распаду состояний с главным квантовым числом $n = 40$. Резонансноподобный скачок в области перехода от дублетного диамагнитного спектра к расщепленным состояниям с различной четностью [2] наблюдается в обеих зависимостях от диамагнитной энергии, представляемой на горизонтальной оси восприимчивостью первого порядка $\chi_{nm\lambda}^{(1)}$.

На этом же рисунке приведены также численные значения факторов $q_{n0\lambda, 2p0}^\pi$ для переходов из четных состояний в дублетной области спектра (крестики). Для этих переходов также заметно резкое изменение характера энергетической зависимости в окрест-

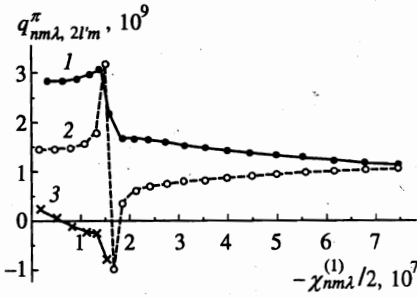


Рис. 1

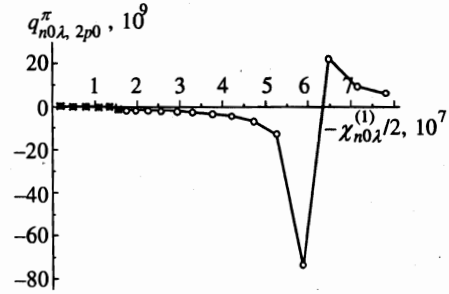


Рис. 2

Рис. 1. Численные значения поправочных факторов $q_{n1\lambda, 2p1}^{\pi}$ (темные точки, соединенные сплошной кривой 1) и $q_{n0\lambda, 2s}^{\pi}$ (светлые точки, соединенные штриховой кривой 2) диамагнитных компонент линии Бальмера, соответствующей радиационному распаду уровня $n = 40$. Крестиками, соединенными кривой 3, показаны шесть первых значений для $q_{n0\lambda, 2p0}^{\pi}$, соответствующие выделенным на рис. 2

Рис. 2. Численные значения поправочных факторов $q_{n0\lambda, 2p0}^{\pi}$ диамагнитных компонент линии Бальмера, соответствующей радиационному переходу из четных состояний $|n0\lambda^+\rangle$ уровня $n = 40$. Первые шесть значений (крестики) представлены на рис. 1 в более подробном масштабе

ности перехода от дублетных к расщепленным состояниям, сопровождающее переход от положительных к отрицательным значениям фактора. Весь набор $q_{n0\lambda, 2p0}^{\pi}$ представлен на рис. 2 с двадцатикратным изменением масштаба по вертикальной оси по сравнению с рис. 1. Как видно из рис. 2, более резкий скачок факторов $q_{n0\lambda, 2p0}^{\pi}$ имеет место в высокочастотной части диамагнитного спектра, т. е. примерно на расстоянии 1/5 части от всей ширины диамагнитного набора до его верхней границы (по энергетической шкале). При этом почти для всех состояний ниже этого скачка, фактор $q_{n0\lambda, 2p0}^{\pi}$ отрицателен, а поскольку абсолютная величина его превышает соответствующие диамагнитные восприимчивости на два порядка и более (см. масштабные факторы для величин на обеих осях), интенсивность соответствующих линий с усилением магнитного поля уменьшается. Для последних трех линий в высокочастотной части спектра, как и практически для всех линий, диамагнитные поправки которых представлены на рис. 1, интенсивность с усилением поля возрастает, превышая на 30–40% интенсивность соответствующего излучения свободного атома при $B \approx 1$ Тл.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в достаточно сильном магнитном поле может произойти не только полное расщепление радиационных линий атомов, но и существенное перераспределение вероятностей их излучения и поглощения. Интенсивность практически всех π -компонент серии Лаймана с усилением поля возрастает. В серии Бальмера такое же усиление наблюдается для переходов в зеэмановском наборе с $m = 1$. В наборе с $m = 0$ происходит перераспределение интенсивностей в пользу линий распада нечетных со-

стояний и малого числа состояний из низко- и высокочастотной частей диамагнитного набора положительной четности. Интенсивность же линий распада четных состояний из средней части диамагнитного спектра с усилением поля уменьшается.

Проведенные нами расчеты показывают, что изменение радиационных свойств водородоподобного атома в магнитном поле доступно аналитическому описанию на основе сферического кулоновского базиса. Получено замкнутое решение задачи об атоме водорода в магнитном поле с учетом диамагнитных поправок не только для энергии, но и для волновых функций. Метод определения поправок к оптическим характеристикам вырожденных состояний атома в поле из системы алгебраических уравнений (24) с использованием выражений для матричных элементов высших порядков типа (19)–(22), (33)–(40) и (46)–(49) может быть полезен и в других задачах о взаимодействии возбужденных атомов с электромагнитными полями.

Аналитические выражения и количественные данные, представленные в таблицах и на рисунках, дают информацию об изменении интенсивностей атомных линий. Они применимы не только к водороду, но и к многоэлектронным атомам в зеemanовских состояниях с большими магнитными квантовыми числами ($m \geq 3$) и могут быть использованы для описания спектральных характеристик ридберговских атомов в умеренных и сильных магнитных полях, существующих как в наземных лабораториях, так и в звездной плазме.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 97-02-16407) и Министерства образования РФ (грант № 97-0-5.1-63).

Литература

1. P. F. A. Klinkenberg, in *Atomic Physics 15 (invited papers of the 15th ICAP)*, World Scientific Publishing, Singapore (1997), p. 221.
2. P. A. Braun, *Rev. Mod. Phys.* **65**, 115 (1993).
3. Д. Клеппнер, М. Литтман, М. Циммерман, в сб. *Ридберговские состояния атомов и молекул*, под ред. Р. Стеббингса и Ф. Даннинга, Мир, Москва (1985), с. 88.
4. T. P. Grozdanov and H. S. Taylor, *J. Phys. B* **19**, 4075 (1986).
5. Е. А. Соловьев, *ЖЭТФ* **82**, 1762 (1982).
6. V. D. Ovsianikov and S. V. Goossev, *Physica Scripta* **57**, 506 (1998).
7. И. И. Собельман, *Введение в теорию атомных спектров*, Наука, Москва (1977), § 31.
8. N. L. Manakov, V. D. Ovsianikov, and L. P. Rapoport, *Phys. Rep.* **141**, 319 (1986).
9. S. V. Goossev and V. D. Ovsianikov, *J. Phys. B* **28**, 5251 (1995).
10. А. М. Вайнберг, В. А. Гани, А. Е. Кудрявцев, *ЖЭТФ* **113**, 550 (1998).
11. V. D. Ovsianikov, *Phys. Rev. A* **57**, 3719 (1998).
12. P. Falsaperla and G. Fonte, *Phys. Rev. A* **50**, 3051 (1994).
13. J.-H. Wang and C.-S. Hsue, *Phys. Rev. A* **52**, 4508 (1995).
14. Yu. P. Kravchenko, M. F. Liberman, and B. Johansson, *Phys. Rev. A* **54**, 287 (1996).
15. T. P. Grozdanov, L. Andric, C. Manescu, and R. McCarroll, *Phys. Rev. A* **56**, 1865 (1997).
16. Г. Бете, Э. Солпитер, *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами*, Физматгиз, Москва (1960).
17. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, Наука, Москва (1973), т. 1, гл. 5; (1974), т. 2, гл. 10.