

## ТОЧНЫЕ НЕРЕЛЯТИВИСТСКИЕ ВЫРАЖЕНИЯ ТЕНЗОРА РАССЕЯНИЯ СВЕТА АТОМАМИ

*М. А. Преображенский*

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

Поступила в редакцию 7 июня 1996 г.

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

### 1. ВВЕДЕНИЕ

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

а радиальный составной матричный элемент теории возмущений  $T$  есть

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

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

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

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

и явное выражение для волновой функции связанного состояния

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

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

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

Здесь введены обозначения

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

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

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

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

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

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

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

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

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

получим

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

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

Учтем теперь, что

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

и приведем (9) к виду

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

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

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

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

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

Здесь введены обозначения:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Применяя соотношение Куммера

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

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

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

получим

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

Здесь введено обозначение

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

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

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

где

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

В частности, для  $P$ -состояний имеем

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

где

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Подставляя (40) в (6), получим

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

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

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

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

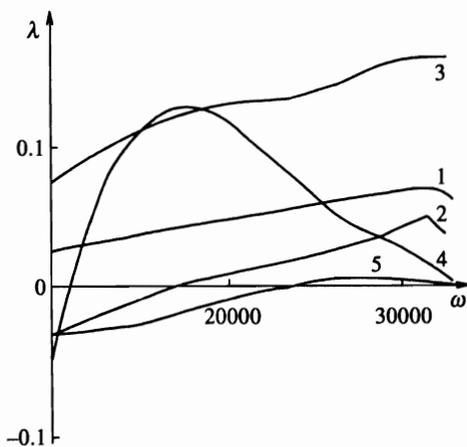
$$B_m(x_i, y_i, x_f, y_f) = \sum_{\delta=0}^{\delta_i} h_{\delta}(\lambda - \lambda_i) \sum_{\delta_1=0}^{\delta_f} h_{\delta_1}(\lambda - \lambda_f)b_m(x_i, y_i, x_f, y_f). \tag{45}$$

Таблица 1

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

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

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



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

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

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

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

Таблица 2

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

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

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

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

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

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

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

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

### Литература

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