

ОБОБЩЕННЫЕ ШТУРМОВСКИЕ РАЗЛОЖЕНИЯ КУЛОНОВСКОЙ ФУНКЦИИ ГРИНА И ДВУХФОТОННЫЕ ФОРМУЛЫ ГОРДОНА

А. А. Крыловецкий*, Н. Л. Манаков**, С. И. Мармо

Воронежский государственный университет
394693, Воронеж, Россия

Поступила в редакцию 8 августа 2000 г.

Радиальная часть кулоновской функции Грина (КФГ) записана в виде двойного ряда по полиномам Лагерра (функциям Штурма кулоновской задачи), содержащего два свободных параметра, α и α' . Результат применим как в нерелятивистском случае, так и для КФГ квадрированного уравнения Дирака с кулоновским потенциалом. При $\alpha = \alpha'$ получено разложение КФГ на резонансную и потенциальную (гладко зависящую от энергии) части. В импульсном представлении КФГ со свободными параметрами записана в виде разложения по четырехмерным сферическим функциям. Выбор параметров α, α' в соответствии со спецификой конкретной задачи кардинально упрощает вычисление составных матричных элементов электромагнитных переходов. Получены замкнутые аналитические выражения (в записи через гипергеометрические функции) для амплитуд связанно-связанных и связанно-свободных двухфотонных переходов в атоме водорода из произвольного начального состояния $|nl\rangle$, обобщающие известные (однофотонные) формулы Гордона. Компоненты тензора динамической поляризуемости $\alpha_{nlm}(\omega)$ при произвольном n выражены через гипергеометрическую функцию ${}_2F_1$, зависящую лишь от l и $\tilde{\omega}$, и полиномиальные функции $f_{nl}(\tilde{\omega})$ частоты $\tilde{\omega} = \hbar\omega/|E_n|$. Исследованы ридберговская ($n \gg 1$) и припороговая ($\hbar\omega \sim |E_n|$) асимптотики поляризуемостей.

PACS: 32.80.-t, 32.10.Dk, 32.80.Rm

1. ВВЕДЕНИЕ

В рамках теории возмущений по взаимодействию с лазерным полем вероятности одно- и многофотонных процессов выражаются через матричные элементы соответствующих переходов между начальным и конечным состояниями атома. Для многоэлектронных атомов возможен лишь приближенный расчет таких матричных элементов, а в случае водородоподобных систем вычисления могут быть выполнены точно. В большинстве задач взаимодействие с полем можно считать дипольным; в этом случае радиальные матричные элементы $\langle n'l' = l \pm 1 | r | nl \rangle$ однофотонных переходов между начальным $|nl\rangle$ и конечным $|n'l'\rangle$ состояниями дискретного спектра в атоме водорода вычисляются аналитически в виде комбинации двух гипергеометрических функций

${}_2F_1(a, b; c; z)$ с целыми отрицательными параметрами a и b (гипергеометрических полиномов) и простых алгебраических факторов (известные формулы Гордона [1]):

$$\begin{aligned} \langle n'l - 1 | r | nl \rangle = & \\ = & (-1)^{n'+1} \frac{[(n-l)_{2l+1} (n'-l+1)_{2l-1}]^{1/2}}{4Z(2l-1)!} \times \\ \times & \frac{\xi^{l+1}}{(1-\xi)^{(n+n')/2}} [{}_2F_1(-n+l+1, -n'+l; 2l; \xi) - \\ & - (1-\xi) {}_2F_1(-n+l-1, -n'+l; 2l; \xi)], \quad (1) \end{aligned}$$

где

$$\xi = -4nn'/(n-n')^2,$$

$(a)_k = \Gamma(a+k)/\Gamma(a)$ — символ Похгаммера. Здесь и ниже используются атомные единицы.

Формулы Гордона полностью описывают излучение и поглощение фотона связанным электроном в кулоновском потенциале, а аналитическое

*E-mail: kryl@kryl.vsu.ru

**E-mail: manakov@thp.vsu.ru

продолжение (1) по n' (в данном случае замена $n' \rightarrow i/\sqrt{2E}$) дает и амплитуды $\langle E'l' = l \pm 1 | r | nl \rangle$ связанно-свободных переходов (фотоионизации или рекомбинации), которые тоже представляют собой полиномы. Хорошо известны также выражения для амплитуд $\langle E'l' = l \pm 1 | r | El \rangle$ свободно-свободных переходов (типа тормозного излучения), в которых наряду с членом, получаемым аналитическим продолжением по n и n' и представляющим собой уже комбинацию двух полных гипергеометрических функций ${}_2F_1$, возникает дополнительное сингулярное слагаемое с дельта-функцией $\delta(E - E')$. Указанные аналитические формулы являются «реперными» в теории атомных фотопроцессов: табулированные результаты, а также многочисленные аппроксимации для частных значений n, l и/или энергии E широко используются в задачах классической (однофотонной) оптической спектроскопии.

Внедрение лазеров в технику оптической спектроскопии и экспериментальные исследования многофотонных процессов стимулировали аналитические расчеты сечений многофотонных (в первую очередь, двухфотонных) переходов в кулоновском поле. Уже на примере радиального матричного элемента двухфотонного перехода,

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{l'; l, l \pm 2}^{L=l \pm 1}(n, n', E = E_n \pm \omega) &= \\ &= \sum_k \frac{\langle n'l' | r | kL \rangle \langle kL | r | nl \rangle}{E_k - E_n \mp \omega - i0} \equiv \\ &\equiv \langle n'l' | r g_L(E; r, r') r' | nl \rangle, \quad (2) \end{aligned}$$

очевидно, что в этом случае задача принципиально усложняется необходимостью расчета спектральных сумм. Далее ясно, что даже будучи вычисленным в замкнутом виде, матричный элемент (2) должен иметь гораздо более сложный функциональный вид по сравнению с (1), поскольку вдобавок к зависимости от квантовых чисел n, n', l он существенно (резонансным образом) зависит от непрерывного параметра — частоты ω внешнего монохроматического возмущения. История аналитических расчетов амплитуд типа (2) для кулоновского потенциала насчитывает почти 40 лет (см., например, [2]) и около сотни работ. Использовался целый ряд альтернативных подходов (различные модификации метода интегрирования неоднородных дифференциальных уравнений для поправочной функции первого порядка нестационарной теории возмущений, алгебраические подходы на основе $O(4)$ -симметрии кулоновской задачи и др.), но наиболее эффективным средством вычисления спектральных сумм является

использование явного выражения для функции Грина G_E ,

$$G_E = \sum_{klm} \frac{|klm\rangle \langle klm|}{E_k - E - i0} = \frac{1}{\hat{H} - E - i0}, \quad (3)$$

уравнения Шредингера с кулоновским гамильтонианом. Для переходов между начальным и/или конечным состояниями с фиксированным орбитальным моментом наиболее целесообразно использование мультипольного разложения G_E :

$$G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{lm} g_l(E; r, r') Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{lm}^*(\hat{\mathbf{r}}'), \quad (4)$$

где $Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}})$ — сферическая функция. В этом случае задача сводится к вычислению матричных элементов типа (2) с радиальной функцией Грина $g_l(E; r, r')$.

Эффективность использования кулоновской функции Грина (КФГ) в теории двухфотонных процессов была продемонстрирована впервые на примере расчета динамической поляризуемости $\alpha_{1s}(\omega)$ основного состояния водорода в компактной аналитической форме [3] (см. также [4]):

$$\alpha_{1s}(\omega) = \frac{1}{\omega^2} [T(E_{1s} + \omega) + T(E_{1s} - \omega) - 1], \quad (5)$$

где

$$\begin{aligned} T(E) &= \frac{\eta}{2(2-\eta)} {}_2F_1(1, 4; 3 - \eta; x), \\ x &= -\frac{(1-\eta)^2}{4\eta}, \quad \eta = \frac{Z}{\sqrt{-2E - i0}}. \end{aligned}$$

Таким образом, в простейшем случае $n = n' = 1$ матричные элементы (2) сводятся к полной гипергеометрической функции ${}_2F_1$ с двумя целыми первыми параметрами, один из которых равен единице (неполная бета-функция [5]). Аналогичные аналитические результаты были получены и для переходов из основного в низшие возбужденные состояния с $n = 2, 3$ [6], а также для переходов между возбужденными уровнями [6, 7] вплоть до $n = 4$ [8]. Во всех случаях результаты выражаются в виде комбинации функций ${}_2F_1$, однако с ростом главных квантовых чисел n и n' число функций быстро возрастает. Отметим, что, в принципе, вследствие отмеченной выше целочисленности параметров такие функции приводятся к одной из них с помощью рекуррентных соотношений. Однако соответствующий алгоритм достаточно громоздкий и может быть реализован лишь компьютерными средствами [9]. Наряду с расчетами амплитуд двухфотонных переходов с конкретными значениями n и n' в ряде работ матричные элементы (2) анализировались для общего

случая произвольных n и/или n' . Здесь результаты имеют достаточно простой вид лишь для упругих ($n' = n$) процессов: компактное выражение для скалярной части поляризуемости состояния $|nl\rangle$, возникающей при расчете логарифма Бете для лэмбовского сдвига, найдено в [10] (см. также [8] для $n \leq 4$ и [11] для ns -состояний); в работе [12] 3 независимые компоненты тензора поляризуемости для произвольного n , а также амплитуда «недиагонального» перехода $|nl\rangle \rightarrow |n'l' = l \pm 2\rangle$ выражены через линейную комбинацию $\sim (n_r = n - l - 1)$ функций ${}_2F_1$. Аналогичным образом, в виде комбинации $\sim n$ гипергеометрических функций, было получено выражение для амплитуды неупругих переходов из основного состояния, $|1s\rangle \rightarrow |nl = 0, 2\rangle$ [13]. Матричные элементы (2) для общего случая $n \neq n'$ анализировались в работах [14, 15], однако замкнутое выражение в терминах известных специальных функций не было получено. Исползованная в [14] техника штурмовского разложения КФГ позволяет представить результат лишь в виде бесконечного ряда от произведений двух гипергеометрических полиномов (аналогичных входящим в формулы Гордона для фотоионизации), который к тому же оказывается расходящимся при частотах, превышающих потенциал ионизации $|E_n|$ начального состояния $|nl\rangle$. В [16, 17] результат записан в виде интегралов, не сводящихся к известным специальным функциям, а в работе [15], претендующей на получение результата в компактной аналитической форме, последняя имеет вид громоздкой суммы нескольких десятков специально введенных для данной задачи функций гипергеометрического типа от шести параметров и четырех аргументов, которые эквивалентны тройной сумме, включающей функции ${}_2F_1$.

Анализ матричного элемента (2) для связанно-свободных переходов, $|nl\rangle \rightarrow |E'l'\rangle$, усложняется из-за наличия кулоновской функции непрерывного спектра, которая сама уже есть вырожденный гипергеометрический ряд. Тем не менее и в этом случае амплитуда двухфотонной ионизации из основного состояния вычисляется в замкнутом аналитическом виде, но уже через полные гипергеометрические функции двух переменных — функции Аппеля F_1 [18, 19] (см. также аналогичные результаты [20] для комптоновского рассеяния с ионизацией). Хотя указанные расчеты легко обобщаются и на случай низлежащих возбужденных уровней, в общем случае замкнутые результаты для амплитуды не были получены, и в конкретных расчетах для больших n (в особенности для надпороговой ионизации, когда $\omega > |E_n|$) используются различные варианты чис-

ленных алгоритмов для аналитического продолжения рядов гипергеометрического типа (см., например, [21–23, 10]). Укажем также, что для двухфотонных переходов между состояниями непрерывного спектра с фиксированными значениями орбитального момента матричные элементы типа (2) (описывающие, например, двойное тормозное излучение или резерфордское рассеяние в присутствии световой волны) выражаются через интеграл от полной функции ${}_2F_1$ [24].

В настоящей работе получены двухфотонные формулы Гордона — компактные аналитические выражения для матричных элементов типа (2) с произвольными n и n' , а также для связанно-свободных переходов из состояния $|nl\rangle$ в канонически простой (насколько это возможно для столь общего случая) форме через известные специальные функции. Все полученные ранее аналитические результаты для двухфотонных дипольных переходов в водородном атоме являются простыми частными случаями указанных формул. Как оказалось, усложнение результатов для произвольных n, n' по сравнению со случаем основного состояния связано не с увеличением числа гипергеометрических функций ${}_2F_1$ или функций Аппеля F_1 , как этого можно было бы ожидать, судя по известным результатам для низлежащих уровней, а с тем, что в общем случае амплитуды выражаются в виде простой линейной комбинации произведений двух функций гипергеометрического типа. Одна из них — гипергеометрический полином порядка не выше, чем $n_{<} = \min\{n_r, n'_r\}$, аналогичный полиномам в классической формуле Гордона, а другая — функция Аппеля F_1 , которая для случая связанно-свободных переходов аналогична функциям, определяющим амплитуду двухфотонной ионизации из основного состояния. Для связанно-связанных переходов указанная функция Аппеля имеет целый отрицательный параметр и эквивалентна конечной сумме функций ${}_2F_1$ с единичным первым параметром, аналогичных входящим в (5). Кроме того, в обоих случаях результат содержит также полиномиальные слагаемые с произведениями гипергеометрических полиномов одной (${}_2F_1$) и двух (F_1) переменных. Результаты радикально упрощаются для «диагональных» матричных элементов (2) с $n' = n$: в этом случае полиномиальные члены отсутствуют и $M_{l;l'}^I(n, n, E = E_n \pm \omega)$ записывается в виде простого произведения суммы двух гипергеометрических полиномов на сумму двух полных гипергеометрических функций ${}_2F_1$.

Обобщение формул Гордона на случай двухфотонных процессов оказалось возможным с исполь-

зованием эффективного метода расчета, основанного на новом представлении (обобщенное штурмовское разложение) радиальной КФГ $g_l(E; r, r')$ в виде двойного ряда по полиномам Лагерра (или функциям Штурма $S_{nl}(x)$ (8) кулоновской задачи), которое содержит два произвольных (свободных) параметра α, α' :

$$g_l(E; r, r') = \sum_{k, k'=0}^{\infty} g_{kk'}^l(\nu; \alpha, \alpha') \times S_{kl} \left(\frac{2r}{\alpha} \right) S_{k'l} \left(\frac{2r'}{\alpha'} \right). \quad (6)$$

Принципиальным обстоятельством, придающим значительную гибкость в использовании обобщенного штурмовского разложения в различных приложениях, является факторизованная зависимость членов ряда (6) от r, r' и энергетического параметра $\nu = 1/\sqrt{-2E - i0}$. Вся зависимость от энергии E содержится в ядре $g_{kk'}^l(\nu; \alpha, \alpha')$, которое не зависит от радиальных переменных и выражается через гипергеометрические функции. Рациональный выбор параметров α и α' в соответствии со спецификой конкретной задачи (например, $\alpha = n, \alpha' = n'$ при анализе двухфотонных связанно-связанных переходов) позволяет в ряде случаев кардинально упростить процедуру расчета матричных элементов с $g_l(E; r, r')$, в частности, представить двухфотонные формулы Гордона в описанном выше замкнутом аналитическом виде через четыре функции $g_{kk'}^l$ с различными k, k' . Таким образом, амплитуды двухфотонных процессов как бы содержатся уже в самом представлении (6) для $g_l(E; r, r')$. Существенно, что разложение (6) справедливо и при нецелых значениях параметра $l = \gamma$. Это позволяет получить двухпараметрическое разложение и для релятивистской КФГ в записи через функции Штурма квадрированного уравнения Дирака с кулоновским потенциалом. Для целых l и $\alpha' = \alpha$ разложение (6) переходит в однопараметрическое представление функции Грина для нерелятивистской кулоновской задачи, полученное ранее в работе [25] (см. также [10]).

Ниже в разд. 2 изложен вывод разложения (6) и исследованы некоторые свойства нового представления КФГ. В частности, получено двухпараметрическое представление КФГ $G_E(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ в импульсном пространстве, обобщающее известный результат Швингера, а также разложение $G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ на «резонансную» (содержащую полюсы при $E = E_n$) и «потенциальную» (гладко зависящую от энергии и вещественную при вещественных E) части. В

разд. 3 и 4 с использованием разложения (6) получены двухфотонные формулы Гордона для амплитуд неупругих связанно-связанных (разд. 3) и связанно-свободных (разд. 4) переходов. В разд. 5 детально проанализирован случай $n' = n$: вычислены элементы штарковской матрицы уровня с произвольным n и получены простые формулы для скалярной, векторной и тензорной поляризуемостей, наиболее естественно обобщающие (5), а также проведено исследование ридберговских и припороговых асимптотик поляризуемостей.

Ряд результатов настоящей работы кратко изложен в заметке [26].

2. ОБОБЩЕННОЕ ШТУРМОВСКОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ КФГ

Наличие удобного, подходящего для данной задачи представления функции Грина часто является главным условием успешного проведения аналитических или численных расчетов, поэтому с середины 60-х годов, когда начались интенсивные исследования воздействия лазерного излучения на атомы, по настоящее время получены различные варианты таких представлений. Ниже мы кратко остановимся лишь на двух из них (подробное обсуждение различных представлений КФГ, включая релятивистский случай, и особенностей их использования можно найти, например, в [27–29]).

Наиболее популярно в многофотонных расчетах разложение $g_l(E; r, r')$ по функциям Штурма кулоновской задачи [30]:

$$g_l(E; r, r') = \nu \sum_{k=0}^{\infty} \frac{k! S_{kl}(2r/\nu) S_{kl}(2r'/\nu)}{\Gamma(k+2l+2)(k+l+1-\eta)}, \quad (7)$$

где

$$S_{kl}(2r/\nu) = \frac{2}{\nu} (2r/\nu)^l \exp(-r/\nu) L_k^{2l+1}(2r/\nu), \quad (8)$$

L_n^α — обобщенный полином Лагерра [31], $\nu = (-2E - i0)^{-1/2}$, $\eta = Z\nu$. Штурмовское разложение полезно для аналитических преобразований, но особенно широкое применение оно нашло при проведении прямых численных расчетов радиальных составных матричных элементов $M_{fi}^{(N)}$ высших порядков теории возмущений. В этом случае результаты представляются в виде кратных рядов гипергеометрических полиномов, которые быстро сходятся при подпороговых ($E < 0$) значениях энергии промежуточных состояний (функций Грина (3), (4)). При надпороговых энергиях ряды для матричных элементов становятся расходящимися, поскольку ряд

в (7) расходится при $E > 0$ (при мнимых ν). Однако при соответствующем преобразовании (7) можно распространить технику расчетов со штурмовскими функциями и на этот класс задач [32]. Другой способ суммирования рядов для матричных элементов при надпороговой энергии состоит в применении методов аппроксимации Паде [33] (см. также [34]). Штурмовское разложение радиальной КФГ (при соответствующей модификации угловой части в (4)) успешно используется и в релятивистских расчетах. Чтобы получить из (7) (или из (6)) функцию Грина квадратированного уравнения Дирака $g_\gamma(E; r, r')$ [35], следует заменить $l \rightarrow \gamma$ и положить

$$\nu = \frac{\alpha}{\sqrt{1 - \epsilon^2}}, \quad \epsilon = \frac{E}{mc^2}, \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c},$$

$$\eta = \epsilon Z \nu, \quad \gamma = \sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - (\alpha Z)^2} + \frac{s - 1}{2},$$

$$s = \pm 1 \quad \text{при} \quad j = l \mp \frac{1}{2}$$

(где j и l — соответственно полный и орбитальный моменты электрона). Функция Грина (7) с нецелым параметром l возникает также при расчетах с модельным потенциалом Фьюса (кулоновский потенциал с добавочным центробежным членом $\propto r^{-2}$ [28]).

Наряду с (4), (7) в приложениях часто используются представления КФГ в импульсном пространстве. Наиболее известно разложение $G_E(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ с $E < 0$ по дискретному базису четырехмерных сферических функций $Y_{klm}(\xi)$, определенных на единичной гипертфере S («сфере Фока») в $\mathbf{R}^{(4)}$ [36]:

$$G_E(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \frac{16\nu^5}{[(1 + \nu^2 \mathbf{p}^2)(1 + \nu^2 \mathbf{p}'^2)]^2} \times$$

$$\times \sum_{lm} \sum_{k=l+1}^{\infty} \frac{Y_{klm}(\xi) Y_{klm}^*(\xi')}{1 - \eta/k}, \quad (9)$$

где ξ — единичный вектор в $\mathbf{R}^{(4)}$:

$$\xi = \{\cos \varphi, \sin \varphi \hat{\mathbf{p}}\}, \quad \cos \varphi = \frac{1 - \nu^2 \mathbf{p}^2}{1 + \nu^2 \mathbf{p}^2}.$$

Ортонормированные на сфере S гармоники $Y_{nlm}(\xi)$ имеют вид

$$Y_{nlm}(\xi) = 2^{l+1} l! \left[\frac{n(n-l-1)!}{(n+l)! 2\pi} \right]^{1/2} \times$$

$$\times (\sin \varphi)^l C_{n-l-1}^{l+1}(\cos \varphi) Y_{lm}(\hat{\mathbf{p}}), \quad (10)$$

где $C_m^{l+1}(\cos \varphi)$ — полином Гегенбауэра [31]. Нетрудно убедиться, что представление (9) является импульсным аналогом разложений (4), (7) в координатном пространстве (см., например, [27]). Из (9) можно получить компактное интегральное представление КФГ [36, 37], которое широко используется в расчетах. Многолетняя практика показала примерно одинаковую эффективность координатных и импульсных представлений КФГ: использование того или иного из них в большинстве случаев приводит к равноценным по сложности (или просто совпадающим) результатам.

2.1. Выражение для ядра g_{kk}^l

Нашей целью является получение разложения (6) для $g_l(E; r, r')$ по обобщенным штурмовским функциям с аргументами, содержащими вместо энергетического параметра ν свободные параметры α, α' , которые могут выбираться подходящим образом в каждой конкретной задаче. Заметим, что идея введения свободного параметра в КФГ успешно применялась ранее. В [32] специальная форма однопараметрического штурмовского разложения $g_l(E; r, r')$ была использована для аналитического продолжения матричных элементов на область непрерывного спектра ($E > 0$ в нерелятивистском случае и $|E| > mc^2$ в релятивистском). В [25] было получено однопараметрическое разложение $g_{kk}^l(\nu; \alpha, \alpha')$ для нерелятивистского случая (см. ниже соотношение (17)) на основе альтернативной техники трехчленных рекуррентных соотношений для обратной матрицы кулоновского гамильтониана на квадратично-интегрируемом (L^2 -) базисе $S_{kl}(2r/\alpha)$. Высокая эффективность этого разложения для анализа двухфотонных матричных элементов между одинаковыми водородоподобными состояниями была продемонстрирована в [10].

Для нахождения ядра g_{kk}^l , представления (6) используем формальное переразложение штурмовских функций в (7) в ряд по полной системе этих же функций с другим значением аргумента, содержащим свободный параметр α :

$$S_{kl}\left(\frac{2r}{\nu}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} c_{nk}(\alpha) S_{nl}\left(\frac{2r}{\alpha}\right). \quad (11)$$

Используя полноту функций $S_{nl}(2r/\alpha)$ и известный интеграл от произведения полиномов Лагерра, коэффициенты c_{nk} можно выразить через гипергеометри-

ческую функцию с целыми отрицательными верхними параметрами (гипергеометрический полином):

$$c_{nk}(\alpha) = (-1)^k \frac{(2l+2)_k}{k!} \left(\frac{4\alpha\nu}{(\alpha+\nu)^2} \right)^{l+1} \times \\ \times \left(\frac{\alpha-\nu}{\alpha+\nu} \right)^{n+k} {}_2F_1(-n, -k; 2l+2; z).$$

Здесь и ниже мы пользуемся обозначениями

$$z = -\frac{4\alpha\nu}{(\alpha-\nu)^2}, \quad z' = -\frac{4\alpha'\nu}{(\alpha'-\nu)^2}. \quad (12)$$

Используя для $S_{kl}(2r/\nu)$ и $S_{kl}(2r'/\nu)$ в (7) разложение (11) со свободными параметрами α, α' и коэффициентами $c_{nk}(\alpha), c_{n'k}(\alpha')$, приходим к следующему тождеству:

$$g_{nn'}^l(\nu; \alpha, \alpha') = f(\alpha, \alpha') \sum_{k=0}^{\infty} [(2l+2)_k \times \\ \times {}_2F_1(-n, -k; 2l+2; z) {}_2F_1(-n', -k; 2l+2; z')] \times \\ \times [k!(k+l+1-\eta)[(1-z)(1-z')]^{k/2}]^{-1}, \quad (13)$$

где множитель f имеет вид

$$f(\alpha, \alpha') = \nu \frac{(4\nu\sqrt{\alpha\alpha'})^{2l+2}}{\Gamma(2l+2)} \frac{(\alpha-\nu)^n}{(\alpha+\nu)^{n+2l+2}} \times \\ \times \frac{(\alpha'-\nu)^{n'}}{(\alpha'+\nu)^{n'+2l+2}}.$$

Представив гипергеометрический полином с параметром $-n$ в (13) в дифференциальной форме [5],

$${}_2F_1(-n, -k; 2l+2; z) = \frac{(1-z)^{k+n+2l+2}}{(2l+2)_n z^{2l+1}} \times \\ \times \frac{d^n}{dz^n} [z^{n+2l+1}(1-z)^{-k-2l-2}], \quad (14)$$

и используя элементарное тождество

$$(k+l+1-\eta)^{-1} = \int_0^1 dt t^{k+l-\eta},$$

можно просуммировать ряд (13) с помощью производящей функции [5] для ${}_2F_1(-n', -k; 2l+2; z')$. В результате преобразований получаем

$$g_{nn'}^l(\nu; \alpha, \alpha') = f(\alpha, \alpha') \left. \frac{d^n}{dz^n} \left\{ \varphi_n(z) I_{n'}(z) \right\} \right|_{z_0=z},$$

где

$$\varphi_n(z) = \frac{[z(1-z_0)]^n}{(2l+2)_n} \left(\frac{z}{z_0} \right)^{2l+1} \left(\frac{1-z_0}{1-z} \right)^{l+1+\eta},$$

$$I_{n'}(z) = \int_0^{(1-z_0)/(1-z)} dt \frac{t^{l-\eta}(1-yt)^{n'}}{(1-y't)^{n'+2l+2}}, \quad (15) \\ y = \sqrt{\frac{1-z'}{1-z_0}}, \quad y' = \frac{1}{\sqrt{(1-z')(1-z_0)}}.$$

Дифференцирование $\varphi_n(z)$ снова приводит к гипергеометрическому полиному

$$\left. \frac{d^{n-p}}{dz^{n-p}} \varphi_n(z) \right|_{z_0=z} = \frac{[z(1-z)]^p}{(2l+2)_p} \times \\ \times {}_2F_1(-n+p, l+1-\eta+p; 2l+2+p; z).$$

Интеграл $I_{n'}(z)$ при $z_0 = z$ дает функцию Аппеля F_1 [5]:

$$I_{n'} \equiv I_{n'}(z)|_{z_0=z} = \frac{1}{l+1-\eta} \times \\ \times F_1(l+1-\eta; -n', n'+2l+2; l+2-\eta; y, y'). \quad (16)$$

Из (15) очевидно, что при совпадающих свободных параметрах $\alpha' = \alpha$ все производные $I_{n'}(z)$ по z порядка не выше n' исчезают, если положить $z_0 = z$. Учитывая также, что при $\alpha' = \alpha$ в (16) аргумент $y = 1$, так что функция Аппеля в $I_{n'}$ переходит в ${}_2F_1$, и вводя обозначения $n_{<} = \min\{n, n'\}$, $n_{>} = \max\{n, n'\}$, можем записать $g_{nn'}^l(\nu; \alpha, \alpha)$ в следующем виде

$$g_{nn'}^l(\nu; \alpha, \alpha) = \frac{\nu}{\Gamma(2l+2)} \left(\frac{\alpha-\nu}{\alpha+\nu} \right)^{n_{<}} \times \\ \times {}_2F_1(-n_{<}, l+1-\eta; 2l+2; z) \left(\frac{\alpha^2-\nu^2}{4\alpha\nu} \right)^{n_{>}} \times \\ \times \frac{n_{>}! {}_2F_1(n_{>}+1, n_{>}+2l+2; n_{>}+l+2-\eta; z^{-1})}{(l+1-\eta)_{n_{>}+1}}. \quad (17)$$

При $\alpha' \neq \alpha$ производные от $I_{n'}(z)$ удастся вычислить с использованием производящей функции для функций Аппеля F_1 [38]. Окончательный результат имеет вид

$$g_{nn'}^l(\nu; \alpha, \alpha') = f(\alpha, \alpha') \left[\frac{{}_2F_1(-n, l+1-\eta; 2l+2; z)}{l+1-\eta} \times \right. \\ \times F_1(l+1-\eta; -n', n'+2l+2; l+2-\eta; y, y') + \\ \left. + \sum_{p=1}^n C_n^p (-z)^p [{}_2F_1(-n+p, l+1-\eta+p; 2l+2+p; z)] \times \right. \\ \left. \times \{(2l+2)_p\}^{-1} \Phi_p^{l, n'} \right]. \quad (18)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \Phi_p^{l,n'} &= -\frac{(l+2+\eta-p)_{p-1}(1-y)^{n'}}{(1-y')^{n'+2l+2}} \times \\ &\times F_1(-p+1; -n', n'+2l+2; \\ &\quad l+2+\eta-p; 1/(1-y), 1/(1-y')), \\ y &= \frac{\alpha-\nu}{\alpha+\nu} \frac{\alpha'+\nu}{\alpha'-\nu}, \quad y' = \frac{\alpha-\nu}{\alpha+\nu} \frac{\alpha'-\nu}{\alpha'+\nu}, \end{aligned}$$

C_n^p — биномиальный коэффициент. Функция Аппеля в $\Phi_p^{l,n'}$ есть конечный полином по обоим аргументам. Следовательно, (18) содержит две существенно различающиеся группы членов: функция Аппеля в первом члене имеет целый отрицательный параметр $-n'$ и эквивалентна линейной комбинации $(n'+1)$ не сводящихся к полиномам гипергеометрических функций ${}_2F_1$; члены с $\Phi_p^{l,n'}$ представляют собой произведение гипергеометрических полиномов одной переменной (${}_2F_1$) и двух переменных (F_1). Нетрудно проверить, что при $\alpha' = \alpha$ (18) переходит в (17). В изложенном выводе не использовалась целочисленность параметра l , поэтому, как отмечалось выше (см. также [26]), все результаты справедливы и для радиальной КФГ квадрированного уравнения Дирака с нецелым $l = \gamma$. При целых l выражение (17) совпадает с результатом работы [25].

Отметим, что вывод выражений для $g_{kk'}^l(\nu; \alpha, \alpha')$ можно провести, преобразуя в (13) вторую, а не первую функцию ${}_2F_1$. В этом случае для $g_{kk'}^l(\nu; \alpha, \alpha')$ получается выражение, которое следует из (18) при замене $(k, \alpha) \rightleftharpoons (k', \alpha')$. Этот результат соответствует условию симметрии

$$g_{kk'}^l(\nu; \alpha, \alpha') = g_{k'k}^l(\nu; \alpha', \alpha), \quad (19)$$

которое очевидно уже из исходного разложения (6). Обратим внимание, что условие симметрии (19) и явное выражение (18) для $g_{kk'}^l(\nu; \alpha, \alpha')$ определяют нетривиальное тождество, связывающее билинейные формы, которые содержат функции ${}_2F_1$ и F_1 (см. (A.1) в Приложении А). Указанное тождество может оказаться полезным для преобразования матричных элементов, рассчитанных с функцией (6) (см. ниже разд. 5.1).

2.2. Разложение КФГ на резонансную и потенциальную части

Полученные выше двойные ряды для $g_l(E; r, r')$ имеют более сложную структуру по сравнению со стандартным штурмовским разложением (7), поэтому представляется интересным проверить выполне-

ние для них общих свойств функции Грина. С другой стороны, формулы (6), (17), (18) позволяют получить новые результаты, в частности, разложение $g_l(E; r, r')$ на резонансную (содержащую полюсы при $E = E_n$) и потенциальную (гладко зависящую от E) части:

$$g_l(E; r, r') = g_l^{res}(E; r, r') + g_l^{pot}(E; r, r'). \quad (20)$$

В наиболее простом случае $\alpha' = \alpha$ ядра штурмовского разложения (6) для $g_l^{res}(E; r, r')$ и $g_l^{pot}(E; r, r')$ имеют вид (см. Приложение А):

$$\begin{aligned} g_{kk'}^{l,res}(\nu; \alpha) &= \frac{1}{\Gamma(2l+2)} \frac{\nu}{l+1-\eta} \left(\frac{\alpha-\nu}{\alpha+\nu}\right)^{k+k'} \times \\ &\times {}_2F_1(1, 2l+2; l+2-\eta; z^{-1}) \times \\ &\times {}_2F_1(-k, l+1-\eta; 2l+2; z) \times \\ &\times {}_2F_1(-k', l+1-\eta; 2l+2; z), \quad (21) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} g_{kk'}^{l,pot}(\nu; \alpha) &= \frac{-\nu}{\Gamma(2l+2)} \left(\frac{\alpha-\nu}{\alpha+\nu}\right)^{k+k'} \times \\ &\times {}_2F_1(-k_{<}, l+1-\eta; 2l+2; z) \sum_{p=1}^{k_{>}} \frac{C_{k_{>}}^p (-z)^p (\eta-l)_{p-1}}{(k_{>}+2l+2-p)_p} \times \\ &\times {}_2F_1(-k_{>}+p, l+1-\eta; 2l+2; z) \times \\ &\times {}_2F_1(-p+1, 2l+2-p; l+2-\eta-p; z^{-1}). \quad (22) \end{aligned}$$

Нетрудно проверить, что $g_{kk'}^{l,pot}$ есть гладкая функция энергии E (параметра η), в то время как $g_{kk'}^{l,res}$ имеет полюсы при $l+1-\eta = -n_r = 0, -1, -2, \dots$, которые соответствуют резонансам на уровнях дискретного спектра с $E = E_n$.

Резонансный член (21) является симметричным и факторизованным по k, k' , поэтому двойная сумма в выражении типа (6) для g_l^{res} вычисляется в замкнутом виде с использованием соотношения (A.7) Приложения А:

$$\begin{aligned} g_l^{res}(\nu; r, r') &= \frac{1}{(2l+1)!} \frac{\nu}{l+1-\eta} \left(\frac{\nu^2-\alpha^2}{4\alpha\nu}\right)^{2l+2} \times \\ &\times \left(\frac{\nu+\alpha}{\nu-\alpha}\right)^{2\eta} {}_2F_1(1, 2l+2; l+2-\eta; z^{-1}) \times \\ &\times \frac{1}{rr'} M_{\eta, l+1/2}(2r/\nu) M_{\eta, l+1/2}(2r'/\nu). \quad (23) \end{aligned}$$

Устремив здесь $\eta \rightarrow l+1+n_r$, где $n_r = 0, 1, \dots$, можно проверить, что вычеты в полюсах при $E = E_n$ равны произведению соответствующих собственных функций $R_{nl}(r)$ и $R_{nl}(r')$.

Исходя из выражения (22), непосредственной проверкой можно показать, что при вещественном

α потенциальное слагаемое $g_l^{pot}(E; r, r')$ является вещественным при всех вещественных E , однако это обстоятельство проще выяснить, основываясь на результатах работы [10]. Запишем выражение (17) для $g_{kk'}^l(\nu; \alpha, \alpha)$ в обозначениях [25, 10]:

$$g_{kk'}^l(E, \alpha, \alpha) = \frac{2\alpha p_{k<}^l(x, \alpha) q_{k>}^{+l}(E, \alpha)}{(1+2E\alpha^2)(k+1)_{2l+1}(k'+1)_{2l+1}}, \quad (24)$$

где

$$p_k^l(x, \alpha) = \frac{(2l+2)_k}{k!} \left(\frac{\alpha - \nu}{\alpha + \nu} \right)^k \times \\ \times {}_2F_1(-k, l+1-\eta; 2l+2; z), \quad (25)$$

$$q_k^{+l}(E, \alpha) = -2 \frac{\Gamma(k+2l+2)}{(l+1-\eta)_{k+1}} \left(\frac{\alpha^2 - \nu^2}{4\alpha\nu} \right)^{k+1} \times \\ \times {}_2F_1(k+1, k+2l+2; k+l+2-\eta; z^{-1}). \quad (26)$$

Введенные выше функции p_k^l , пропорциональные гипергеометрическим полиномам ${}_2F_1$ k -го порядка по степеням z , представляют собой также полиномы k -го порядка по степеням

$$x = \frac{2E\alpha^2 - 1}{2E\alpha^2 + 1}$$

(полиномы Поллачека [31]). Эти полиномы удовлетворяют трехчленному рекуррентному соотношению

$$(k+1)p_{k+1}^l - 2((k+l+1-\alpha Z)x + \alpha Z)p_k^l + \\ + (k+2l+1)p_{k-1}^l = 0 \quad (27)$$

с начальными условиями

$$p_0^l = 1, \quad p_{-1}^l = 0$$

и относятся к классу так называемых неклассических ортогональных полиномов [31]. Функции q_k^{+l} названы в [25] функциями Поллачека и представляют собой второе, линейно-независимое от p_k^l , решение рекуррентного соотношения (27). Отметим, что, как следует из (26), $q_{-1}^{+l} = -2(2l)!$, а гипергеометрическая функция, входящая в (23), пропорциональна q_0^{+l} . Мы используем здесь полиномы и функции Поллачека как удобные обозначения, через которые можно в компактном виде записать функцию Грина при $\alpha' = \alpha$. При решении кулоновской задачи путем введения квадратично-интегрируемого базиса $S_{kl}(2r/\alpha)$ рекуррентное соотношение (27) является аналогом уравнения Шредингера и функция Грина была построена через два линейно-независимых

решения (27) [25] (см. также [39]). В обозначениях p_k^l, q_k^{+l} соотношение (А.6) из Приложения А может быть переписано в следующем виде [10]:

$$q_k^{+l}(E, \alpha) = \bar{q}_k^l(x, \alpha) + p_k^l(x, \alpha)q_0^{+l}(E, \alpha). \quad (28)$$

Введенные здесь функции $\bar{q}_k^l(x, \alpha)$ удовлетворяют соотношению (27) с начальными условиями $\bar{q}_0^l = 0, \bar{q}_{-1}^l = -2(2l)!$ (которые очевидны из начальных условий для q_k^{+l} и p_k^l) и, таким образом, являются полиномами по x . Хотя этот факт и был установлен в работе [10], явное выражение для полиномов $\bar{q}_k^l(x, \alpha)$ не было получено. Формула (А.6) позволяет найти замкнутое (хотя и достаточно громоздкое) выражение для \bar{q}_k^l в виде билинейной суммы гипергеометрических полиномов.

Имея в виду приложения функций Грина в форме (18) или (17), (24) к вычислению матричных элементов двухфотонных переходов, положим свободный параметр $\alpha = n/Z$ и запишем энергетический параметр функции Грина в виде $E = E_n \pm \omega$. Тогда $x = 1 \mp 2/\tilde{\omega}$, где $\tilde{\omega} = 2Z^{-2}n^2\omega$ — безразмерная частота, измеряемая в единицах потенциала ионизации рассматриваемого состояния $|nl\rangle$. Теперь из (27) легко видеть, что p_k^l и \bar{q}_k^l представляют собой вещественные полиномы по степеням $1/\tilde{\omega}$. Таким образом, мы убеждаемся в вещественности потенциального слагаемого (22) в функции Грина, которое пропорционально произведению $p_k^l(x, \alpha)\bar{q}_k^l(x, \alpha)$, и конкретизируем частотную зависимость указанных полиномов.

Резонансные слагаемые (21), (23) комплексны при $E > 0$, и в соответствии с общими свойствами функции Грина при положительной энергии должно выполняться соотношение

$$\text{Im } g_l^{res}(E > 0; r, r') = \text{Im } g_l(E > 0; r, r') = \\ = i\pi R_{El}(r) R_{El}(r'), \quad (29)$$

где $R_{El}(r)$ — нормированные на энергию волновые функции непрерывного спектра:

$$R_{El}(r) = \frac{i^{l+1}}{(2l+1)!} \frac{C_{El}}{2p} \frac{1}{r} M_{ia, l+1/2}(-2ipr), \\ C_{El} = \sqrt{\frac{2p}{\pi}} e^{\pi a/2} |\Gamma(l+1+ia)|, \quad (30)$$

$a = Z/p, p = \sqrt{2E}$. В справедливости (29) можно убедиться, непосредственно выделяя мнимую часть g_l^{res} в (23). При этом следует учесть, что при вещественных α произведение функций Уиттекера является вещественным, а мнимая часть комплексных членов может быть найдена с помощью соотношения (А.8) Приложения А.

В заключение отметим, что трехмерная КФГ (4) также может быть представлена в виде суммы резонансного и потенциального слагаемых:

$$G(E; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = G^{res}(E; \mathbf{r}, \mathbf{r}') + G^{pot}(E; \mathbf{r}, \mathbf{r}'), \quad (31)$$

где выражения для G^{res} и G^{pot} очевидны из (4), (6), (21), (22). Разделение функций Грина на резонансную и потенциальную части удобно в ряде приложений, в частности, в столкновительных задачах (см., например, [40, 41]). Очевидно, что разложение мероморфной функции G_E на сложным образом зависящие от энергии «полюсную» и «гладкую» части неоднозначно и (31) дает лишь одно из таких представлений (см. подробнее в [41, 42]). Выражение для резонансной части КФГ $g_l(E; r, r')$ в записи через функции Уиттекера, входящие в (23), было получено в [40] (см. также [42]) с использованием стандартного представления $g_l(E; r, r')$ через функции Уиттекера с аргументами $r_>, r_<$, где $r_>(r_<) = \max\{r, r'\}(\min\{r, r'\})$.

2.3. Двухпараметрическое импульсное представление КФГ

Свободные параметры можно ввести и в импульсное представление КФГ в форме (9). Простейший способ состоит в вычислении преобразования Фурье (по переменным \mathbf{r} и \mathbf{r}') выражения (4) с использованием разложения (6) для $g_l(E; r, r')$. Вычисляя интеграл от произведения полинома Лагерра $L_n^\alpha(x)$ и сферической функции Бесселя $j_l(pr)$ (возникающий при преобразовании Фурье) с использованием производящих функций для $L_n^\alpha(x)$ и полиномов Гегенбауэра $C_k^\beta(\cos \varphi)$, а также учитывая определение (10) гиперсферической гармоники Y_{nlm} , получаем

$$G_E(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \sum_{lm} \sum_{k, k'=l+1}^{\infty} G_{kk'}^l(\nu; \alpha, \alpha') \times Y_{klm}(\xi) Y_{k'lm}^*(\xi'), \quad (32)$$

где

$$\xi = \{\cos \varphi, \sin \varphi \hat{\mathbf{p}}\}, \quad \cos \varphi = \frac{1 - \alpha^2 \mathbf{p}^2}{1 + \alpha^2 \mathbf{p}^2},$$

а ξ' определяется аналогичным образом через \mathbf{p}', α' . Ядро разложения (32) имеет вид

$$G_{kk'}^l(\nu; \alpha, \alpha') = (-1)^{k+k'} \left[\frac{4\alpha\alpha'}{(1+\alpha^2\mathbf{p}^2)(1+\alpha'^2\mathbf{p}'^2)} \right]^2 \times \sqrt{\frac{k(k+l)!}{(k-l-1)!}} \sqrt{\frac{k'(k'+l)!}{(k'-l-1)!}} \times g_{k-l-1, k'-l-1}^l(\nu; \alpha, \alpha'), \quad (33)$$

где $g_{nn'}^l(\nu; \alpha, \alpha')$ определяется соотношениями (17) или (18). При $\alpha' = \alpha = \nu$ (32) переходит в (9).

3. МАТРИЧНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ НЕУПРУГИХ ДВУХФОТОННЫХ ПЕРЕХОДОВ

Необходимость вычисления матричных элементов двухфотонных переходов между состояниями дискретного спектра $|nl\rangle$ и $|n'l'\rangle$ с $n' \neq n$ возникает как при исследовании реальных двухфотонных процессов (комбинационного рассеяния света атомом, двухфотонного возбуждения или распада атомных состояний), так и в случае многофотонных переходов при наличии двухфотонных резонансов на промежуточных уровнях (ионизация, генерация высших гармоник лазерного излучения). В частности, двухфотонный резонанс играет определяющую роль в экспериментах по генерации смешанных частот в различных схемах четырехволнового смешения в условиях самоиндуцированной прозрачности газовой среды (см., например, [43], а также работу [44] по резонансной генерации УФ излучения в схеме

$$E_{1s} + \omega + \omega + \omega' = E_{np}$$

на переходах $|np\rangle \rightarrow |1s\rangle$ с $n = 3-8$ в атомарном водороде).

Как показывает практика, в аналитических расчетах двухфотонных матричных элементов наиболее удобно использовать оператор взаимодействия электрона с полем в «форме скорости»:

$$V = \frac{i}{c} \mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{1}{2c^2} \mathbf{A}^2,$$

где \mathbf{A} — векторный потенциал поля волны с электрическим вектором

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = F \operatorname{Re} \{ \mathbf{e} \exp(-i\omega t + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \}, \quad (34)$$

$$|\mathbf{k}| = \omega/c, \quad \mathbf{e} \cdot \mathbf{k} = 0, \quad \mathbf{e} \cdot \mathbf{e}^* = 1.$$

В дипольном приближении слагаемое с \mathbf{A}^2 не дает вклада в амплитуды неупругих переходов, которые

после интегрирования по угловым переменным выражаются через радиальные матричные элементы вида

$$M_{ll'}^l(n, n', E) = \langle n'l' | \hat{D}(l', L) g_L(E) \hat{D}(L, l) | nl \rangle, \quad (35)$$

где

$$\hat{D}(l_1, l_2) = \frac{d}{dr} + \frac{\text{sgn}(l_2 - l_1) \max(l_1, l_2) + 1}{r}.$$

Отметим, что в случае неупругих переходов матричные элементы в форме «скорости» (35) связаны с матричными элементами в форме «длины» (2) простым соотношением

$$\begin{aligned} \langle n'l' | \hat{D}(l', L) g_L(E) \hat{D}(L, l) | nl \rangle = \\ = (E_{n'} - E)(E - E_n) \langle n'l' | r g_L(E) r | nl \rangle \end{aligned}$$

(ср. ниже с формулой (55) для упругих переходов), которое легко проверить, используя коммутационные соотношения между операторами импульса и координаты.

Используя для g_L разложение (6), для $M_{ll'}^l(n, n', E)$ можно получить замкнутые аналитические выражения, справедливые при любых n, n' . Для этого запишем результат действия операторов на волновые функции в (35) в виде

$$\begin{aligned} \hat{D}(l+1, l) R_{nl}(r) &= \frac{2Z^{5/2}}{n^3 [(d)_{2l+1}]^{1/2}} \rho^l e^{-\rho/2} \times \\ &\times (L_{d-3}^{2l+3}(\rho) - L_{d-1}^{2l+3}(\rho)), \\ \hat{D}(l+1, l+2) R_{nl+2}(r) &= \\ &= \frac{2Z^{5/2}}{n^3 [(d-3)_{2l+5}]^{1/2}} \rho^l e^{-\rho/2} \times \\ &\times ((s+1)(s+2) L_{d-3}^{2l+3}(\rho) - \\ &- (d-1)(d-2) L_{d-1}^{2l+3}(\rho)), \end{aligned} \quad (36)$$

где

$$d = n - l, \quad s = n + l, \quad \rho = 2Zr/n,$$

$$R_{nl}(r) = 2Z^{3/2} n^{-2} [(d)_{2l+1}]^{-1/2} \rho^l e^{-\rho/2} L_{d-1}^{2l+1}(\rho)$$

— радиальная волновая функция состояния $|nl\rangle$, и выберем значения свободных параметров в (6) следующим образом:

$$\alpha = n/Z, \quad \alpha' = n'/Z. \quad (37)$$

В результате интегрирование по r, r' в (35) сводится к непосредственному использованию условия ортогональности полиномов Лагерра

$$\int_0^\infty e^{-\rho} \rho^\beta L_n^\beta(\rho) L_m^\beta(\rho) d\rho = \frac{\Gamma(\beta + n + 1)}{n!} \delta_{mn}, \quad (38)$$

суммы в разложении (6) становятся конечными и $M_{ll'}^l(n, n', E)$ выражаются в виде простой линейной комбинации четырех величин $g_{kk'}^l = g_{kk'}^l(v; n/Z, n'/Z)$:

$$\begin{aligned} M_{ll}^{l+1}(n, n', E) &= -Z \frac{[(d)_{2l+1} (d')_{2l+1}]^{1/2}}{4nn'} \times \\ &\times \left((d-1)(d-2)(d'-1)(d'-2) g_{d-3, d'-3}^{l+1} - \right. \\ &- (s+1)(s+2)(d'-1)(d'-2) g_{d-1, d'-3}^{l+1} - \\ &- (d-1)(d-2)(s'+1)(s'+2) g_{d-3, d'-1}^{l+1} + \\ &\left. + (s+1)(s+2)(s'+1)(s'+2) g_{d-1, d'-1}^{l+1} \right), \quad (39) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} M_{ll}^{l-1}(n, n', E) &= -Z \frac{[(d)_{2l+1} (d')_{2l+1}]^{1/2}}{4nn'} \times \\ &\times \left(g_{d-1, d'-1}^{l-1} - g_{d+1, d'-1}^{l-1} - g_{d-1, d'+1}^{l-1} + g_{d+1, d'+1}^{l-1} \right), \quad (40) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} M_{ll+2}^{l+1}(n, n', E) &= -Z \frac{[(d)_{2l+1} (d'-2)_{2l+5}]^{1/2}}{4nn'} \times \\ &\times \left((d-1)(d-2) g_{d-3, d'-3}^{l+1} - (s+1)(s+2) g_{d-1, d'-3}^{l+1} - \right. \\ &\left. - (d-1)(d-2) g_{d-3, d'-1}^{l+1} + (s+1)(s+2) g_{d-1, d'-1}^{l+1} \right). \quad (41) \end{aligned}$$

Выше введены обозначения для разности и суммы n' и l :

$$d' = n' - l, \quad s' = n' + l.$$

Еще один матричный элемент, разрешенный дипольными правилами отбора, получается из (41) заменой индексов:

$$M_{ll-2}^{l-1}(n, n', E) = M_{ll+2}^{l+1}(n', n, E) \Big|_{l \rightarrow l-2}. \quad (42)$$

Таким же способом могут быть рассчитаны и матричные элементы типа

$$M^{m, m'} = \langle n'l' | r^{m'} g_L(E) r^m | nl \rangle,$$

которые возникают при использовании оператора дипольного взаимодействия в форме «длины» ($m, m' = 1$), а также при учете квадрупольных и т. д. членов ($m, m' \geq 2$) во взаимодействии с полем. При выборе свободных параметров согласно (37) матричные элементы $M^{m, m'}$ выражаются через интегралы от произведения двух полиномов Лагерра с одинаковыми аргументами, элементарное вычисление которых с помощью рекуррентных соотношений снова сводится к применению условия ортогональности (38). В результате явное выражение для

$M^{m,m'}$, как и выше, представляет собой конечную линейную комбинацию функций $g_{kk'}^l$. Обратим внимание на своеобразие расчетов с обобщенным штурмовским разложением: если свободные параметры выбираются в соответствии с (37), то вся энергетическая зависимость функции Грина (6) (а следовательно, и частотная зависимость матричных элементов) содержится в функциях $g_{kk'}^l$, которые заранее известны и определяются формулой (18). Интегрирование же по радиальным переменным позволяет лишь определить зависящие от квантовых чисел n, l, n', l' рациональные коэффициенты при $g_{kk'}^l$ в формулах типа (39)–(41).

Формулы (39)–(42) являются двухфотонным аналогом формул Гордона (1), поскольку дают точные выражения для матричных элементов двухфотонных дипольных переходов через гипергеометрические функции. По очевидным причинам двухфотонные формулы Гордона значительно сложнее однофотонных. Во-первых, они уже не сводятся к полиномам, а содержат функцию Аппеля F_1 с целым отрицательным верхним параметром, которая эквивалентна конечной линейной комбинации гипергеометрических функций ${}_2F_1$. Кроме того, $M_{ll'}^l$ выражаются через произведения гипергеометрических функций и гипергеометрических полиномов. Тем не менее формулы (39)–(42) дают максимально простые выражения для двухфотонных дипольных матричных элементов. Отметим, что ранее [15] матричные элементы типа (35) были выражены через специально введенные для этой задачи громоздкие функции гипергеометрического типа от четырех параметров и трех аргументов, существенно более сложные, чем (39)–(42).

Общие формулы заметно упрощаются при максимальных значениях орбитального момента начального и/или конечного состояний. При этом в (39)–(42) выпадают члены, которые содержат $g_{kk'}^l$ с отрицательными нижними индексами, поскольку множители при них обращаются в нуль (то обстоятельство, что матричные элементы не могут выражаться через $g_{kk'}^l$, с $k, k' < 0$ очевидно уже из исходного разложения (6)). Особенно прост случай переходов $|n s\rangle \rightarrow |n' s\rangle$ с $n = 1, 2$ и $n' > n$. Матричные элементы таких переходов можно записать единой формулой:

$$M_{00}^1(n, n', E) = \frac{3}{2} \left(\frac{n}{n'}\right)^{1/2} \times \\ \times ((n'-1)(n'-2)g_{0,n'-3}^1 - (n'+1)(n'+2)g_{0,n'-1}^1) +$$

$$+ \delta_{n,2} \frac{2^{13/2} n'^{5/2} \nu^2}{3(\nu^2 - 4)(n'^2 - 4)^2} \left(\frac{n' - 2}{n' + 2}\right)^{n'}, \quad (43)$$

где $n = 1$ или 2. Функции $g_{kk'}^l$ с нулевым индексом k или k' имеют достаточно компактный вид:

$$g_{0k}^1 = \frac{\nu}{6(2 - \eta)} \left(\frac{16nn'\eta^2}{(n + \eta)^2(n' + \eta)^2}\right)^2 \left(\frac{n' - \eta}{n' + \eta}\right)^k \times \\ \times F_1(2 - \eta; -k, k + 4; 3 - \eta; y, y'), \\ y = \frac{n - \eta}{n + \eta} \frac{n' + \eta}{n' - \eta}, \quad y' = \frac{n - \eta}{n + \eta} \frac{n' - \eta}{n' + \eta}.$$

При $n = 1$ последнее слагаемое в (43) отсутствует и результат выражается через две функции Аппеля F_1 . Аналогичное (43) выражение для матричного элемента перехода $|1s\rangle \rightarrow |nd\rangle$ имеет вид

$$M_{02}^1(1, n', E) = \frac{3}{2} (n')^{-1/2} (n'^2 - 1)^{1/2} \times \\ \times (n'^2 - 4)^{1/2} (g_{0,n'-3}^1 - g_{0,n'-1}^1).$$

Для переходов $|1s\rangle \rightarrow |ns\rangle$ и $|1s\rangle \rightarrow |nd\rangle$ приведенные выражения совпадают с результатами [15] (формулы (34), (35)).

Через матричные элементы (35) выражается сечение любого двухфотонного перехода между связанными состояниями. Так, сечение комбинационного рассеяния с переходом $|nl\rangle \rightarrow |n'l + 2\rangle$ содержит лишь $M_{ll+2}^{l+1}(n, n', E)$:

$$\frac{d\sigma_{nl,n'l+2}}{d\Omega_{\mathbf{k}'}} = \alpha^4 \frac{\omega'}{\omega} \frac{(l+1)(l+2)}{10(2l+1)(2l+3)} \times \\ \times |M_{ll+2}^{l+1}(n, n', E_n + \omega) + M_{ll+2}^{l+1}(n, n', E_n - \omega')|^2 \times \\ \times \left(1 + |\mathbf{e}' \cdot \mathbf{e}|^2 - \frac{2}{3} |\mathbf{e}' \cdot \mathbf{e}^*|^2\right), \quad (44)$$

где α — постоянная тонкой структуры, \mathbf{e} и ω (\mathbf{e}' и ω') — частота и вектор поляризации падающего (рассеянного) фотона.

В таблице 1 приведены численные значения матричных элементов $M_{ll\pm 2}^{l\pm 1}(n, n', E)$, $M_{ll}^{l\pm 1}(n, n', E)$, $n' > n$, $E = (E_n + E_{n'})/2$. Из таблицы видно, что с ростом орбитального момента конечного состояния увеличивается значение соответствующего матричного элемента, что аналогично известному правилу Бете для однофотонных матричных элементов.

4. ДВУХФОТОННЫЕ ФОРМУЛЫ ГОРДОНА ДЛЯ СВЯЗАННО-СВОБОДНЫХ ПЕРЕХОДОВ

Обобщение результатов предыдущего раздела на случай, когда одно из состояний принадлежит непре-

Таблица 1. Значения матричных элементов $M_{ll\pm 2}^{l\pm 1}(n, n', E)$, $M_{ll}^{l\pm 1}(n, n', E)$, $E = (E_n + E_{n'})/2$

n	l	n'	$M_{ll-2}^{l-1}(n, n')$	$M_{ll}^{l-1}(n, n')$	$M_{ll}^{l+1}(n, n')$	$M_{ll+2}^{l+1}(n, n')$
3	2	10	3.33409(-1)	7.26967(-1)	9.11768(-1)	5.65901(0)
3	2	15	5.64955(-2)	8.70688(-2)	2.20482(-1)	8.40251(-1)
3	2	20	2.66131(-2)	3.21271(-2)	1.20379(-1)	3.73535(-1)
10	9	15	-2.30971(-2)	-4.68375(-1)	5.97962(-2)	-4.36418(0)
10	9	20	-3.53832(-3)	-1.14158(-1)	5.93551(-2)	-5.75417(-1)
10	9	25	6.64088(-3)	2.07508(-2)	1.06041(-1)	8.80864(-1)

ривному спектру с энергией E , позволяет получить замкнутые аналитические выражения для амплитуд комптоновского рассеяния достаточно жесткого фотона частоты ω с ионизацией атома и испусканием фотона частоты $\omega' = E_n + \omega - E$, а также двухфотонной ионизации состояния с произвольными квантовыми числами n, l . Исползованный выше способ расчета амплитуд переходов между состояниями дискретного спектра, основанный фактически на соотношении ортогональности для полиномов Лагера, не может быть перенесен на этот случай, поскольку для функций непрерывного спектра не существует соотношения, аналогичного (38). Однако, как и при обобщении однофотонных формул Гордона на случай фотоионизации или фоторекомбинации, анализ показывает, что выражения (39)–(41) можно аналитически продолжить по одной из переменных n, n' на область непрерывного спектра энергий. Так, чтобы получить

$$M_{l'l}^L(n, E, \mathcal{E}) = \langle R_{E'l'} | \hat{D}(l', L) g_L(\mathcal{E}) \hat{D}(L, l) | R_{nl} \rangle \quad (45)$$

из $\langle n' l' | \hat{D}(l', L) g_L(\mathcal{E}) \hat{D}(L, l) | n l \rangle$, необходимо произвести замену $n' \rightarrow iZ/p$, где $p = \sqrt{2E}$, и ввести дополнительный множитель, учитывающий различие в нормировке волновых функций дискретного и непрерывного спектра.

Выпишем здесь в справочных целях все четыре радиальных матричных элемента, возникающих при расчете амплитуды связанно-свободного перехода из состояния $|n, l\rangle$:

$$M_{ll}^{l+1}(n, E, \mathcal{E}) = -i^{l+1} a C_{El} \frac{[(d)_{2l+1}]^{1/2}}{8nZ^{1/2}} \times \left[(d-1)(d-2)(l+1-ia)(l+2-ia) g_{d-3, ia-l-3}^{l+1} - \right.$$

$$\left. - (s+1)(s+2)(l+1-ia)(l+2-ia) g_{d-1, ia-l-3}^{l+1} - (d-1)(d-2)(l+1+ia)(l+2+ia) g_{d-3, ia-l-1}^{l+1} + (s+1)(s+2)(l+1+ia)(l+2+ia) g_{d-1, ia-l-1}^{l+1} \right], \quad (46)$$

$$M_{ll}^{l-1}(n, E, \mathcal{E}) = -i^{l+1} a C_{El} \frac{[(d)_{2l+1}]^{1/2}}{8nZ^{1/2}} \times \left[g_{d-1, ia-l-1}^{l-1} - g_{d+1, ia-l-1}^{l-1} - g_{d-1, ia-l+1}^{l-1} + g_{d+1, ia-l+1}^{l-1} \right], \quad (47)$$

$$M_{ll+2}^{l+1}(n, E, \mathcal{E}) = -i^{l+3} a C_{El+2} \frac{[(d)_{2l+1}]^{1/2}}{8nZ^{1/2}} \times \left[(d-1)(d-2) g_{d-3, ia-l-3}^{l+1} - (s+1)(s+2) g_{d-1, ia-l-3}^{l+1} - (d-1)(d-2) g_{d-3, ia-l-1}^{l+1} + (s+1)(s+2) g_{d-1, ia-l-1}^{l+1} \right], \quad (48)$$

$$M_{ll-2}^{l-1}(n, E, \mathcal{E}) = -i^{l-1} a C_{El-2} \frac{[(d)_{2l+1}]^{1/2}}{8nZ^{1/2}} \times \left[(l-1-ia)(l-ia) g_{d-1, ia-l-1}^{l-1} - (l-1-ia)(l-ia) g_{d+1, ia-l-1}^{l-1} - (l-1+ia)(l+ia) g_{d-1, ia-l+1}^{l-1} + (l-1+ia)(l+ia) g_{d+1, ia-l+1}^{l-1} \right], \quad (49)$$

где

$$a = Z/p, \quad C_{El} = \sqrt{\frac{2p}{\pi}} e^{\pi\alpha/2} |\Gamma(l+1-ia)|.$$

Как видно, матричные элементы выражаются через ядро $g_{kk'}^l$ разложения (6), которое должно быть

взято при комплексном значении второго индекса, $k' = \beta$, и следующих аргументах (см. (18)):

$$g_{k\beta}^l = g_{k\beta}^l(\nu; n/Z, i/p).$$

При этом первый член в (18) содержит полную функцию Аппеля F_1 , которая, в отличие от случая связанно-связанных переходов, уже не сводится к комбинации функций ${}_2F_1$. Существенно отметить, что функции $\Phi_p^{l, n' = i/p}$ в формуле (18) для $g_{k\beta}^l(\nu; n/Z, i/p)$ по-прежнему выражаются через гипергеометрические полиномы. Таким образом, при произвольных n и l каждая из четырех парциальных амплитуд $M_{l\nu}^l(n, E, \mathcal{E})$ в свою очередь есть комбинация четырех слагаемых, каждое из которых представляет собой сумму самое большее $n_r + 2$ ($n_r = n - l - 1$) нерезонансных (гладко зависящих от частоты) полиномиальных членов и резонансного слагаемого, которое есть произведение гипергеометрического полинома порядка n_r или $n_r + 2$ на полную функцию Аппеля F_1 (первый член в (18)). Очевидно, численный расчет указанных величин не представляет технических трудностей как при $|E_n|/2 < \omega < |E_n|$, так и в надпороговом случае $\omega > |E_n|$.

Строго говоря, описанное выше аналитическое продолжение амплитуд из области дискретного в область непрерывного спектра энергии могло бы оказаться некорректным, однако в нашем случае при выполнении указанной процедуры не возникают неоднозначности, а полученные выражения согласуются с известными ранее аналитическими и численными результатами для ряда частных случаев. В частности, двухфотонные формулы Гордона (46)–(49) полностью решают задачу о двухфотонной ионизации водородного атома из произвольного состояния $|nl\rangle$, поскольку как полное сечение, так и угловое распределение фотоэлектронов выражаются через $M_{l\nu}^l(n, E, \mathcal{E})$. Например, проинтегрированное по углам вылета фотоэлектрона сечение двухфотонной ионизации в поле (34) с линейной поляризацией имеет вид

$$\begin{aligned} \sigma_{nl} = & \frac{\pi^2 \alpha F^2 \omega}{15(2l+1)} \left(\frac{(l+1)(4l^2+8l+5)}{(2l+1)(2l+3)} |M_{ll}^{l+1}|^2 + \right. \\ & + \frac{l(4l^2+1)}{(2l-1)(2l+1)} |M_{ll}^{l-1}|^2 + \frac{4l(l+1)}{2l+1} \operatorname{Re}((M_{ll}^{l+1})^* M_{ll}^{l-1}) + \\ & \left. + \frac{2(l+1)(l+2)}{2l+3} |M_{l+2}^{l+1}|^2 + \frac{2l(l-1)}{2l-1} |M_{l-2}^{l-1}|^2 \right), \quad (50) \end{aligned}$$

где

$$M_{l\nu}^l = M_{l\nu}^l(n, E, \mathcal{E}), \quad E = E_n + 2\omega, \quad \mathcal{E} = E_n + \omega.$$

Аналогичные выражения для случая эллиптической поляризации волны для параметров углового распределения фотоэлектронов приведены в [45].

Как и в случае связанно-связанных переходов, результаты заметно упрощаются при $l \sim n$. Так, если начальное состояние имеет максимальное значение орбитального момента, $l = n - 1$ ($n_r = 0$), то, например, матричные элементы (46), (48) принимают вид

$$\begin{aligned} M_{n-1, n-1}^n(n, E, \mathcal{E}) = & i(-1)^n [(2n-1)!]^{1/2} \frac{a C_{E, n-1}}{4Z^{1/2}} \times \\ & \times ((n-ia)(n+1-ia)F(0) - \\ & - (n+ia)(n+1+ia)F(2)), \\ M_{n-1, n+1}^n(n, E, \mathcal{E}) = & i(-1)^{n+1} [(2n-1)!]^{1/2} \times \\ & \times \frac{a C_{E, n+1}}{4Z^{1/2}} (F(0) - F(2)), \quad (51) \end{aligned}$$

и выражаются лишь через функцию F_1 :

$$\begin{aligned} F(m) = & \frac{\nu}{n+1-\eta} \frac{(4\eta)^{2n+2}}{(2n)!} \frac{(an)^{n+1}}{(n+\eta)^{2n+2}} \times \\ & \times \frac{(ia-\eta)^{ia-n-2+m}}{(ia+\eta)^{ia+n+m}} \times \\ & \times F_1(n+1-\eta; -ia+n+2-m, ia+n+m; n+2-\eta; y, y'), \end{aligned}$$

$$y = \frac{n-\eta}{n+\eta} \frac{ia+\eta}{ia-\eta}, \quad y' = \frac{n-\eta}{n+\eta} \frac{ia-\eta}{ia+\eta}.$$

Для основного состояния $n = 1$ два других матричных элемента (47), (49) не входят в амплитуду перехода и приведенные здесь результаты полностью совпадают с полученными в [18] (см. также [19]).

Относительно простые выражения (46)–(49) для матричных элементов позволяют рассчитать сечения двухфотонной ионизации возбужденных состояний в широком интервале частот. На рис. 1 показана частотная зависимость сечений σ_{nl} (50) за порогом однофотонной ионизации для состояний с $n = 10$, $l = 0, 5, 9$. Как видно, с ростом ω сечение ионизации быстро убывает. Эти же рисунки иллюстрируют точность «резонансного» приближения, которое состоит в учете только мнимой части матричных элементов при расчете сечения двухфотонной ионизации

$$M_{l\nu}^l(n, E, \mathcal{E}) \rightarrow \operatorname{Im} M_{l\nu}^l(n, E, \mathcal{E}).$$

Результаты показывают, что вклад мнимой части падает с ростом орбитального момента и энергии конечного состояния.

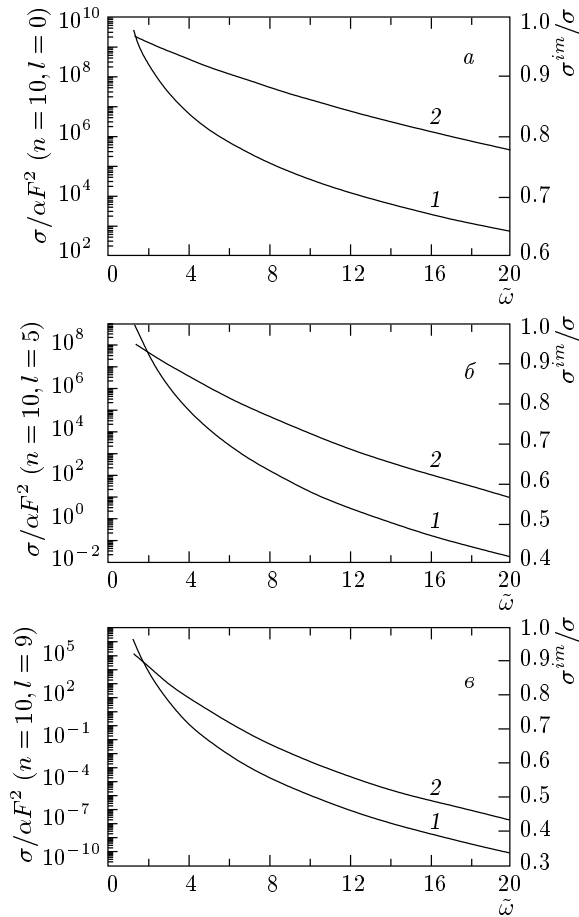


Рис. 1. Зависимость сечения ионизации (в логарифмическом масштабе) $\sigma_{nl}/\alpha F^2$ (кривая 1) и отношения сечения, рассчитанного с учетом только мнимой части матричных элементов, к точному выражению $\sigma_{nl}^{im}/\sigma_{nl}$ (кривая 2) от частоты $\tilde{\omega} = 2n^2\omega$: а — $n = 10, l = 0$; б — $n = 10, l = 5$; в — $n = 10, l = 9$

5. ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ

5.1. Точные аналитические результаты для компонент тензора поляризуемости

Анализ двухфотонных переходов между (вырожденными) состояниями с одинаковой энергией удобно проводить на языке атомных поляризуемостей. Как известно, поляризуемость описывает линейный отклик атома на внешнее монохроматическое воздействие (индуцированный дипольный момент) и определяет амплитуду упругого (рэлеевского) рассеяния света, а также сдвиг, расщепление и ионизационное уширение атомных уровней в поле световой волны. Особый интерес в ряде случаев, на-

пример в связи с астрофизическими приложениями и в спектроскопии ридберговских уровней, представляют поляризуемости высоковозбужденных водородоподобных состояний. Поляризуемости водородного атома могут быть рассчитаны аналитически, и существуют десятки работ, в которых такие расчеты проводились. В настоящем разделе с использованием обобщенного штурмовского разложения КФГ получены аналитические выражения для поляризуемостей произвольных водородных состояний, по существу столь же простые, как поляризуемость основного состояния (5).

Общий анализ квадратичного по F возмущения спектра атома в поле электромагнитной волны (34) проведен в [12], поэтому ниже мы ограничимся случаями линейной или циркулярной поляризации волны, при которых состояния $|nlm\rangle$ с различными значениями проекции орбитального момента m не перемешиваются полем. Спецификой кулоновской задачи является вырождение уровней энергии по l , причем двухфотонный матричный элемент между состояниями $|nlm\rangle$ и $|n'l'm\rangle$ с $l' = l \pm 2$ отличен от нуля. По этой причине даже в случае линейной или циркулярной поляризации волны возмущение спектра возбужденных состояний определяется секулярным уравнением с тридиагональной матрицей ранга $n - |m|$ [46]:

$$|Q_{mm}^{l'} - \Delta E_n \delta_{ll'}| = 0,$$

где

$$Q_{mm}^{l'} = -\frac{1}{4}F^2 \langle n'l'm | \{ \mathbf{e}^* \cdot \mathbf{r} G_{E_n + \omega + i0} \mathbf{e} \cdot \mathbf{r} + \mathbf{e} \cdot \mathbf{r} G_{E_n - \omega + i0} \mathbf{e}^* \cdot \mathbf{r} \} | nlm \rangle. \quad (52)$$

Зависимость элементов штарковской матрицы $Q_{mm}^{l'}$ от магнитного числа m легко отделяется методами квантовой теории углового момента [47]. Диагональные по l матричные элементы имеют вид

$$Q_{mm}^{ll} = -\frac{1}{4} \times \times F^2 \left[\alpha^s(\omega) + \xi \alpha^a(\omega) \frac{m}{2l} - \alpha^t(\omega) \frac{3m^2 - l(l+1)}{2l(2l-1)} \right] \quad (53)$$

при циркулярной поляризации ($\xi = \pm 1$ для правой и левой круговых поляризааций) и

$$Q_{mm}^{ll} = -\frac{1}{4}F^2 \left[\alpha^s(\omega) + \alpha^t(\omega) \frac{3m^2 - l(l+1)}{l(2l-1)} \right] \quad (54)$$

при линейной поляризации. Таким образом, элементы Q_{mm}^{ll} определяются тремя инвариантными па-

раметрами $\alpha^s(\omega)$, $\alpha^a(\omega)$, $\alpha^t(\omega)$, называемыми, соответственно, скалярной, векторной (антисимметричной) и тензорной (симметричной) поляризуемостями. Аналогичным образом выделяется зависимость от m в недиагональных матричных элементах. При циркулярной поляризации волны элемент $Q_{mm}^{l'l+2}$ имеет вид

$$Q_{mm}^{l'l+2} = \frac{1}{8} F^2 \beta_{n,l+2}(\omega) \times \sqrt{\frac{((l+1)^2 - m^2)((l+2)^2 - m^2)}{(2l+1)(2l+5)}},$$

а выражение для $Q_{mm}^{l,l'-2}$ получается отсюда заменой $l \rightarrow (l-2)$. Для линейной поляризации $\mathbf{F}(t)$ имеет

$$Q^{ll'}(l) = -2Q^{ll'}(c).$$

Как видно, недиагональные элементы $Q^{l,l\pm 2}$ определяются лишь одним инвариантным атомным параметром $\beta_{nl'=l\pm 2}(\omega)$, который можно назвать «недиагональной» поляризуемостью.

Явные выражения для поляризуемостей $\alpha^{s,a,t}$ и β могут быть записаны через двухфотонные радиальные матричные элементы от r (2) или от \hat{D} (35), которые в случае упругих переходов связаны соотношением

$$\begin{aligned} \langle nl' | r g_L(E_n + \omega) r | nl \rangle &= -\frac{1}{\omega} \langle nl' | r^2 | nl \rangle - \\ &- \frac{1}{4\omega^2} \langle nl' | nl \rangle \times \\ &\times [2 + 2L(L+1) - l(l+1) - l'(l'+1)] - \\ &- \frac{1}{\omega^2} \langle nl' | \hat{D}(l', L) g_L(E_n + \omega) \hat{D}(L, l) | nl \rangle. \end{aligned} \quad (55)$$

Мы используем ниже выражения для поляризуемостей в записи через матричные элементы в форме «скорости», $M_{ll'}^L(n, n, E) \equiv M_{ll'}^L(E)$:

$$\begin{aligned} \alpha_{nl}^s(\omega) &= -\frac{1}{\omega^2} - \frac{1}{\omega^2} \frac{1}{3(2l+1)} \times \\ &\times [l\rho_{l-1}^{(+)} + (l+1)\rho_{l+1}^{(+)}], \\ \alpha_{nl}^a(\omega) &= -\frac{1}{\omega^2} \frac{l}{2l+1} [\rho_{l-1}^{(-)} - \rho_{l+1}^{(-)}], \\ \alpha_{nl}^t(\omega) &= \frac{1}{\omega^2} \frac{l}{3(2l+1)} \left[\rho_{l-1}^{(+)} + \frac{2l-1}{2l+3} \rho_{l+1}^{(+)} \right], \\ \beta_{nl'}(\omega) &= -\frac{1}{\omega^2} \frac{1}{2l'-1} \times \\ &\times [M_{ll'}^L(E_n + \omega) + M_{ll'}^L(E_n - \omega)], \\ L &= l \pm 1, \quad l' = L \pm 1, \end{aligned} \quad (56)$$

где

$$\rho_L^{(\pm)} = M_{ll}^L(E_n + \omega) \pm M_{ll}^L(E_n - \omega). \quad (57)$$

Вместо (36) при расчете поляризуемостей удобнее использовать следующие вспомогательные соотношения для действия операторов \hat{D} на волновые функции:

$$\begin{aligned} \hat{D}(l+1, l) R_{nl}(r) &= -\frac{Z}{n} \left(\frac{d-1}{s+1} \right)^{1/2} R_{nl+1}(r) - \\ &- \frac{4Z^{5/2}}{n^2(s+1)[(d)_{2l+1}]^{1/2}} \rho^l e^{-\rho/2} \times \\ &\times (L_{d-1}^{2l+3}(\rho) - L_{d-2}^{2l+3}(\rho)), \\ \hat{D}(l+1, l+2) R_{nl+2}(r) &= \frac{Z}{n} \left(\frac{d-2}{s+2} \right)^{1/2} \times \\ &\times R_{nl+1}(r) + \frac{4Z^{5/2}}{n^2[(d-3)_{2l+5}]^{1/2}} \rho^l e^{-\rho/2} \times \\ &\times ((s+1)L_{d-3}^{2l+3}(\rho) - (d-2)L_{d-2}^{2l+3}(\rho)). \end{aligned} \quad (58)$$

Поскольку первые слагаемые в этих формулах лишь множителем отличаются от волновой функции состояния $|n, l+1\rangle$, соответствующие члены в $M_{ll'}^L$ легко вычисляются с помощью соотношения

$$g_l(E) |R_{nl}\rangle = \frac{1}{E_n - E} |R_{nl}\rangle. \quad (59)$$

В рассматриваемом случае энергии начального и конечного состояний в $M_{ll'}^L$ одинаковы, поэтому для функции Грина можно использовать представление (6) с одинаковыми параметрами $\alpha' = \alpha = n/Z$, а последующие интегрирования по r, r' сводятся к тривиальному использованию условия ортогональности (38). В результате, например, для M_{ll}^{l+1} имеем

$$\begin{aligned} M_{ll}^{l+1}(E) &= \frac{Z^2}{n^2(E_n - E)} \frac{d-1}{s+1} (d)_{2l+1} \times \\ &\times \left((s+2)^2 g_{d-1, d-1}^{l+1} - 2(d-1)(s+2) \times \right. \\ &\left. \times g_{d-1, d-2}^{l+1} + (d-1)^2 g_{d-2, d-2}^{l+1} \right). \end{aligned} \quad (60)$$

Используя (24) для $g_{kk'}$ и соотношение (см. (A.3) в Приложении А)

$$q_k^{+l} p_{k-1}^l - q_{k-1}^{+l} p_k^l = 2(k+1)_{2l},$$

выражение (60) можно переписать в следующем виде:

$$\begin{aligned} M_{ll}^{l+1}(E_n + \omega) &= \frac{2}{\tilde{\omega}} - \frac{2n}{\tilde{\omega}(s+1)^2 (d)_{2l+1}} \times \\ &\times (p_{d-1}^{l+1} - p_{d-2}^{l+1})(q_{d-1}^{+(l+1)} - q_{d-2}^{+(l+1)}). \end{aligned} \quad (61)$$

Аналогичные выражения для M_{ll}^{l-1} и M_{ll+2}^{l+1} имеют вид

$$M_{ll}^{l-1}(E_n + \omega) = \frac{2}{\tilde{\omega}} - \frac{2n}{\tilde{\omega}} \times \frac{[(s-1)p_{d-1}^{l-1} - dp_{d-1}^{l-1}][(s-1)q_{d-1}^{+(l-1)} - dq_{d-1}^{+(l-1)}]}{(d)_{2l+1}}, \quad (62)$$

$$M_{ll+2}^{l+1}(E_n + \omega) = \frac{2}{\tilde{\omega}} \left(\frac{d-1}{s+1} \frac{d-2}{s+2} \right)^{1/2} + \frac{2n}{\tilde{\omega}} \times \frac{[(s+1)p_{d-3}^{l+1} - (d-2)p_{d-2}^{l+1}][q_{d-1}^{+(l+1)} - q_{d-2}^{+(l+1)}]}{(s+1)[(d)_{2l+1}(d-2)_{2l+5}]^{1/2}}. \quad (63)$$

M_{ll-2}^{l-1} получается из (63) заменой (42). Отметим, что элементарные члены в M_{ll}^L , пропорциональные $1/\tilde{\omega}$, исчезают при вычислении суммы в $\rho^{(+)}$ (57) и разности в α^a и не дают вклада в поляризуемости.

Соотношения (56) и (61)–(63) полностью определяют инвариантные компоненты тензора динамической поляризуемости n -оболочки. Как видно, общий характер зависимостей $\alpha^{s,a,t}(\omega)$ и $\beta(\omega)$ от параметров задачи — частоты поля ω , квантовых чисел n, l и заряда ядра Z — имеет следующий вид:

$$\alpha_{nl}(\omega) = \frac{1}{\omega^2} f(n, l, \tilde{\omega}). \quad (64)$$

Таким образом, «истинная» частота ω входит в поляризуемости фактически лишь в качестве общего множителя в (56), а детали частотной зависимости определяются величиной $\tilde{\omega}$. Используя соотношение (28) для функций Поллачека q_k^{+L} в (61)–(63) и принимая во внимание, что p_k^l и \bar{q}_k^l представляют собой полиномы по степеням $1/\tilde{\omega}$ (см. разд. 2.2), нетрудно установить, что при произвольном n скалярная, векторная и тензорная поляризуемости имеют следующую универсальную структуру [ср. с (5)]:

$$\begin{aligned} \alpha_{nl}^s &= \frac{1}{\omega^2} \left[\frac{l}{2l+1} \mathcal{T}_{n,l-1}^+(\tilde{\omega}) + \right. \\ &+ \left. \frac{l+1}{2l+1} \mathcal{T}_{n,l+1}^+(\tilde{\omega}) + \psi_{nl}^s \left(\frac{1}{\tilde{\omega}^2} \right) - 1 \right], \\ \alpha_{nl}^a &= \frac{1}{\omega^2} \left[\frac{3l}{2l+1} \times \right. \\ &\times \left. \left(\mathcal{T}_{n,l-1}^-(\tilde{\omega}) - \mathcal{T}_{n,l+1}^-(\tilde{\omega}) \right) + \psi_{nl}^a \left(\frac{1}{\tilde{\omega}} \right) \right], \\ \alpha_{nl}^t &= -\frac{1}{\omega^2} \left[\frac{l}{2l+1} \mathcal{T}_{n,l-1}^+(\tilde{\omega}) + \right. \\ &+ \left. \frac{l(2l-1)}{(2l+1)(2l+3)} \mathcal{T}_{n,l+1}^+(\tilde{\omega}) + \psi_{nl}^t \left(\frac{1}{\tilde{\omega}^2} \right) \right], \end{aligned} \quad (65)$$

где

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{n,L}^\pm(\tilde{\omega}) &= \varphi_{nl}^L(\tilde{\omega}) T_L(\tilde{\omega}) \pm \varphi_{nl}^L(-\tilde{\omega}) T_L(-\tilde{\omega}), \\ T_L(\tilde{\omega}) &= \frac{\eta}{L+1-\eta} {}_2F_1(1, 2L+2; L+2-\eta; z^{-1}), \\ \varphi_{nl}^{L=l+1} &\equiv \varphi_{nl}^{(+)} = \frac{(2l+3)!}{3(s+1)^2(d)_{2l+1}} [p_{d-1}^{l+1} - p_{d-2}^{l+1}]^2, \\ \varphi_{nl}^{L=l-1} &\equiv \varphi_{nl}^{(-)} = \frac{(2l-1)!}{3(d)_{2l+1}} [(s-1)p_{d-1}^{l-1} - dp_{d-1}^{l-1}]^2, \end{aligned}$$

а $\psi_{nl}^{s,a,t}$ выражаются через p_k^L и \bar{q}_k^L (см. Приложение Б).

Как следует из результатов разд. 2.2, функции $\varphi_{nl}^{(\pm)}$ и $\psi_{nl}^{s,a,t}$ представляют собой вещественные полиномы по степеням $\tilde{\omega}^{-1}$, причем в $\psi^{s,t}$ входят только четные степени частоты, а в ψ^a — нечетные. Порядок этих полиномов определяется радиальным квантовым числом n_r , а коэффициенты — n_r и орбитальным квантовым числом l . Для основного состояния (см. (5)) $\varphi_{10}^{(+)} = 1/2$, $\psi_{10}^s = 0$. Явные выражения для $\varphi_{nl}^{(\pm)}$ и $\psi_{nl}^{s,a,t}$ при $n \leq 4$ приведены в Приложении Б.

Как следует из (65), поляризуемости состояний с произвольными n, l выражаются через универсальную функцию

$${}_2F_1(1, 2m+2; m+2-\eta; z^{-1}) \quad (66)$$

с $m = l \pm 1$, в которую главное квантовое число входит только через параметр

$$\eta = \frac{Z}{\sqrt{-2(E_n \pm \omega) - i0}} = \frac{n}{\sqrt{1 \mp \tilde{\omega} - i0}}.$$

Возможность такого представления поляризуемостей отмечалась ранее в [12, 29], но явные выражения для произвольных n не были получены. Функция (66) обладает рядом особых свойств, которые, в частности, могут использоваться в вычислительных алгоритмах. Отметим здесь, что (66) выражается через неполную бета-функцию (интеграл в правой части (А.4) есть определение неполной бета-функции [5]). Кроме того, соотношение (А.8) позволяет выделить мнимую часть $T_L(\tilde{\omega})$, которая возникает при $\tilde{\omega} > 1$ и сводится к элементарным функциям,

$$\begin{aligned} \text{Im} T_L(\tilde{\omega}) &= |\eta| \frac{|\Gamma(L+1-\eta)|^2}{2(2l+1)!} \left(\frac{4n|\eta|}{n^2 + |\eta|^2} \right)^{2l+2} \times \\ &\times \exp(\pi|\eta| - 4|\eta| \text{arctg}(|\eta|/n)), \end{aligned} \quad (67)$$

а значит, и мнимую часть поляризуемостей, поскольку остальные величины в (65) являются вещественными. Так как согласно оптической теореме сечение

фотоионизации $\sigma_{nl}(\omega)$ состояния $|nl\rangle$ связано с мнимой частью скалярной поляризуемости,

$$\sigma_{nl}(\omega) = \frac{4\pi\omega}{c(2l+1)} \text{Im}\alpha_{nl}^s(\omega), \quad (68)$$

соотношение (67) позволяет выразить $\sigma_{nl}(\omega)$ через элементарные функции:

$$\sigma_{nl}(\omega) = \frac{4\pi\omega}{c(2l+1)^2} \times \text{Im} \left(l\varphi_{nl}^{(-)} \text{Im}T_{l-1} + (l+1)\varphi_{nl}^{(+)} \text{Im}T_{l+1} \right).$$

В частности, для ns -состояний имеем (в (68), (69) используются обычные единицы, a_0 — борковский радиус)

$$\sigma_{ns}(\omega) = \frac{a_0^2 e^2}{\hbar c} \frac{2^{10} \pi^2 n^4}{3 Z^2 \tilde{\omega}^5} (\tilde{\omega} + n^2 - 1) \times \frac{\exp(-4|\eta| \text{arctg}(|\eta|/n))}{1 - \exp(-2\pi|\eta|)} \varphi_{n0}^{(+)}(\tilde{\omega}). \quad (69)$$

Таким образом, с сечением ионизации связаны только полиномы $\varphi_{nl}^{(\pm)}$. Интересно отметить, что вследствие аналитической зависимости амплитуды рассеяния от энергии полиномы $\varphi_{nl}^{(\pm)}(+\tilde{\omega})$, через которые выражается $\sigma_{nl}(\omega)$ при $\tilde{\omega} > 1$, определяют $\mathcal{T}_{n,L}^{\pm}(+\tilde{\omega})$ и при $\tilde{\omega} < 1$, а $\varphi_{nl}^{(\pm)}(-\tilde{\omega})$ входят в матричные элементы с функцией Грина $g_{l\pm 1}(E_n - \omega)$, которые остаются вещественными при любых $\tilde{\omega}$.

5.2. Поляризуемости ридберговских состояний

Асимптотические свойства поляризуемостей состояний с произвольными n и l исследовались в ряде работ. Так, в [48, 12] (см. также [49]) исследована высокочастотная асимптотика поляризуемостей. В [12] рассмотрен также низкочастотный предел. В [50] выполнены квазиклассические расчеты поляризуемостей n -оболочки, усредненных по l , а некоторые особенности поляризуемостей ридберговских s -состояний проанализированы в [11]. В настоящем разделе мы находим ридберговскую асимптотику поляризуемостей (при $n \gg 1$), справедливую при любых частотах. При этом следует различать состояния с малыми и большими значениями орбитального момента.

5.2.1. Малые значения орбитального момента: $l \ll n$

В этом случае асимптотику $\alpha_{nl}^{s,a,t}(\omega)$ и β_{nl} удается получить, переходя к пределу $n \gg 1$ в форму-

лах (61)–(63). Выражение для входящего в (25) гипергеометрического полинома при больших n можно вычислить почленным переходом к пределу

$${}_2F_1(-n+k, b; c; z) \rightarrow \Phi(b, c; 4\eta), \quad (70)$$

где Φ — вырожденная гипергеометрическая функция. Чтобы найти предельное выражение для гипергеометрической функции вида ${}_2F_1(n+a, n+b; n+c; z^{-1})$ (см. (26)), в которой при $n \gg 1$ большими являются все три параметра и аргумент, представим ее в интегральной форме:

$$\begin{aligned} {}_2F_1(n+a, n+b; n+c; z^{-1}) &= \\ &= \frac{\Gamma(n+c)}{\Gamma(n+b)\Gamma(c-b)} \left(\frac{z}{z-1}\right)^{n+a} \times \\ &\times \int_0^\infty t^{c-b-1} (1+t)^{a-c} \left(1 + \frac{zt}{z-1}\right)^{-n-a} dt. \end{aligned} \quad (71)$$

Учитывая, что $z \propto n^{-1}$, и переходя к пределу под интегралом, получаем

$$\begin{aligned} {}_2F_1(n+a, n+b; n+c; z^{-1}) &\rightarrow \frac{\Gamma(n+c)}{\Gamma(n+b)} \times \\ &\times \left(\frac{z}{z-1}\right)^{n+a} \Psi(c-b, a-b+1; 4\eta), \end{aligned} \quad (72)$$

где $\Psi(a, c; x)$ — нерегулярная в нуле вырожденная гипергеометрическая функция.

Подстановка найденных предельных выражений (70), (72) в (61)–(63) приводит к компенсации главных по $1/n$ членов (возможность таких сокращений видна уже из формул (36)). Чтобы избежать необходимости вычислять следующие по $1/n$ члены разложений в (70), (72), преобразуем (61)–(63) так, чтобы главные члены асимптотики сокращались в этих исходных выражениях. Используя соотношение Гаусса (см. [5, формула (2.8.32)]) для преобразования разностей полиномов Поллачека и соотношение

$$\begin{aligned} (n+l+1-\eta) {}_2F_1(n, n+2l+1; n+l+1-\eta; z^{-1}) &= \\ = (l+1-\eta) {}_2F_1(n, n+2l+2; n+l+2-\eta; z^{-1}) &+ \\ + n(1-z^{-1}) {}_2F_1(n+1, n+2l+2; n+l+2-\eta; z^{-1}) \end{aligned}$$

для преобразования разностей функций Поллачека,

приходим к следующим асимптотическим выражениям для матричных элементов:

$$\begin{aligned} \tilde{M}_{ll}^{l+1}(E_n + \omega) &= \frac{Z^2}{\omega n^2} + \frac{2Z^2}{\omega n^3} e^{-4\tilde{\eta}} \frac{\Gamma(l+2-\tilde{\eta})}{\Gamma(2l+4)} \times \\ &\times [(l+1-\tilde{\eta})\Phi(l+2-\tilde{\eta}, 2l+4; 4\tilde{\eta}) + \\ &+ (l+2-\tilde{\eta})\Phi(l+3-\tilde{\eta}, 2l+4; 4\tilde{\eta})] \times \\ &\times [(2l+3-2\tilde{\eta})\Psi(-l-1-\tilde{\eta}, -2l-2; 4\tilde{\eta}) - \\ &- (l+2-\tilde{\eta})\Psi(-l-1-\tilde{\eta}, -2l-3; 4\tilde{\eta})], \quad (73) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{M}_{ll}^{l-1}(E_n + \omega) &= \frac{Z^2}{\omega n^2} + \frac{2Z^2}{\omega n^3} e^{-4\tilde{\eta}} \frac{\Gamma(l-\tilde{\eta})}{\Gamma(2l)} \times \\ &\times [(l+\tilde{\eta})\Phi(l-\tilde{\eta}, 2l; 4\tilde{\eta}) - \\ &- (l-\tilde{\eta})\Phi(l+1-\tilde{\eta}, 2l; 4\tilde{\eta})] \times \\ &\times [2\tilde{\eta}\Psi(-l+1-\tilde{\eta}, -2l+2; 4\tilde{\eta}) + \\ &+ (l-\tilde{\eta})\Psi(-l+1-\tilde{\eta}, -2l+1; 4\tilde{\eta})], \quad (74) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{M}_{l+2}^{l+1}(E_n + \omega) &= \frac{Z^2}{\omega n^2} \left(\frac{d-1}{s+1} \frac{d-2}{s+2} \right)^{1/2} + \\ &+ \frac{2Z^2}{\omega n^3} e^{-4\tilde{\eta}} \frac{\Gamma(l+2-\tilde{\eta})}{\Gamma(2l+4)} \times \\ &\times [(l+2+\tilde{\eta})\Phi(l+2-\tilde{\eta}, 2l+4; 4\tilde{\eta}) - \\ &- (l+2-\tilde{\eta})\Phi(l+3-\tilde{\eta}, 2l+4; 4\tilde{\eta})] \times \\ &\times [(2l+3-2\tilde{\eta})\Psi(-l-1-\tilde{\eta}, -2l-2; 4\tilde{\eta}) - \\ &- (l+2-\tilde{\eta})\Psi(-l-1-\tilde{\eta}, -2l-3; 4\tilde{\eta})], \quad (75) \end{aligned}$$

где

$$\tilde{\eta} = \frac{Z}{\sqrt{-2\omega - i0}}.$$

Выражения (73)–(75) приводят к зависимости $\alpha_{nl}^{s,a,t}$, $\beta_{nl} \propto n^{-3}$, поскольку члены $\propto n^{-2}$ сокращаются при вычислении полярзуемостей. Такая зависимость соответствует множителю $n^{-3/2}$ в нормировке ридберговских волновых функций, однако рассматриваемый предел не может быть найден подстановкой последних в (35), так как это приводит к расходящемуся интегралу (это обстоятельство отмечено в [11]).

Если в (73)–(75) перейти к пределу $\tilde{\eta} \rightarrow m$, то, очевидно, результат должен совпадать с пределом $n \rightarrow \infty$, взятым от соответствующего резонансного слагаемого в точном матричном элементе (35):

$$\begin{aligned} \lim_{\tilde{\eta} \rightarrow m} \tilde{M}_{ll}^L(E_n - \omega) &= \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta} \langle nl' | \hat{D}(l', L) | mL \rangle \langle mL | \hat{D}(L, l) | nl \rangle, \quad (76) \end{aligned}$$

где $\Delta = E_m - E_n + \omega$. Выполнение соотношения (76) было проверено для состояний с $l = 0, 1$ в

нескольких низколежащих резонансах. Мы проверили также согласование полученных формул с высокочастотным пределом: если в (73)–(75) устремить $\omega \rightarrow \infty$, то результат совпадает с тем, который получается из M_{ll}^L при обратной последовательности перехода к пределу: вначале $\omega \rightarrow \infty$, а затем $n \rightarrow \infty$. При этом для диагональных матричных элементов два первых члена разложения ридберговских формул (73), (74) и точных выражений для $M_{ll}^{\pm 1}$ по степеням $1/\omega$ совпадают друг с другом:

$$M_{ll}^{l+1} = \tilde{M}_{ll}^{l+1} \approx \frac{Z^2}{\omega n^2} + \frac{2Z^4}{\omega n^3} \frac{1}{(l+1)(2l+1)}, \quad (77)$$

$$M_{ll}^{l-1} = \tilde{M}_{ll}^{l-1} \approx \frac{Z^2}{\omega n^2} - \frac{2Z^4}{\omega n^3} \frac{1}{l(2l+1)}. \quad (78)$$

Простые аналитические выражения для полярзуемостей в высокочастотном пределе приведены в [12, 48].

5.2.2. Большие значения орбитального момента: $n - l \ll n$

При исследовании высокочастотной асимптотики полярзуемостей в [48] было установлено, что при $l \sim n$ параметром разложения является $1/\omega n^3$. Это означает, что главные члены разложения α_{nl} по ω^{-1} при заданном n определяют и главные члены разложения по n^{-1} при фиксированной частоте ω . Используя результаты [12, 48], получаем

$$\begin{aligned} \alpha_{nl}^s &= -\frac{1}{\omega^2} - \frac{2}{\omega^6} \frac{Z^8}{n^{12}}, \quad \alpha_{nl}^a = \frac{18}{\omega^7} \frac{Z^{10}}{n^{15}}, \\ \alpha_{nl}^t &= -\frac{1}{\omega^4} \frac{Z^4}{n^6}, \quad \beta_{nl} = -\frac{9Z^8}{\sqrt{2}\omega^6 n^{14}}. \quad (79) \end{aligned}$$

Таким образом, в ридберговской области элементы штарковской матрицы с малыми l ($\sim n^{-3}$) оказываются больше, чем матричные элементы с большими l ($\sim n^{-6}$), что очевидным образом сказывается на форме спектра.

Обратим внимание на своеобразие частотной зависимости полярзуемостей в пределе $n \rightarrow \infty$. Поскольку в этом случае любое фиксированное значение частоты ω является надпороговым ($\omega > |E_n|$), матричные элементы с $E = E_n + \omega$ (обуславливающие сгущающуюся к порогу $\omega = |E_n|$ резонансную структуру полярзуемостей уровней с конечным n) оказываются нерезонансными (а соответствующий параметр η чисто мнимым). Матричные элементы $M_{ll}^L(E_n - \omega)$ имеют полюсы при частотах, соответствующих резонансам на нижележащих уровнях с

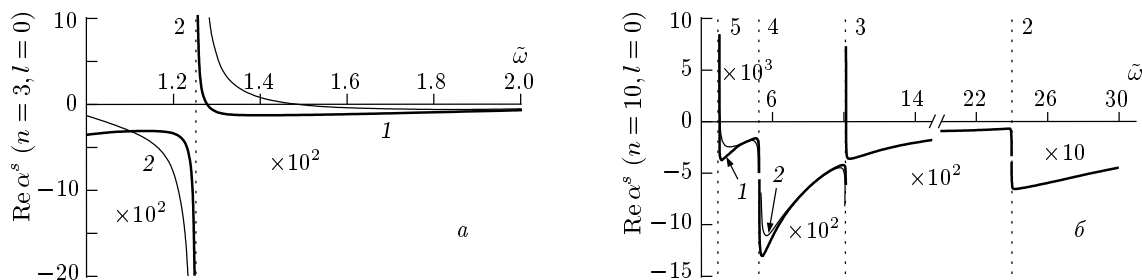


Рис. 2. Зависимость скалярной поляризуемости α_{nl}^s состояний с $n = 3$ (а) и $n = 10$ (б), $l = 0$, вычисленная по точной формуле (1) и по «полуасимптотическим» формулам, получаемым из (73)–(75) заменой $\tilde{\eta} \rightarrow \eta$, от частоты $\tilde{\omega} = 2n^2\omega$. Резонансные частоты показаны вертикальными пунктирными линиями с указанием главного квантового числа соответствующего резонансного уровня. Масштаб по вертикальной оси указан в каждом межрезонансном промежутке. На рис. б в двух последних межрезонансных промежутках кривые 1 и 2 совпадают

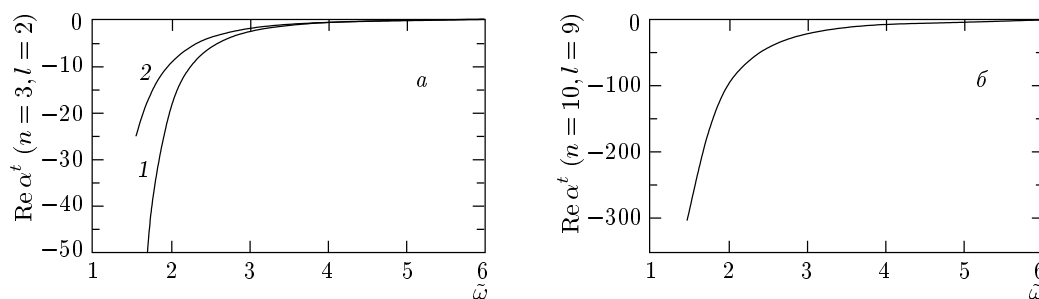


Рис. 3. Зависимость тензорной поляризуемости α_{nl}^t состояний с $n = 3, l = 2$ (а) и $n = 10, l = 9$ (б), вычисленной по точной формуле (кривая 1) и по приближенной формуле (79) (кривая 2), от частоты $\tilde{\omega} = 2n^2\omega$. На рис. б кривые 1 и 2 совпадают

$n' = L + 1, L + 2, \dots, n'_{max} = (n - 1)$. Нетрудно проверить, что в надпороговой области матричные элементы с большими l резонансов не имеют (см. (79)), в то время как $M_{l'}^{l'}(E_n - \omega)$ при $l \ll n$ имеют конечное (при фиксированном n) число резонансов, расстояние между которыми увеличивается с ростом частоты. В ридберговской асимптотике (73)–(75) резонансная зависимость обусловлена множителями $\Gamma(l + 2 - \tilde{\eta})$ и $\Gamma(l - \tilde{\eta})$, так что положение полюсов сдвинуто на величину энергии связи $|E_n|$ по сравнению с истинными значениями $\omega_{res} = E_n - E_{n'}$ в соответствии с условием $n \gg 1$. В качестве иллюстрации частотной зависимости на рис. 2, 3 приведены дисперсионные кривые поляризуемостей состояний с $n = 3$ и $n = 10$ при минимальном ($l = 0$) и максимальном $l = n - 1$ значениях орбитального момента. Особенностью частотной зависимости поляризуемостей с малыми l является существование области отрицательной дисперсии в узкой области вблизи резонансов. Действительно, как видно

из рис. 2, при переходе через резонанс вещественная часть поляризуемости быстро убывает и достигает своего минимального значения, а затем монотонно возрастает вплоть до области частот вблизи следующего резонанса. При переходе через последний резонанс поляризуемость сначала убывает, достигая минимального (отрицательного) значения, а затем возрастает, приближаясь к нулю. Очевидно, что такая (достаточно сложная) частотная зависимость, не может быть аппроксимирована элементарными формулами. В то же время асимптотические выражения (73)–(75) приводят к удовлетворительному согласию с точными выражениями уже для низколежащих уровней, а с ростом n согласие значительно улучшается. Обратим внимание, что к более точным результатам для поляризуемостей приводят «полуасимптотические» формулы, которые получаются из (73)–(75) заменой $\tilde{\eta}$ на точное (зависящее от n) значение η , что обеспечивает правильное положение резонансов. Рассчитанная таким способом

зависимость $\alpha^s(\omega)$ также представлена на рис. 2. Поляризуемости $\alpha^{s,a,t}$ состояний с большими l являются монотонными функциями частоты, и их поведение хорошо передается степенной зависимостью от ω в асимптотиках (79). При этом главный вклад в скалярную поляризуемость дает слагаемое $-1/\omega^2$, а поправка к нему в элементах штарковской матрицы (53), (54) определяется слагаемым с α^t . Частотная зависимость тензорной поляризуемости α^t для $n = 3$, $n = 10$ и $l = n - 1$, рассчитанная по точной (56) и приближенной (79) формулам, представлена на рис. 3. Из соображений компактности на рисунках не изображена мнимая часть поляризуемости. Отметим, что $\text{Im} \alpha_{nl}^{s,a,t}$ является гладкой монотонно убывающей функцией частоты, которая при малых l хорошо аппроксимируется ридберговской асимптотикой, а при больших l исчезает в рассматриваемом пределе.

5.3. Припороговая асимптотика поляризуемостей

Рассмотрим теперь асимптотику поляризуемостей при припороговых частотах: $\omega \sim |E_n|$. При фиксированном n и частотах $\omega \rightarrow Z^2/2n^2$ ($\eta \rightarrow \infty$), матричный элемент $M_{ll'}^L(E_n - \omega)$ является гладкой функцией, а $M_{ll'}^L(E_n + \omega)$ имеет сгущающиеся полюсы (на ридберговских уровнях). В [51] с использованием специального представления функции Грина в припороговой области было показано, что асимптотическое выражение для $M_{ll'}^L(E_n + \omega)$ имеет вид

$$M_{ll'}^L(E_n + \omega) = A_{nll'}^L + \pi \text{ctg} \pi \eta B_{nll'}^L, \quad (80)$$

и вычислены коэффициенты A и B для основного состояния $n = 1$. При этом коэффициент B_{1s} при резонансном котангенсе был выражен через полиномы Лагерра, а для A_{1s} получено выражение в виде контурного интеграла, который затем рассчитывался численно. В [12] для $B_{nll'}^L$ при произвольных n, l, l' были получены приближенные выражения в виде громоздкой комбинации конечных (трехкратных) сумм. Используя асимптотические выражения для p_k^l, q_k^l при $\eta \rightarrow \infty$ (мы опускаем детали этих вычислений), можно получить аналитические выражения для A, B при произвольных n, l, l' , но лишь в виде бесконечного ряда от логарифмической производной Γ -функции, $\psi(x)$:

$$\begin{aligned} p_k^l &\rightarrow (-1)^k L_k^{2l+1}(4n), \\ q_k^{+l} &\rightarrow 2(-1)^{k+1} (4n)^{2l+1} e^{-4n} L_k^{2l+1}(4n) \times \end{aligned} \quad (81)$$

$$\begin{aligned} &\times (\pi \text{ctg} \pi \eta + \ln 4n) + 2(-1)^k (4n)^{2l+1} \times \\ &\times \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(k+1)_{p+2l+1}}{p!(p+2l+1)!} (-4n)^p (\psi(p+2l+2) + \\ &\quad + \psi(p+1) - \psi(p+k+2l+2)) + \\ &\quad + 2(-1)^k \sum_{p=0}^{2l} \frac{(2l-p)!(k+1)_p}{p!} (4n)^p. \end{aligned}$$

При $k = 0$ бесконечный ряд выражается через интегральную показательную функцию $\text{Ei}(x)$:

$$\begin{aligned} q_0^{+l} &\rightarrow -2(4n)^{2l+1} e^{-4n} \times \\ &\times (\pi \text{ctg} \pi \eta + \text{Ei}(4n)) + 2 \sum_{p=0}^{2l} (2l-p)! (4n)^p, \end{aligned}$$

что для основного состояния приводит к результату [3].

Используя (80) и (81), поляризуемости $\alpha_{nl}^i(\omega)$ ($i = s, a, t$) при $\omega \rightarrow |E_n| - 0$ можно представить в виде

$$\alpha_{nl}^i(\omega) = A_{nl}^i + \text{ctg} \pi \eta B_{nl}^i. \quad (82)$$

Чтобы получить асимптотику матричного элемента $M_{ll'}^L(E_n + \omega)$ при стремлении частоты к потенциалу ионизации сверху $\omega \rightarrow |E_n| + 0$, в (82) следует заменить $\text{ctg} \pi \eta \rightarrow -i$.

В качестве примера в таблице 2 приведены значения A_{nl}^i и B_{nl}^i для состояний с $n \leq 5$. При $n = 1$ наши результаты для A_{1s} и B_{1s} совпадают с полученными в [51].

6. ЗАКЛЮЧИТЕЛЬНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ

Использование обобщенного штурмовского разложения КФГ (6) позволило получить замкнутые аналитические выражения (двухфотонные формулы Гордона) для матричных элементов двухфотонных переходов из произвольного состояния $|nl\rangle$ водородоподобного атома как в связанное состояние $|n'l'\rangle$, (39)–(42) и (61)–(63), так и в непрерывный спектр, (46)–(49). Во всех случаях результат выражается через ядро $g_{kk'}^l$ представления (6), которое содержит лишь одну полную гипергеометрическую функцию ${}_2F_1$ или функцию Аппеля F_1 . Поэтому, несмотря на некоторую громоздкость, можно надеяться, что полученные результаты представляют в максимально простом, насколько это возможно, аналитическом виде полную информацию об атомных параметрах, необходимых в задачах двухфотонной спектроскопии водородоподобных атомных уровней, и завершают многолетнюю историю аналитических расчетов двухфотонных переходов в куло-

Таблица 2. Значения коэффициентов A_{nl}^i и B_{nl}^i из формулы (82) для состояний с $n \leq 5$

n	l	A_{nl}^s	B_{nl}^s	A_{nl}^a	B_{nl}^a	A_{nl}^t	B_{nl}^t
1	0	-4.310(0)	-4.910(0)				
2	0	-6.045(1)	-4.605(1)				
	1	-9.827(1)	-4.221(1)	8.773(1)	5.756(1)	1.255(1)	5.372(0)
3	0	-3.473(2)	-1.765(2)				
	1	-5.122(2)	-1.825(2)	5.707(2)	2.305(2)	1.457(2)	2.690(1)
	2	-8.371(2)	-1.268(2)	1.478(3)	2.421(2)	4.159(2)	3.788(1)
4	0	-8.596(2)	-4.648(2)				
	1	-8.746(2)	-4.912(2)	-2.593(2)	5.762(2)	-1.911(2)	8.124(1)
	2	-7.937(2)	-4.457(2)	-7.571(2)	8.225(2)	-4.156(2)	1.372(2)
	3	-2.876(2)	-2.378(2)	-2.344(3)	5.206(2)	-9.699(2)	1.007(2)
5	0	-2.387(3)	-9.930(2)				
	1	-2.583(3)	-1.052(3)	5.531(2)	1.151(3)	1.744(1)	1.904(2)
	2	-2.872(3)	-1.041(3)	1.151(3)	1.852(3)	9.012(1)	3.304(2)
	3	-2.937(3)	-7.981(2)	1.104(3)	1.717(3)	-1.968(-2)	3.413(2)
	4	-2.149(3)	-3.411(2)	-1.272(3)	8.040(2)	-7.713(2)	1.750(2)

новском поле для частных значений квантовых чисел начального и/или конечного состояний. Очевидно, что, используя предельные выражения гипергеометрических функций для частных значений параметров и/или аргументов, общие результаты могут быть существенно упрощены в различных предельных случаях (подобно анализу поляризуемостей в разд. 5.2, 5.3). Отметим, что двухфотонные формулы Гордона (39)–(42) не могут быть продолжены на область непрерывного спектра по обоим переменным n, n' , (так как переменная, с которой связан верхний предел суммирования в (18), должна оставаться целой), поэтому двухфотонные переходы в непрерывном спектре требуют отдельного рассмотрения.

Рассмотренный случай двухфотонных переходов не исчерпывает возможных приложений параметрических представлений КФГ $G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ и $G_E(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$. Эффективность разложений типа (4), (6) и (32) определяется двумя обстоятельствами. Во-первых, как это показано выше, в ряде случаев подходящим выбором свободных параметров удастся существенно упростить процедуру интегрирования и представить результат в максимально простом аналитическом виде. Поскольку, как правило, матричные элементы с функциями Грина при произвольной энер-

гии E выражаются через достаточно сложные специальные функции, использование неадекватного алгоритма вычислений приводит или к значительно более громоздким конструкциям (см., например, [15]) или вообще к невозможности представления результата в аналитическом виде. Однако другим более важным обстоятельством является возможность использования свободных параметров для распространения техники прямых численных расчетов штурмовских рядов типа (6) в матричных элементах с функциями Грина при $E > 0$, которые возникают в столкновительных задачах, теории автоионизационных состояний, при анализе надпороговых многофотонных переходов и др. Как уже отмечалось, разложения (7) и (9) неприменимы при $E > 0$, а соответствующие ряды для матричных элементов расходятся (кроме исключительных случаев, когда результат выражается через известные специальные функции, аналитически продолжаемые по E , например, (5) или двухфотонные формулы Гордона). Соответствующие обобщения представлений (9) и (7) на область $E > 0$ получены в работах [52] и [53], а релятивистская КФГ при $|E| > mc^2$ рассмотрена в [54]. Однако в результате указанного обобщения суммирование по дискретному индексу k в (7) и (9) заменяется на интегрирование по непрерывным параметрам

специальных функций, что делает весьма затруднительным применение таких представлений в реальных численных расчетах (выбор модифицированного штурмовского базиса с дискретным спектром для разложения функций Грина с $E > 0$ обсуждается в [55]). Используя разложения типа (6), рациональным выбором параметров α и α' оказывается возможным обеспечить сходимость штурмовских рядов в прямых численных расчетах матричных элементов при $E > 0$ (а также существенно ускорить их сходимость при энергиях $E < 0$). Таким образом, обобщенное штурмовское представление позволяет фактически осуществить численное аналитическое продолжение результатов, получаемых с использованием обычного штурмовского разложения (7), на область энергий, при которых ряд (7) расходится.

В настоящее время одним из наиболее эффективных численных методов в задачах с непрерывным спектром и резонансными (квазистационарными) состояниями в атомных и молекулярных процессах является метод complex scaling (или комплексных координат) [56], состоящий в неэрмитовом расширении (complex dilatation) исходного гамильтониана задачи путем замены $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}e^{i\alpha}$ и «дискретизации континуума» [57] путем введения базиса квадратично-интегрируемых функций, зависящих от (комплексного) параметра α , для отыскания комплексных собственных значений — энергий резонансов. В частности, в [58] система функций Штурма $S_{nl}(2r/\alpha)$ с комплексным параметром α использовалась в качестве базиса при численном расчете комплексных квазиэнергий атома водорода вне рамок теории возмущений по взаимодействию с интенсивным лазерным полем (см. также обзор [59]), а в работе [60] — для анализа автоионизационных резонансов в фотоионизации гелия. Использование обобщенных штурмовских представлений КФГ представляет, по существу, аналитическую реализацию методов комплексного скейлинга и дискретизации континуума для задач с кулоновской функцией Грина при положительной (или комплексной) энергии E .

Эффективность представления (6) в расчетах матричных элементов высших порядков теории возмущений (когда результат уже не может быть представлен в терминах известных специальных функций) была проверена нами на примере численного расчета гиперполяризуемостей высоковозбужденных состояний водорода в поле лазерного излучения, содержащих матричные элементы с тремя функциями Грина при $E > 0$ [61]: при соответствующем выборе (комплексных) параметров α и α' ряды для матричных элементов быстро

сходятся при частотах ω , в десятки раз превышающих потенциал ионизации $|E_n|$ рассматриваемого состояния $|nl\rangle$. Возможность обеспечения сходимости рядов штурмовского типа для составных матричных элементов электромагнитных переходов при надпороговых энергиях делает перспективным использование разложений типа (6) и в релятивистских задачах, например, для расчета сечений рэлеевского и комптоновского рассеяний рентгеновского и γ -излучений многозарядными ионами или внутренними оболочками атомов с большим Z , а также в задачах квантовой электродинамики связанных состояний, требующих непerturbативного (по параметру αZ) учета сильного кулоновского поля на электрон в виртуальных состояниях.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке ИНТАС-РФФИ (грант № 97-673), РФФИ (грант № 00-02-17843), Конкурсного центра фундаментального естествознания и программы «Университеты России — фундаментальные исследования».

ПРИЛОЖЕНИЕ А

1. Из условия симметрии (19) и выражения (18) следует тождество, связывающее «билинейные формы», которые содержат функции ${}_2F_1$ и F_1 :

$$\begin{aligned} & \frac{{}_2F_1(-n, l+1-\eta; 2l+2; z)}{l+1-\eta} \times \\ & \times F_1(l+1-\eta; -n', n'+2l+2; l+2-\eta; y, y') - \\ & - \frac{(1-y)^{n'}}{(1-y')^{n'+2l+2}} \sum_{p=1}^n C_n^p(-z)^p \frac{(l+2+\eta-p)_{p-1}}{(2l+2)_p} \times \\ & \times {}_2F_1(-n+p, l+1-\eta+p; 2l+2+p; z) \times \\ & \times F_1(-p+1; -n', n'+2l+2; \\ & l+2+\eta-p; 1/(1-y), 1/(1-y')) = \\ & = \frac{{}_2F_1(-n', l+1-\eta; 2l+2; z')}{l+1-\eta} \times \\ & \times F_1(l+1-\eta; -n, n+2l+2; l+2-\eta; 1/y, y') - \\ & - \frac{(1-1/y)^n}{(1-y')^{n+2l+2}} \sum_{p=1}^{n'} C_{n'}^p(-z')^p \frac{(l+2+\eta-p)_{p-1}}{(2l+2)_p} \times \\ & \times {}_2F_1(-n'+p, l+1-\eta+p; 2l+2+p; z') \times \\ & \times F_1(-p+1; -n, n+2l+2; \\ & l+2+\eta-p; 1/(1-y), 1/(1-y')). \quad (A.1) \end{aligned}$$

Особый случай возникает при совпадающих свободных параметрах $\alpha' = \alpha$. Переходя к пределу $\alpha' \rightarrow \alpha$

в (А.1), получаем соотношение, которое в записи через полиномы и функции Поллачека имеет вид

$$q_{n_>}^l p_{n_<}^l - q_{n_<}^l p_{n_>}^l = (-1)^{n_<} \frac{(n_<+1)_{2l+1} (n_>+1)_{2l+1}}{(2l+1)!} \times \\ \times \frac{2}{(4\alpha\nu)^{n_<+1}} \frac{(\alpha-\nu)^{n_>+n_<+1}}{(\alpha+\nu)^{n_>-n_<-1}} \times \\ \times \sum_{p=n_<+1}^{n_>} C_{n_>}^p (-z)^p \frac{(-p+1)_{n_<} (l+2+\eta+n_<-p)_{p-n_<-1}}{(2l+2)_p} \times \\ \times {}_2F_1(-n_>+p, l+1-\eta+p; 2l+2+p; z) \times \\ \times {}_2F_1(-p+1+n_<, n_<+2l+2; \\ l+2+\eta+n_<-p; (\alpha+\nu)^2/4\alpha\nu), \quad (\text{A.2})$$

где $n_< = \min\{n, n'\}$, $n_> = \max\{n, n'\}$.

В простейшем случае $n_< = n = n_> - 1$ из (А.2) следует соотношение

$$q_n^{+l} p_{n-1}^l - q_{n-1}^{+l} p_n^l = 2(n+1)_{2l}, \quad (\text{A.3})$$

которое соответствует частному случаю условия симметрии (19):

$$g_{kk-1}^l(\nu; \alpha, \alpha) = g_{-1k}^l(\nu; \alpha, \alpha).$$

Отметим, что в [10, формула (А.18)] соотношение (А.3) интерпретируется как «вронскиан» решений трехчленного рекуррентного соотношения (27).

2. Преобразуем входящую в (17) функцию ${}_2F_1(k+1, k+2l+2; k+l+2-\eta; x)$, используя известные соотношения [5]:

$$\frac{d^k}{dx^k} {}_2F_1(1, 2l+2; l+2-\eta; x) = \frac{k!(2l+2)_k}{(l+2-\eta)_k} \times \\ \times {}_2F_1(k+1, k+2l+2; k+l+2-\eta; x), \\ {}_2F_1(1, 2l+2; l+2-\eta; x) = (l+1-\eta)x^{\eta-l-1} \times \\ \times (1-x)^{-\eta-l-1} \int_0^x t^{l-\eta}(1-t)^{l+\eta} dt. \quad (\text{A.4})$$

В результате получаем

$$(l+1-\eta)^{-1} {}_2F_1(k+1, k+2l+2; k+l+2-\eta; x) = \\ = \frac{(l+2-\eta)_k}{(2l+2)_k k!} \left[\sum_{p=1}^k C_k^p \frac{d^{k-p}}{dx^{k-p}} \times \right. \\ \times (x^{-l-1+\eta}(1-x)^{-l-1-\eta}) \frac{d^{p-1}}{dx^{p-1}} (x^{l-\eta}(1-x)^{l+\eta}) + \\ \left. + \frac{d^k}{dx^k} (x^{-l-1+\eta}(1-x)^{-l-1-\eta}) \times \right. \\ \left. \times \int_0^x t^{l-\eta}(1-t)^{l+\eta} dt \right]. \quad (\text{A.5})$$

Выражая производные в (А.5) через гипергеометрические полиномы (см. (14)) и переходя в них к обратному аргументу,

$${}_2F_1(-k, -k-2l-1; -k-l+\eta; x) = \frac{(2l+2)_k}{(l+1-\eta)_k} \times \\ \times (-x)^k {}_2F_1(-k, 1+l-\eta; 2l+2; x^{-1}),$$

получаем следующее разложение:

$${}_2F_1(k+1, k+2l+2; k+l+2-\eta; x) = \\ = \frac{(l+2-\eta)_k}{k!} (1-x)^{-k} {}_2F_1(-k, l+1-\eta; 2l+2; x^{-1}) \times \\ \times {}_2F_1(1, 2l+2; l+2-\eta; x) - \\ - \frac{(l+1-\eta)_{k+1}}{(2l+2)_k k!} (1-x)^{-k} \times \\ \times \sum_{p=1}^k C_k^p (2l+2)_{k-p} (\eta-l)_{p-1} (-x)^{-p} \times \\ \times {}_2F_1(-k+p, l+1-\eta, 2l+2, x^{-1}) \times \\ \times {}_2F_1(-p+1, 2l+2-p; l+2-\eta-p; x). \quad (\text{A.6})$$

Подставляя (А.6) в (17), получаем выражения (21) и (22).

3. Для вывода формулы (23) используется следующее разложение функции Уиттекера $M_{\eta, l+1/2}(2r/\nu)$ по полной системе функций Штурма $S_{nl}(2r/\alpha)$:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{\alpha-\nu}{\alpha+\nu} \right)^k {}_2F_1(-k, l+1-\eta; 2l+2; z) S_{kl}(2r/\alpha) = \\ = \left(\frac{\nu^2-\alpha^2}{4\alpha\nu} \right)^{l+1} \left(\frac{\nu+\alpha}{\nu-\alpha} \right)^\eta \frac{1}{r} M_{\eta, l+1/2}(2r/\nu), \quad (\text{A.7})$$

которое получается аналогично разложению (11). Фактически, (А.7) есть разложение регулярного в нуле решения кулоновской задачи с (произвольной) энергией E по квадратично-интегрируемому базису $S_{kl}(2r/\alpha)$. Детальный анализ таких разложений, включая случай нерегулярного решения, см. в [10, 62].

4. Для выделения мнимой части функции Грина $g_l(E; r, r')$ при $E > 0$ используется следующее соотношение:

$$\frac{{}_2F_1(1, 2l+2, l+2-\eta; z^{-1})}{l+1-\eta} + \\ + \frac{{}_2F_1(1, 2l+2, l+2+\eta; 1-z^{-1})}{l+1+\eta} = \\ = \frac{\Gamma(l+1-\eta)\Gamma(l+1+\eta)}{\Gamma(2l+2)} \frac{z^{2l+2}}{(z-1)^{\eta+l+1}}. \quad (\text{A.8})$$

Если z определяется формулой (12), α — вещественное, а ν, η — мнимые, то слагаемые в левой части являются комплексно-сопряженными, что позволяет выделить мнимую часть в (23).

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

Выражения для $\psi_{nl}^{s,a,t}$ в записи через p_k^l, \bar{q}_k^l имеют вид

$$\psi_{nl}^s = \frac{l}{3(2l+1)} [f^{l-1}(\tilde{\omega}) + f^{l-1}(-\tilde{\omega})] + \frac{l+1}{3(2l+1)} [f^{l+1}(\tilde{\omega}) + f^{l+1}(-\tilde{\omega})],$$

$$\psi_{nl}^a = \frac{l}{(2l+1)} [(f^{l-1}(\tilde{\omega}) + f^{l-1}(-\tilde{\omega})) - (f^{l+1}(\tilde{\omega}) - f^{l+1}(-\tilde{\omega}))],$$

$$\psi_{nl}^t = \frac{l}{3(2l+1)} [f^{l-1}(\tilde{\omega}) + f^{l-1}(-\tilde{\omega})] + \frac{l}{3(2l+1)} \frac{2l-1}{2l+3} [f^{l+1}(\tilde{\omega}) + f^{l+1}(-\tilde{\omega})],$$

где

$$f^{l+1}(\tilde{\omega}) = \frac{2n}{\tilde{\omega}(s+1)^2(d)_{2l+1}} \times [p_{d-1}^{l+1} - p_{d-2}^{l+1}] [\bar{q}_{d-1}^{l+1} - \bar{q}_{d-2}^{l+1}],$$

$$f^{l-1}(\tilde{\omega}) = \frac{2n}{\tilde{\omega}(d)_{2l+1}} [(s-1)p_{d-1}^{l-1} - dp_{d-1}^{l-1}] \times [(s-1)\bar{q}_{d-1}^{l-1} - d\bar{q}_{d-1}^{l-1}].$$

Ниже приведен явный вид полиномов $\varphi_{nl}^{(\pm)}$ и $\psi_{nl}^{s,a,t}$, входящих в выражения для поляризуемостей (65), для состояний с главным квантовым числом $n \leq 4$:

$$\begin{aligned} \varphi_{10}^{(+)} &= \frac{1}{2}, \quad \psi_{10}^s = 0, \\ \varphi_{20}^{(+)} &= 1, \quad \psi_{20}^s = 0, \\ \varphi_{21}^{(+)} &= \frac{5}{12}, \quad \psi_{21}^s = -\psi_{21}^t = \frac{32}{27\tilde{\omega}^2}, \\ \varphi_{21}^{(-)} &= \frac{8}{9\tilde{\omega}^2}, \quad \psi_{21}^a = -\frac{4}{3\tilde{\omega}}, \\ \varphi_{30}^{(+)} &= \frac{3}{2} \left(1 + \frac{4}{3\tilde{\omega}}\right)^2, \quad \psi_{30}^s = \frac{16}{\tilde{\omega}^2}, \\ \varphi_{31}^{(+)} &= \frac{5}{3}, \quad \psi_{31}^s = -\psi_{31}^t = \frac{16}{9\tilde{\omega}^2} \left(1 + \frac{8}{\tilde{\omega}^2}\right), \\ \varphi_{31}^{(-)} &= \frac{32}{9\tilde{\omega}^2} \left(1 + \frac{2}{\tilde{\omega}}\right)^2, \quad \psi_{31}^a = -\frac{8}{\tilde{\omega}} \left(1 - \frac{4}{\tilde{\omega}^2}\right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \varphi_{32}^{(+)} &= \frac{7}{18}, \quad \psi_{32}^s = -\psi_{32}^t = \frac{16}{25\tilde{\omega}^2}, \\ \varphi_{32}^{(-)} &= \frac{4}{15\tilde{\omega}^2}, \quad \psi_{32}^a = -\frac{8}{5\tilde{\omega}}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \varphi_{40}^{(+)} &= 2 \left(1 + \frac{4}{\tilde{\omega}} + \frac{8}{3\tilde{\omega}^2}\right)^2, \\ \psi_{40}^s &= \frac{320}{3\tilde{\omega}^2} \left(1 + \frac{8}{15\tilde{\omega}^2}\right), \\ \varphi_{41}^{(+)} &= \frac{25}{6} \left(1 + \frac{4}{5\tilde{\omega}}\right)^2, \\ \psi_{41}^s &= \frac{448}{27\tilde{\omega}^2} \left(1 + \frac{552}{35\tilde{\omega}^2} + \frac{384}{35\tilde{\omega}^4}\right), \\ \varphi_{41}^{(-)} &= \frac{80}{9\tilde{\omega}^2} \left(1 + \frac{28}{5\tilde{\omega}} + \frac{24}{5\tilde{\omega}^2}\right)^2, \\ \psi_{41}^a &= -\frac{80}{3\tilde{\omega}} \left(1 - \frac{144}{25\tilde{\omega}^2} - \frac{3328}{75\tilde{\omega}^4}\right), \\ \psi_{41}^t &= -\frac{512}{135\tilde{\omega}^2} \left(1 + \frac{69}{\tilde{\omega}^2} + \frac{48}{\tilde{\omega}^4}\right), \\ \varphi_{42}^{(+)} &= \frac{7}{3}, \quad \psi_{42}^s = -\psi_{42}^t = \frac{64}{75\tilde{\omega}^2} \left(1 + \frac{16}{3\tilde{\omega}^2}\right), \\ \varphi_{42}^{(-)} &= \frac{8}{5\tilde{\omega}^2} \left(1 + \frac{4}{3\tilde{\omega}}\right)^2, \\ \psi_{42}^a &= -\frac{64}{5\tilde{\omega}} \left(1 - \frac{16}{15\tilde{\omega}^2}\right), \\ \varphi_{43}^{(+)} &= \frac{3}{8}, \quad \psi_{43}^s = -\psi_{43}^t = \frac{64}{147\tilde{\omega}^2}, \\ \varphi_{43}^{(-)} &= \frac{8}{63\tilde{\omega}^2}, \quad \psi_{43}^a = -\frac{12}{7\tilde{\omega}}. \end{aligned}$$

ЛИТЕРАТУРА

1. W. Gordon, Ann. Phys. (Leipzig) **2**, 1031 (1929); В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1980), §52; Г. Бете, Э. Солпитер, *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами*, Физматгиз, Москва (1960), §63.
2. C. Schwartz and T. J. Tiemann, Ann. Phys. (N. Y.) **6**, 178 (1959); М. Н. Mittleman and F. Wolfe, Phys. Rev. **128**, 2686 (1962).
3. M. Gavrila, Preprint of the Inst. of Atomic Phys., Bucharest, IFA FI-60 (1966); Phys. Rev. **163**, 147 (1967).
4. S. I. Vetchinkin and S. V. Khristenko, Chem. Phys. Lett. **1**, 437 (1967); С. В. Христенко, С. И. Ветчинкин, Опт. и спектр. **25**, 650 (1968).

5. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, т. 1, Наука, Москва (1973).
6. Б. А. Зон, Н. Л. Манаков, Л. П. Рапопорт, ЖЭТФ **55**, 924 (1968).
7. M. Gavrilă, Z. Phys. A **293**, 269 (1979); V. Florescu, Phys. Rev. A **30**, 2441 (1984); V. Florescu and A. Cionga, Z. Phys. A **321**, 187 (1985).
8. A. Maquet, Phys. Rev. A **15**, 1088 (1977).
9. М. А. Преображенский, ЖЭТФ **111**, 816 (1997).
10. J. T. Broad, Phys. Rev. A **31**, 1494 (1985).
11. V. Yahontov and K. Jungmann, Z. Phys. D **38**, 141 (1996).
12. A. A. Krylovetsky, N. L. Manakov, and S. I. Marmo, Laser Phys. **7**, 817 (1997).
13. A. Costescu, I. Brândus, and N. Mezincescu, J. Phys. B **18**, L11 (1985); V. Florescu, S. Pătrăscu, and O. Stoican, Phys. Rev. A **36**, 2155 (1987).
14. E. Karule, J. Phys. B **4**, L67 (1971); A. Maquet, Phys. Lett. A **48**, 199 (1974).
15. T. A. Marian, Phys. Rev. A **39**, 3817 (1989).
16. А. И. Игнатъев, ЖЭТФ **70**, 484 (1976).
17. J. P. Gazeau, J. Math. Phys. **19**, 1041 (1978).
18. Л. П. Рапопорт, Б. А. Зон, Н. Л. Манаков, ЖЭТФ **56**, 400 (1969).
19. S. Klarsfeld, Lett. Nuovo Cim. **2**, 548 (1969); *ibid* **3**, 395 (1970); *ibid* **2**, 548 (1969); В. Г. Горшков, В. С. Поликанов, Письма ЖЭТФ **9**, 464 (1969).
20. M. Gavrilă, Lett. Nuovo Cim. **2**, 180 (1969); Phys. Rev. A **6**, 1360 (1972); Rev. Roum. Phys. **19**, 483 (1974).
21. E. Karule, J. Phys. B **11**, 441 (1978); E. Karule and R. H. Pratt, *ibid* **24**, 1585 (1991); E. Karule, *ibid* **18**, 220 (1985).
22. S. Klarsfeld and A. Maquet, J. Phys. B **12**, L553 (1979); Phys. Lett. A **78**, 40 (1980); *ibid* **73**, 100 (1979).
23. A. G. Fainshtein, N. L. Manakov, and S. I. Marmo, Phys. Lett. A **104**, 347 (1984).
24. N. L. Manakov, S. I. Marmo, and A. V. Shaposhnikov, in *Atoms and Molecules in Strong Field of Laser Radiation*, ed. by F. V. Bunkin and I. I. Tugov, Wiley-Nauka Scientific Pub., Moscow (1992), p. 87.
25. E. J. Heller, Phys. Rev. A **12**, 1222 (1975).
26. N. L. Manakov, A. Maquet, S. I. Marmo, and C. Szymanski, Phys. Lett. A **237**, 234 (1998).
27. С. А. Запрягаев, Н. Л. Манаков, В. Г. Пальчиков, *Теория многозарядных ионов с одним и двумя электронами*, Энергоатомиздат, Москва (1985), Гл. 2.
28. N. L. Manakov, V. D. Ovsiannikov, and L. P. Rapoport, Phys. Rep. **141**, 319 (1986), sec. 4.
29. A. Maquet, V. Vénierd, and T. A. Marian, J. Phys. B **31**, 3743 (1998).
30. L. Hostler, J. Math. Phys. **11**, 2966 (1970).
31. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, т. 2, Наука, Москва (1974).
32. Н. Л. Манаков, С. И. Мармо, А. Г. Файнштейн, ТМФ **59**, 49 (1984).
33. E. Arnous, J. Bastian, and A. Maquet, Phys. Rev. A **27**, 977 (1983).
34. R. Shakeshaft, J. Phys. B **18**, L611 (1985); Phys. Rev. A **34**, 244 (1986).
35. Б. А. Зон, Н. Л. Манаков, Л. П. Рапопорт, Яд. физ. **15**, 282 (1972); N. L. Manakov, L. P. Rapoport, and S. A. Zaprugaev, Phys. Lett. A **43**, 139 (1973).
36. J. Schwinger, J. Math. Phys. **5**, 1606 (1964).
37. L. C. Hostler, J. Math. Phys. **5**, 1235 (1964).
38. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, т. 3, Наука, Москва (1974).
39. R. Parr, J. Phys. A **20**, 153 (1987).
40. Л. П. Пресняков, А. М. Урнов, ЖЭТФ **68**, 61 (1975).
41. C. Greene, U. Fano, and G. Strinati, Phys. Rev. A **19**, 1485 (1979).
42. V. E. Chernov, N. L. Manakov, and A. F. Starace, Eur. Phys. Journ. D **8**, 347 (2000).
43. C. Dorman, I. Kucukkara, and J. P. Marangos, Phys. Rev. A **61**, 013802 (2000).
44. G. Z. Zhang, D. W. Tokaryk, and B. P. Stoicheff, Phys. Rev. A **56**, 813 (1997).
45. N. L. Manakov, A. Maquet, S. I. Marmo, V. Vénierd, and G. Ferrante, J. Phys. B **32**, 3747 (1999).
46. Б. А. Зон, Н. Л. Манаков, Л. П. Рапопорт, Опт. и спектр. **38**, 13 (1975).
47. Д. А. Варшалович, А. Н. Москалев, В. К. Херсонский, *Квантовая теория углового момента*, Наука, Ленинград (1975).

48. Н. Л. Манаков, В. А. Свиридов, А. Г. Файнштейн, ЖЭТФ **95**, 790 (1989).
49. В. П. Гавриленко, ЖЭТФ **90**, 857 (1986).
50. И. Л. Бейгман, ЖЭТФ **100**, 125 (1991); I. L. Beigman, L. A. Bureeva, and R. H. Pratt, J. Phys. B **27**, 5833 (1994).
51. С. В. Христенко, С. И. Ветчинкин, Опт. и спектр. **26**, 310 (1969).
52. А. М. Переломов, В. С. Попов, ЖЭТФ **50**, 179 (1966).
53. Н. Е. Фирсова, А. И. Шерстюк, ТМФ **81**, 59 (1989).
54. R. Szmytkowski, J. Phys. A **31**, 4963, 7415 (1998).
55. А. И. Шерстюк, Опт. и спектр. **87**, 765 (1999).
56. B. R. Junker, Adv. At. Mol. Phys. **18**, 208 (1982); N. Moiseyev, Phys. Rep. **302**, 211 (1998).
57. H. A. Yamani and W. P. Reinhardt, Phys. Rev. A **11**, 1144 (1975).
58. A. Maquet, S. I. Chu, and W. P. Reinhardt, Phys. Rev. A **27**, 2946 (1983).
59. R. M. Potvliege and R. Shakeshaft, in *Atoms in Intense Laser Fields*, ed. by M. Gavrilu, Academic Press, New York (1992), p. 373.
60. R. Gersbacher and J. T. Broad, J. Phys. B **23**, 365 (1990).
61. N. L. Manakov, S. I. Marmo, E. A. Pronin, and A. F. Starace, in *Abstracts of Annual Conf. of Amer. Phys. Soc. (DAMOP'2000)*, (Storrs: Connecticut, USA, 12-14 June, 2000) [Bull. Amer. Phys. Soc. **45**, 118 (2000)].
62. L. J. Dubé and J. T. Broad, J. Phys. B **23**, 1711 (1990).