

ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ ДЛЯ ИНТЕНСИВНОСТИ ШТАРКОВСКИХ ЛИНИЙ АТОМА ВОДОРОДА

А. А. Каменский, В. Д. Овсянников*

*Воронежский государственный университет
394693, Воронеж, Россия*

Поступила в редакцию 8 февраля 2001 г.

Теория возмущений для волновой функции водородоподобного атома в однородном электрическом поле напряженности F позволяет получить ряд Рэля–Шредингера, коэффициентами которого при F^N ($N = 0, 1, 2, \dots$) являются линейные комбинации функции Штурма, представляющей невозмущенное состояние, с $8N^2$ функциями соответствующего полного набора с индексами, смежными с параболическим квантовым числом исходного уровня. Развита метод рекурсивного аналитического расчета коэффициентов линейной комбинации в произвольном порядке N . Получены общие выражения для поправок к матричным элементам и интенсивностям радиационных переходов между штарковскими подуровнями. Приведены аналитические формулы и численные значения поправок до четвертого порядка включительно для серий Лаймана и Бальмера. Дано сравнение с имеющимися в литературе данными для переходов между штарковскими компонентами ридберговских состояний.

PACS: 32.60.+i, 32.70.-n, 32.70.Fw

1. ВВЕДЕНИЕ

Оптические свойства атома в электрическом поле зависят от напряженности поля. Сдвиг и расщепление спектральных линий, называемые эффектом Штарка, обусловлены изменением энергии атомных уровней и рассчитаны для атома водорода практически до произвольных порядков теории возмущений по взаимодействию атома с полем [1, 2]. Тем не менее и в настоящее время имеется ряд неизученных сторон данного явления, поэтому эффект Штарка до сих пор остается одной из центральных проблем физики атома.

Наряду с изменением частот под действием поля происходит изменение интенсивности линий. Эффект полевой зависимости интенсивности дает дополнительную спектроскопическую информацию о структуре атома, которая может быть использована на практике для оптической диагностики действующих на атом полей, для управления излучением и поглощением света веществом. По интенсивности

линий можно определить индуцированное полем изменение радиационного матричного элемента и, следовательно, найти поправки к волновым функциям начального и конечного состояний атома.

Определение зависимости интенсивности линий от напряженности поля требует новых подходов к изучению структуры атома, как теоретических, так и экспериментальных, отличных от использовавшихся для определения зависимости от поля атомных частот. Поэтому вопрос об изменении матричных элементов и интенсивности радиационных переходов в поле остается малоизученным, и во многих случаях ответа на него в литературе найти невозможно.

Первое экспериментальное наблюдение изменения вероятности переходов между ридберговскими состояниями атома водорода в поле выполнено в работе [3] методом ионизационной спектроскопии. Для теоретической интерпретации полученных результатов в [3] использовалась численная диагонализация гамильтониана взаимодействия атома с полем в конечном базисе близких по энергии состояний. Эффективность таких расчетов ограничена не только неполнотой базисных состояний и связанной

*E-mail: alex@kams.vsu.ru

с этим необходимостью дополнительной проверки точности и сходимости результатов, но и отсутствием каких-либо аналитических соотношений, позволяющих провести общий анализ зависимости эффекта от квантовых чисел начального и конечного состояний, а также значительным количеством вычислений для каждого конкретного перехода. Возможность получения простых формул, выражающих поправки к энергии штарковских состояний через параболические квантовые числа [1, 2], дает основание считать, что такие же аналитические выражения можно получить и для поправок к волновым функциям и матричным элементам радиационных переходов.

Выражения для поправок первого [4] и второго [5] порядков получены недавно с помощью кулоновской функции Грина в параболических координатах. Соответствующие численные значения поправок к вероятности радиационных переходов в поле хорошо согласуются с экспериментальными результатами работы [3]. Однако в области сильных полей в окрестности порога ионизации первых двух порядков становится недостаточно для описания эффекта. Кроме того, для переходов между бездипольными состояниями поправки либо первого, либо второго порядка (в зависимости от поляризации излучения) оказываются равными нулю, тогда как для оценки применимости теории возмущений требуется знать хотя бы два из первых не исчезающих членов асимптотического ряда. Это обстоятельство стимулирует разработку надежного метода последовательного расчета поправок высших порядков теории возмущений для волновой функции и матричных элементов, аналогичных поправкам к энергии. Таким образом, история расчета эффекта Штарка по теории возмущений для энергии, продолжавшаяся более полувека (правильное выражение для поправки четвертого порядка впервые получено лишь в 1974 г. [6], т. е. почти через 50 лет после создания квантовой механики и получения аналитических выражений для поправок первых трех порядков), повторяется в наше время в расчетах волновых функций. Однако наличие аналитических компьютерных средств, позволивших создать программы и выполнить расчеты штарковских поправок к энергии произвольно высоких порядков — вплоть до нескольких десятков и сотен — уже к началу 1980-х годов [1], дает возможность существенно сократить время выполнения расчетов штарковских поправок к волновым функциям.

На первый взгляд, подобные расчеты можно выполнить, основываясь на тех же уравнениях

с разделенными параболическими переменными, что и использовавшиеся в расчетах энергий (см., например, [2, 7, 8]). Хотя эти уравнения достаточно просты, построение на их основе рядов Рэлея–Шредингера для волновой функции оказывается громоздким, поскольку наряду с рекурсивной процедурой определения коэффициентов линейной комбинации штурмовских функций, представляющих вектор состояния атома в поле, требуются использование дополнительных операций извлечения явной зависимости от поля из аргументов этих функций и преобразование их комбинации в степенной ряд с не зависящими от поля коэффициентами.

Процедура получения степенного ряда для штарковских волновых функций без решения системы двух связанных уравнений с разделяющимися параболическими переменными ξ и η может быть разработана на основе интегральной формы уравнения Шредингера для атома в поле с использованием замкнутого аналитического представления редуцированной функции Грина в параболических координатах [4].

Аналитическое представление для кулоновской функции Грина позволяет получить выражения для коэффициентов степенных рядов по напряженности поля F для волновой функции, матричных элементов и интенсивностей дипольных переходов в виде полиномов от параболических квантовых чисел начального и конечного уровней. В настоящей работе мы представляем общий метод расчета рядов теории возмущений для волновых функций штарковских состояний, основанный на рекуррентном соотношении между коэффициентами ряда, позволяющем построить компьютерную программу получения поправок высших порядков как в аналитическом виде, так и численно. Применение этого метода к расчету поправок первого и второго порядков дает результаты, идентичные полученным в [4, 5]. В данной работе мы устанавливаем общие соотношения симметрии, позволяющие существенно упростить расчеты коэффициентов разложения волновой функции по функциям Штурма, и приводим аналитические выражения коэффициентов до четвертого порядка включительно, полученные в виде функций параболических квантовых чисел. Обсуждаются асимптотические свойства поправок для переходов в ридберговские состояния с большими квантовыми числами. Получены численные значения коэффициентов, определяющих поправки первых четырех порядков к матричным элементам и интенсивностям линий серий Лаймана и Бальмера.

2. ПОПРАВКИ ВЫСШИХ ПОРЯДКОВ ДЛЯ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ ШТАРКОВСКИХ СОСТОЯНИЙ ВОДОРОДА

Метод разделения параболических переменных, обычно используемый в расчетах эффекта Штарка для энергетических уровней водорода [1, 2, 6–8], оказывается неэффективным для получения волновой функции в виде степенных рядов, коэффициенты которых не зависели бы от поля (рядов Рэля–Шредингера). Наиболее удобным для этой цели представляется использование кулоновской функции Грина в параболических координатах [9]. Благодаря тому что оператор взаимодействия атома с полем в параболических координатах диагонален, штарковские состояния водорода, принадлежащие оболочке с фиксированным главным квантовым числом n , в первом порядке по полю оказываются независимыми. Поэтому расчет поправок первого порядка к волновой функции и второго порядка к энергии оказывается осуществимым с помощью теории возмущений для невырожденных состояний и частично редуцированной функции Грина [4]. Однако уже во втором порядке матричный элемент гамильтониана взаимодействия атома с полем оказывается недиагональным, и состояния параболического базиса, принадлежащие данной n -оболочке, перемешиваются полем. В этой связи расчет поправок второго и последующих порядков должен основываться на теории возмущений для вырожденных состояний с полностью редуцированной функцией Грина [5]. Ниже дано обобщение метода, использованного в [4, 5], на случай произвольных порядков теории возмущений для волновой функции, позволяющее автоматизировать расчеты с помощью аналитических компьютерных программ. Поскольку в расчете высших порядков используются все поправки более низких порядков, надежность полученных результатов автоматически проверяется на низших порядках. В качестве примера мы приводим результаты расчетов до четвертого порядка включительно.

2.1. Теория возмущений для параболических состояний

Невозмущенное состояние водородоподобного иона (в отсутствие внешнего поля) в параболической системе координат описывается волновой функцией (штарковское состояние)¹⁾

¹⁾ В работе используется атомная система единиц $e = m = \hbar = 1$.

$$\psi_{nn_1n_2m}(\mathbf{r}) = A_{n_1n_2m} f_{n_1}^m \left(\frac{Z\xi}{n} \right) f_{n_2}^m \left(\frac{Z\eta}{n} \right) \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}, \quad (1)$$

где m представляет модуль магнитного квантового числа всюду, кроме показателя экспоненты, где эта величина может быть как положительной, так и отрицательной,

$$A_{n_1n_2m} = \frac{1}{n^2} \sqrt{\frac{2Z^3(n_1+m)!(n_2+m)!}{n_1!n_2!}}, \quad (2)$$

— нормировочная постоянная, Z — заряд атомного ядра,

$$f_k^m(x) = \frac{k!}{(k+m)!} e^{-x/2} x^{m/2} L_k^m(x) = \frac{1}{m!} e^{-x/2} x^{m/2} {}_1F_1(-k; m+1; x), \quad (3)$$

— функция Штурма кулоновского волнового уравнения, выраженная как через обобщенные полиномы Лагерра $L_k^m(x)$, так и через вырожденную гипергеометрическую функцию ${}_1F_1(-k; m+1; x)$ [10].

Параболические квантовые числа состояний с одними и теми же главным n и магнитным m квантовыми числами взаимно зависимы: $n_1+n_2 = n-m-1$. Поэтому наряду с параболическими числами штарковские состояния однозначно представляются с помощью так называемого электрического квантового числа $q = n_1 - n_2$, так что набор n_1n_2m всегда можно заменить набором nqm , чем мы и будем пользоваться в дальнейшем.

Использование параболического базиса связано с осевой симметрией оператора взаимодействия атома с однородным электрическим полем:

$$\hat{V}(\mathbf{r}) = zF, \quad (4)$$

где z является составляющей радиуса-вектора электрона \mathbf{r} на направление вектора напряженности поля \mathbf{F} . Интегральное уравнение Шредингера для точной волновой функции состояния, переходящего в слабом поле в (1), с учетом вырождения состояний с одинаковыми n и m можно представить в виде [11]

$$\begin{aligned} \Psi_{nn_1n_2m}(\mathbf{r}) &= \sum_{n'_1=0}^{n-m-1} a_{n'_1} \psi_{nn'_1n'_2m}(\mathbf{r}) - G'_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{V}(\mathbf{r}') \times \\ &\times |\Psi_{nn_1n_2m}(\mathbf{r}')\rangle = \end{aligned}$$

$$= \sum_{n'_1=0}^{n-m-1} a_{n'_1} \left[1 + G'_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{V}(\mathbf{r}') \right]^{-1} \times \\ \times |\psi_{nn'_1n'_2m}(\mathbf{r}')\rangle, \quad (5)$$

где $n'_1 + n'_2 = n_1 + n_2 = n - m - 1$; коэффициенты разложения волновой функции атома в поле по состояниям вырожденного базиса $a_{n'_1} = \langle \psi_{nn'_1n'_2m} | \Psi_{nn_1n_2m} \rangle$ удовлетворяют начальному условию $a_{n'_1} \xrightarrow{F \rightarrow 0} \delta_{n'_1 n_1}$ (символ Кронеккера); G'_E — редуцированная функция Грина,

$$G'_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \\ - \sum_{n'_1=0}^{n-m-1} \frac{\psi_{nn'_1n'_2m}(\mathbf{r}) \psi_{nn'_1n'_2m}^*(\mathbf{r}')}{E_n - E}, \quad (6)$$

$G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ — функция Грина для гамильтониана \hat{H}_0 свободного атома и точного значения энергии E атома в поле:

$$(\hat{H}_0 - E)G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

Функцию Грина (6) можно выразить через редуцированную функцию Грина с энергией E_n невозмущенного атома:

$$G'_{E_n}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_m^{(n)}(\xi, \eta; \xi', \eta') \frac{e^{im(\varphi - \varphi')}}{2\pi},$$

где

$$G_m^{(n)}(\xi, \eta; \xi', \eta') = \frac{2Z}{n} \sum_{k_1=0}^{\infty} \sum_{k_2=0}^{\infty} \frac{(k_1+m)!}{k_1!} \frac{(k_2+m)!}{k_2!} \times \\ \times \frac{f_{k_1}^m\left(\frac{Z\xi}{n}\right) f_{k_1}^m\left(\frac{Z\xi'}{n}\right) f_{k_2}^m\left(\frac{Z\eta}{n}\right) f_{k_2}^m\left(\frac{Z\eta'}{n}\right)}{k_1 + k_2 + m + 1 - n} + \\ + \frac{2Z}{n^2} \sum_{\nu_1=0}^{n-m-1} \frac{(\nu_1+m)!}{\nu_1!} \frac{(\nu_2+m)!}{\nu_2!} \times \\ \times \left(\frac{5}{2} + \xi \frac{\partial}{\partial \xi} + \xi' \frac{\partial}{\partial \xi'} + \eta \frac{\partial}{\partial \eta} + \eta' \frac{\partial}{\partial \eta'} \right) \times \\ \times f_{\nu_1}^m\left(\frac{Z\xi}{n}\right) f_{\nu_1}^m\left(\frac{Z\xi'}{n}\right) f_{\nu_2}^m\left(\frac{Z\eta}{n}\right) f_{\nu_2}^m\left(\frac{Z\eta'}{n}\right), \quad (7)$$

$$\nu_2 = n - \nu_1 - m - 1,$$

воспользовавшись разложением в ряд Тейлора:

$$G'_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{N=0}^{\infty} (G'_{E_n}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'))^{N+1} (\Delta E)^N = \\ = G'_{E_n}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \Delta E G'_{E_n}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') G'_{E_n}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}'). \quad (8)$$

Благодаря аксиальной симметрии возмущения (4), зависимость от угловой переменной φ остается такой же, как и для невозмущенной волновой функции (1). Она не сказывается на вычислениях, поэтому в дальнейшем может быть опущена.

Для коэффициентов $a_{n'_1}$ в волновой функции (5) после некоторых преобразований с учетом диагональности матричного элемента оператора (4),

$$V_{n_1 n'_1} = \langle \psi_{nn_1n_2m} | V(\mathbf{r}) | \psi_{nn'_1n'_2m} \rangle = \frac{3Fn}{2Z} q \delta_{n_1 n'_1},$$

можно записать уравнение, позволяющее проводить их расчет методом итераций:

$$a_{n'_1} = \left[\langle \psi_{nn'_1n'_2m} | \hat{V}(\mathbf{r}) G_m^{(n)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \times \right. \\ \times \left(\hat{V}(\mathbf{r}') - \Delta E \right) | \Psi_{nn_1n_2m} \rangle + \left(\Delta E - \Delta E^{(1)} \right) a_{n'_1} \left. \right] \times \\ \times \left(V_{n'_1 n'_1} - \Delta E^{(1)} \right)^{-1}, \quad (9)$$

где $\Delta E^{(1)} = V_{n_1 n_1}$ — поправка к энергии первого порядка, $n'_1 \neq n_1$.

С помощью (5), (9) можно выразить поправку любого порядка к волновой функции через поправки предыдущих порядков малости по полю. Исключение составляет только один член суммы (5) с $n'_1 = n_1$, для определения которого необходимо использовать условие нормировки

$$\langle \Psi_{nn_1n_2m} | \Psi_{nn_1n_2m} \rangle = \sum_{n'_1} |a_{n'_1}|^2 + \\ + \langle \Psi_{nn_1n_2m} | \hat{V} (G'_E)^2 \hat{V} | \Psi_{nn_1n_2m} \rangle = 1.$$

2.2. Разложение поправок к волновым функциям штарковских состояний по функциям Штурма

Свойства ортогональности обобщенных полиномов Лагерра позволяют вычислить интегралы по параболическим переменным в (5), (9) аналитически, представив точную волновую функцию в виде линейной комбинации функций Штурма (3) уравнения Шредингера для невозмущенного атома:

$$\Psi_{nn_1n_2m}(\mathbf{r}) = A_{n_1n_2m} \times \\ \times \sum_{i_1} \sum_{i_2} b_{i_1 i_2}(n_1 n_2 m) f_{n_1+i_1}^m\left(\frac{Z\xi}{n}\right) f_{n_2+i_2}^m\left(\frac{Z\eta}{n}\right). \quad (10)$$

Данное разложение может служить основой для получения ряда Рэлея–Шредингера волновой функции атома в поле. Главным преимуществом, отличающим (10) от функций, возникающих в методе

разделения параболических переменных, является независимость от поля аргументов функций Штурма. Вся зависимость от поля в этом выражении сосредоточена в коэффициентах суперпозиции b , что и позволяет выразить волновую функцию (10) в виде ряда по степеням напряженности поля F . Следует отметить, что наряду с уравнениями (5), (7) разложение (10) может быть обосновано и свойством полноты функции Штурма кулоновского уравнения Шредингера с фиксированной энергией, позволяющим раскладывать по ним любую функцию, удовлетворяющую тем же граничным условиям.

Вычисление коэффициентов $b_{i_1 i_2}$ можно свести к рекуррентной процедуре, подставив разложение (10) в (9), (5). После некоторых преобразований получаем для любого коэффициента из (10), кроме b_{00} , выражение вида

$$b_{k_1 k_2} = \sum_{t_1 t_2} X_{t_1 t_2 k_1 k_2} b_{t_1 t_2}, \quad (11)$$

где

$$\begin{aligned} X_{t_1 t_2 k_1 k_2} = & \frac{2Z\delta_{k_1+k_2,0}}{3nF(k_1-k_2)} \times \\ & \times \sum_{N=2}^{\infty} \Delta E^{(N)} \tilde{U}_{n_1+k_1 n_2+k_2 n_1+t_1 n_2+t_2} + \\ & + \sum_{l_1 l_2} \left(v_{n_1+t_1 n_2+t_2 l_1 l_2} - \Delta E u_{n_1+t_1 n_2+t_2 l_1 l_2} \right) \times \\ & \times \left(\frac{2Z\delta_{k_1+k_2,0} \tilde{V}_{n_1+k_1 n_2+k_2 l_1 l_2}}{3n(k_1-k_2)F} - \right. \\ & \left. - \delta_{l_1 n_1+k_1} \delta_{l_2 n_2+k_2} \right), \quad (12) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} v_{k_1 k_2 k'_1 k'_2} = & \frac{n^2}{2Z^2} \times \\ & \times \left[\left(\delta_{k'_1+k'_2, n_1+n_2} + \frac{2n(1-\delta_{k'_1+k'_2, n_1+n_2})}{k'_1+k'_2+m+1-n} \right) \times \right. \\ & \times \tilde{V}_{k'_1 k'_2 k_1 k_2} + \left(\delta_{k'_1+k'_2, n_1+n_2+1} - \delta_{k'_1+k'_2, n_1+n_2} \right) \times \\ & \times \left((k'_1+m) \tilde{V}_{k'_1-1 k'_2 k_1 k_2} + (k'_2+m) \tilde{V}_{k'_1 k'_2-1 k_1 k_2} \right) + \\ & + \left(\delta_{k'_1+k'_2, n_1+n_2} - \delta_{k'_1+k'_2, n_1+n_2-1} \right) \times \\ & \left. \times \left((k'_1+1) \tilde{V}_{k'_1+1 k'_2 k_1 k_2} + (k'_2+1) \tilde{V}_{k'_1 k'_2+1 k_1 k_2} \right) \right]. \quad (13) \end{aligned}$$

Здесь

$$\tilde{V}_{k_1 k_2 k'_1 k'_2} = A_{k_1 k_2 m}^2 \langle f_{k_1}^m f_{k_2}^m | \hat{V} | f_{k'_1}^m f_{k'_2}^m \rangle.$$

Выражение для $u_{k_1 k_2 k'_1 k'_2}$ получается из $v_{k_1 k_2 k'_1 k'_2}$ заменой $\tilde{V}_{k_1 k_2 k'_1 k'_2}$ на

$$\tilde{U}_{k_1 k_2 k'_1 k'_2} = A_{k_1 k_2 m}^2 \langle f_{k_1}^m f_{k_2}^m | f_{k'_1}^m f_{k'_2}^m \rangle.$$

Тензор (12) не определен при $k_1 = k_2 = 0$.

Каждый из коэффициентов $b_{i_1 i_2}$ раскладываем в ряд по напряженности поля, вынося для удобства зависящий от главного квантового числа масштабный множитель:

$$b_{i_1 i_2} = \sum_{N=0}^{\infty} F^N \left(\frac{n}{2Z} \right)^{3N} b_{i_1 i_2}^{(N)}. \quad (14)$$

Аналогичное разложение для тензора (12) имеет вид

$$X_{t_1 t_2 k_1 k_2} = \sum_{N=1}^{\infty} F^N \left(\frac{n}{2Z} \right)^{3N} X_{t_1 t_2 k_1 k_2}^{(N)}. \quad (15)$$

Здесь $b_{i_1 i_2}^{(N)}$ и $X_{t_1 t_2 k_1 k_2}^{(N)}$ — не зависящие от поля величины. Следует обратить внимание на то, что разложение для b начинается с нулевого порядка по полю, а для X — с первого. Это обстоятельство показывает, что соотношение (11) выражает связь коэффициентов разложения (14) высших порядков с низшими и, в частности, объясняет тот факт, что уравнение (11) неприменимо при $k_1 = k_2 = 0$.

Выражения (11)–(13) показывают, что ненулевые коэффициенты $b_{i_1 i_2}^{(N)}$ соответствуют $|i_1| = 2M$, $2M-1$ и $|i_2| \leq 2N-2M$ ($M = 0, \dots, N$). Таким образом, полное число ненулевых коэффициентов $b_{i_1 i_2}^{(N)}(n_1 n_2 m)$ равно $8N^2 + 1$. Следовательно, в первом порядке по полю разложение (10) включает 9 ненулевых слагаемых (при этом один из индексов у $b_{i_1 i_2}^{(1)}(n_1 n_2 m)$ должен быть нулевым), во втором — 33, в третьем — 73 слагаемых и т. д.

Описанный здесь формализм позволяет получить и поправку к энергии ΔE любого порядка, выразив ее через коэффициенты $b_{i_1 i_2}$. Поскольку поправки к энергии в электрическом поле рассчитаны практически в произвольно высоких порядках (см. [1]), можно считать эти величины известными, используя их для контроля правильности расчетов поправок к волновым функциям.

Для первых трех членов разложения (14) (кроме нулевого) уравнение (11) дает

$$b_{k_1 k_2}^{(1)} = \sum_{t_1 t_2} X_{t_1 t_2 k_1 k_2}^{(1)} b_{t_1 t_2}^{(0)} = X_{00 k_1 k_2}^{(1)}, \quad (16)$$

$$b_{k_1 k_2}^{(2)} = \sum_{t_1 t_2} X_{t_1 t_2 k_1 k_2}^{(1)} b_{t_1 t_2}^{(1)}, \quad (17)$$

$$b_{k_1 k_2}^{(3)} = \sum_{t_1 t_2} \left(X_{t_1 t_2 k_1 k_2}^{(1)} b_{t_1 t_2}^{(2)} + X_{t_1 t_2 k_1 k_2}^{(2)} b_{t_1 t_2}^{(1)} \right), \quad (18) \quad \text{и}$$

$$b_{k_1 k_2}^{(4)} = \sum_{t_1 t_2} \left(X_{t_1 t_2 k_1 k_2}^{(1)} b_{t_1 t_2}^{(3)} + X_{t_1 t_2 k_1 k_2}^{(2)} b_{t_1 t_2}^{(2)} + X_{t_1 t_2 k_1 k_2}^{(3)} b_{t_1 t_2}^{(1)} \right). \quad (19)$$

Можно показать, что в случае $t_1 = t_2 = 0$ тензор (12) отличен от нуля только при $N = 1$. Поэтому при $N \geq 2$ в выражение для $b^{(N)}$ не входит величина $X^{(N)}$, зависящая от $\Delta E^{(N+1)}$, и для определения $b_{k_1 k_2}^{(N)}$ достаточно знать поправки к энергии порядка не выше N ($X^{(1)}$, а следовательно, и $b^{(1)}$ зависят от $\Delta E^{(2)}$).

Соотношения (16)–(19) справедливы для всех значений индексов k_1, k_2 , кроме $k_1 = k_2 = 0$. Коэффициенты $b_{00}^{(N)}$ находятся из условия нормировки волновой функции. Рассмотрим N -й порядок выражения

$$\langle \Psi_{nn_1 n_2 m} | \Psi_{nn_1 n_2 m} \rangle = 1,$$

выделим из него произведения $b^{(0)} b^{(N)}$ и разрешим полученное уравнение относительно $b_{00}^{(N)}$. Тогда для $N > 0$ получим

$$b_{00}^{(N)} = -\frac{1}{2} \sum_{k_1 k_2} \frac{A_{n_1 n_2 m}^2}{A_{n_1+k_1 n_2+k_2 m}^2} \times \sum_{l_1 l_2} \sum_{i=1}^{N-1} b_{k_1 k_2}^{(i)} b_{l_1 l_2}^{(N-i)} \tilde{U}_{n_1+k_1 n_2+k_2 n_1+l_1 n_2+l_2} - \sum_{(t_1 t_2) \neq (00)} b_{t_1 t_2}^{(N)} \tilde{U}_{n_1 n_2 n_1+t_1 n_2+t_2}. \quad (20)$$

При $N = 1$ сумма по i исчезает, и в правой части остается только сумма по t_1, t_2 . Таким образом, для расчета $b_{00}^{(N)}$ по формуле (20) необходимо определить все коэффициенты $b_{i_1 i_2}^{(N)}$ с $(i_1 i_2) \neq (00)$, которые выражаются через такие же коэффициенты всех предыдущих порядков малости.

В общем случае рекуррентные соотношения довольно громоздки, однако для «крайних» коэффициентов удается получить общие выражения вида

$$b_{2N0}^{(N)} = (-1)^N \frac{(n_1 + m + 1)_{2N}}{N!}, \quad (21)$$

$$b_{-2N0}^{(N)} = \frac{(n_1 - 2N + 1)_{2N}}{N!},$$

а также

$$b_{2N-10}^{(N)} = (-1)^{N-1} \frac{2(n_1 + m + 1)_{2N-1}}{3(N-1)!} \times (6n - 3q + 8N - 2) \quad (22)$$

$$b_{-(2N-1)0}^{(N)} = -\frac{2(n_1 - 2N + 2)_{2N-1}}{3(N-1)!} \times (6n - 3q - 8N + 2). \quad (23)$$

Здесь использовано стандартное обозначение для символа Похгаммера: $(a)_n = a(a+1) \dots (a+n-1)$.

Симметрия оператора возмущения (4) сказывается и на симметрии коэффициентов:

$$b_{i_1 i_2}^{(N)}(nqm) = (-1)^N b_{i_2 i_1}^{(N)}(n-q, m), \quad (24)$$

$$b_{i_1 i_2}^{(N)}(nqm) = (-1)^N b_{-i_1 -i_2}^{(N)}(-n-q, m).$$

Здесь i_1, i_2 — неотрицательные целые числа. Эти соотношения позволяют значительно упростить расчет коэффициентов, в общем случае выполняемый по рекуррентным формулам вида (17)–(19), выражающим $b_{i_1 i_2}^{(N)}$ через коэффициенты всех предыдущих порядков. Для некоторых значений i_1 и i_2 в этих формулах может оставаться только одно отличное от нуля слагаемое, содержащее $X_{t_1 t_2 k_1 k_2}^{(1)}$, тогда связь между коэффициентами старших и младших порядков значительно упрощается:

$$b_{\pm i_1 \pm i_2}^{(N)} = b_{\pm i_1 0}^{(N-1)} b_{0 \pm i_2}^{(1)},$$

$$i_1 = 2N - 2, 2N - 3, \quad i_2 = 1, 2.$$

Коэффициенты с индексами, не удовлетворяющими перечисленным условиям, описываются более сложными выражениями, для которых наиболее общая форма записи имеет вид

$$b_{i_1 i_2}^{(N)}(nqm) = (n - n_2)_{i_1} (n - n_1)_{i_2} \times P_K^{(i_1, i_2)}(n, q, m), \quad (25)$$

$$b_{-i_1 i_2}^{(N)}(nqm) = (n_1 - i_1 + 1)_{i_1} (n - n_1)_{i_2} \times R_K^{(i_1, i_2)}(n, q, m),$$

где нижний индекс полиномов $P_K^{(i_1, i_2)}(n, q, m)$, $R_K^{(i_1, i_2)}(n, q, m)$ определяет их порядок $K = 2N - i_1 - i_2$ по каждому из трех аргументов. При этом магнитное квантовое число m встречается в этих полиномах только в четных степенях с показателем не выше K . При нулевом значении одного из индексов, i_1 или i_2 , между полиномами P и R устанавливается простая связь, следующая из соотношений симметрии (24):

$$P_K^{(i_1, 0)}(n, q, m) = (-1)^{N+i_1} R_K^{(i_1, 0)}(-n, -q, m).$$

Интересной особенностью обладают коэффициенты $b_{00}^{(N)}$: в четных порядках $N = 2M$ — это полиномы порядка $2M$ от квадратов квантовых чисел, в нечетных $N = 2M + 1$ — это аналогичные полиномы, умноженные на электрическое квантовое число:

$$\begin{aligned} b_{00}^{(2M)}(nqm) &= Q_{2M}^e(n^2, q^2, m^2), \\ b_{00}^{(2M+1)}(nqm) &= qQ_{2M}^0(n^2, q^2, m^2). \end{aligned} \quad (26)$$

Так, $Q_0^e = 1$, $Q_0^0 = 6$,

$$Q_2^e(n^2, q^2, m^2) = -\frac{1}{8} \left[65n^4 - 6n^2(7q^2 + 11m^2 - 249) + 17q^4 - 18q^2m^2 + m^4 - 74q^2 - 650m^2 + 1289 \right], \quad (27)$$

$$Q_2^0(n^2, q^2, m^2) = \frac{1}{4} \left[525n^4 + 2n^2(31q^2 + 395m^2 + 13191) - 99q^4 + 93m^4 + 6q^2m^2 - 818q^2 + 6494m^2 + 31365 \right]. \quad (28)$$

Аналогичным свойством обладают и диагональные коэффициенты $b_{k,k}^{(N)}$ с индексами $k < N$: для нечетных N они пропорциональны q . В частности, полиномы, определяющие $b_{11}^{(3)}$ и $b_{22}^{(3)}$ в соответствии с (25), имеют вид

$$\begin{aligned} P_4^{(1,1)}(n, q, m) &= -4q[4n^2(n+4) - n(q^2 + 24) - 13q^2 - 12m^2 + 12], \\ P_2^{(2,2)}(n, q, m) &= -2q(8n + 19), \end{aligned} \quad (29)$$

тогда как для полиномов, определяющих «антидиагональные» коэффициенты, например $b_{-1,1}^{(3)}$ и $b_{-2,2}^{(3)}$, имеем:

$$\begin{aligned} R_4^{(1,1)}(n, q, m) &= -2[4n^4 + n^2(3q^2 - 4m^2 - 20q - 352) - q^4 + 22q^3 + \\ &\quad + q^2(m^2 + 99) + q(28m^2 + 180) + 52(m^2 + 3)], \\ R_2^{(2,2)}(n, q, m) &= 2(8n^2 + 2q^2 + 19q + 48). \end{aligned} \quad (30)$$

Соотношения (21)–(27), дополненные полиномами

$$P_2^{(2,0)} = 2[(2n - q)(2n - q + 11) + 24] \quad (31)$$

и

$$P_3^{(1,0)} = \frac{1}{2} [2n^3 + n^2(3q - 58) - 2n(m^2 - 33q + 117) - q^3 + qm^2 - 36q^2 + 75q - 26m^2 - 78], \quad (32)$$

а также указанная выше связь между $b_{ik}^{(1)}$ и $b_{ik}^{(2)}$ полностью определяют аналитические выражения для коэффициентов разложения (14) первого и второго порядков по F . Для определения всех коэффициентов третьего порядка достаточно наряду с (21)–(30) привести выражения полиномов, определяющих коэффициенты $b_{40}^{(3)}$, $b_{30}^{(3)}$, $b_{20}^{(3)}$, $b_{10}^{(3)}$, $b_{21}^{(3)}$, $b_{-2,1}^{(3)}$, согласно (25):

$$\begin{aligned} P_2^{(4,0)}(n, q, m) &= -\frac{1}{3} (24n^2 + 196n - 24nq + 6q^2 - 89q + 340), \\ P_3^{(3,0)}(n, q, m) &= \frac{1}{12} [122n^3 - n^2(201q - 2058) + 2n(48q^2 + 3m^2 - 927q + 4295) - 13q^3 - \\ &\quad - 3qm^2 + 504q^2 + 162m^2 - 3161q + 8718], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P_4^{(2,0)}(n, q, m) &= \frac{1}{96} [777n^4 - 4n^3(3q + 2362) - 6n^2(87q^2 - 2508q + 131m^2 + 16511) - \\
&4n(3q^3 + 2286q^2 - 3qm^2 + 1478m^2 - 18303q + 70638) + \\
&+ 201q^4 + 9m^4 + 2072q^3 - 210q^2m^2 + 2920qm^2 - 18810q^2 - 19738m^2 + 65736q - 162671], \\
P_5^{(1,0)}(n, q, m) &= -\frac{1}{12} [294n^5 - n^4(243q - 928) - n^3(300m^2 + 132q^2 - 340q - 688) + \\
&+ 2n^2(69q^3 + 27qm^2 - 246q^2 - 352m^2 + 249q - 14458) + \\
&+ 2n(27q^4 + 3m^4 - 18q^2m^2 + 2q^3 + 166qm^2 - 864q^2 - 2852m^2 + 2710q - 22131) - \\
&- 39q^5 + 148q^4 + 14q^3(3m^2 + 29) - 2q^2(70m^2 + 892) - q(3m^4 - 5978m^2 - \\
&- 5985) - 32m^4 - 6052m^2 - 11676], \\
P_3^{(2,1)}(n, q, m) &= -\frac{1}{2} [66n^3 - n^2(35q - 358) - 2n(8q^2 + m^2 + 41q - 251) + \\
&+ 9q^3 - qm^2 - 84q^2 - 26m^2 - 11q + 306], \\
R_3^{(2,1)}(n, q, m) &= -\frac{1}{2} [62n^3 - n^2(29q + 230) - 2n(8q^2 - m^2 + 23q - 133) + \\
&+ 7q^3 + qm^2 + 116q^2 + 26m^2 + 395q + 462].
\end{aligned} \tag{33}$$

Все приведенные выше полиномиальные выражения являются квадратичными функциями магнитного квантового числа m , что связано с тем, что векторы напряженности электрического поля и дипольного момента атома являются полярными. Таким образом, поправки к волновой функции не зависят от знака m , как и поправки к энергии. Этим же свойством обладают и поправки к матричным элементам и интенсивности радиационных переходов, к обсуждению которых мы переходим.

3. ДИПОЛЬНЫЙ МАТРИЧНЫЙ ЭЛЕМЕНТ И ИНТЕНСИВНОСТЬ РАДИАЦИОННОГО ПЕРЕХОДА

Матричный элемент для дипольного перехода между штарковскими уровнями атома водорода в однородном электрическом поле \mathbf{F} ,

$$d_{nn'}(F) = \langle \Psi_{n_1 n_2 m} | \mathbf{d} | \Psi_{n'_1 n'_2 m'} \rangle, \tag{34}$$

может быть записан в форме степенного ряда по напряженности поля F с помощью разложения волновых функций (10) начального и конечного состояний. В частности, для третьего порядка имеем

$$\begin{aligned}
d_{n' \leftarrow n}^{(3)} &= \langle \Psi_{n'}^{(0)} | d | \Psi_n^{(3)} \rangle + \langle \Psi_{n'}^{(1)} | d | \Psi_n^{(2)} \rangle + \\
&+ \langle \Psi_{n'}^{(2)} | d | \Psi_n^{(1)} \rangle + \langle \Psi_{n'}^{(3)} | d | \Psi_n^{(0)} \rangle.
\end{aligned} \tag{35}$$

Подставляя сюда разложение (10), получим линейную комбинацию дипольных матричных элементов

с функциями Штурма (3), которые удобно выразить через обобщенные гипергеометрические функции двух переменных [5], преобразуемые в комбинацию гипергеометрических функций Гаусса по аналогии с формулой Гордона для матричного элемента радиационного перехода между штарковскими состояниями [7]. Представим частоту перехода, дипольный матричный элемент и интенсивность в виде рядов:

$$\omega_{nn'}(F) = \omega_{nn'}(0) \left(1 + \sum_{N=1}^{\infty} F^N w_{nn'}^{(N)} \right), \tag{36}$$

$$d_{nn'}(F) = d_{nn'}(0) \left(1 + \sum_{N=1}^{\infty} F^N r_{nn'}^{(N)} \right), \tag{37}$$

$$I_{nn'}(F) = I_{nn'}(0) \left(1 + \sum_{N=1}^{\infty} F^N \beta_{nn'}^{(N)} \right), \tag{38}$$

где величины, соответствующие невозмущенному атому, вынесены за скобки, а коэффициенты разложения представляют собой отношения поправочных слагаемых к невозмущенным. Учитывая, что

$$I_{n,n'} \sim \omega_{nn'}^4 |d_{nn'}|^2, \tag{39}$$

запишем связь между коэффициентами разложения (36)–(38) до третьего порядка включительно:

$$\beta_{nn'}^{(1)} = 4w_{nn'}^{(1)} + 2r_{nn'}^{(1)}, \tag{40}$$

$$\beta_{nn'}^{(2)} = 4w_{nn'}^{(2)} + 6 \left(w_{nn'}^{(1)} \right)^2 + 8w_{nn'}^{(1)}r_{nn'}^{(1)} + \left(r_{nn'}^{(1)} \right)^2 + 2r_{nn'}^{(2)}, \quad (41)$$

$$\beta_{nn'}^{(3)} = 4 \left[w_{nn'}^{(3)} + 3w_{nn'}^{(1)}w_{nn'}^{(2)} + \left(w_{nn'}^{(1)} \right)^3 \right] + 4r_{nn'}^{(1)} \left[2w_{nn'}^{(2)} + 3 \left(w_{nn'}^{(1)} \right)^2 \right] + 4 \left[\left(r_{nn'}^{(1)} \right)^2 + 2r_{nn'}^{(2)} \right] w_{nn'}^{(1)} + 2 \left(r_{nn'}^{(3)} + r_{nn'}^{(1)}r_{nn'}^{(2)} \right). \quad (42)$$

Соотношения симметрии (24) переходят в соотношения симметрии для коэффициентов разложений (37), (38), которые мы будем в дальнейшем называть радиационными восприимчивостями:

$$\begin{aligned} r_{nqm \rightarrow n'q'm'}^{(N)} &= (-1)^N r_{n-qm \rightarrow n'-q'm'}^{(N)}, \\ \beta_{nqm \rightarrow n'q'm'}^{(N)} &= (-1)^N \beta_{n-qm \rightarrow n'-q'm'}^{(N)}. \end{aligned} \quad (43)$$

Обсуждение свойств и численных значений этих величин в первом и втором порядках теории возмущений можно найти в [4, 5]. Здесь мы подробно исследуем восприимчивости третьего и четвертого порядков.

3.1. Радиационные восприимчивости третьего порядка

Поправки высоких порядков имеют особенно важное значение в тех случаях, когда величины

низших порядков обращаются в нуль, в частности, для переходов между бездипольными состояниями ($q = 0, q' = 0$). Симметрия таких переходов оказывается таковой, что для π -излучения невозмущенный дипольный матричный элемент и поправки всех четных порядков к нему равны нулю, а для σ -излучения нулю равны поправки всех нечетных порядков по напряженности поля.

Каждый из 73 отличных от нуля коэффициентов $b_{i_1 i_2}^{(3)}$, описывающих кубичную по F составляющую разложения (10) для волновых функций начального и конечного состояний, в общем случае представляет собой полином от соответствующих параболических квантовых чисел, определяемый одним из выражений (21)–(33). После вычисления интегралов по параболическим переменным в матричных элементах с поправками к волновой функции в (35) получается комбинация выражений с гипергеометрическими функциями, аналогичных формуле Гордона для невозмущенного радиационного матричного элемента [7], но со смещенными относительно параболических квантовых чисел индексами функций Штурма.

Такие выражения существенно упрощаются, когда одно из состояний (как правило, нижнее) имеет нулевые или близкие к нулю параболические квантовые числа. В частности, для серии Лаймана (переходы в основное состояние с $n' = 1, q' = m' = 0$) поправки третьего порядка к дипольному матричному элементу и интенсивности π -излучения имеют вид

$$\begin{aligned} r_{1S \leftarrow n}^{(3)\pi} &= -\frac{n}{384q(n^2 - 1)^3 Z^9} \left[n^2 q^4 (171n^{12} - 2277n^{10} + 1005n^8 + 55801n^6 - \right. \\ &\quad - 17308n^4 + 4752n^2 - 672) - q^2(n^2 - 1)(7587n^{14} - 1353n^{12} - 24815n^{10} - 8571n^8 + 3880n^6 + 53768n^4 - \\ &\quad \left. - 24144n^2 + 432) + n^2(n^2 - 1)^2(1035n^{12} - 3129n^{10} - 1391n^8 - 491n^6 + 4792n^4 - 648n^2 + 216) \right], \quad (44) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \beta_{1S \leftarrow n}^{(3)\pi} &= -\frac{n}{192q(n^2 - 1)^2 Z^9} \left[n^2 q^4 (171n^{10} - 822n^8 + 963n^6 + 472n^4 - 2064n^2 + 1152) - \right. \\ &\quad - q^2(7416n^{14} - 6576n^{12} - 9496n^{10} + 5952n^8 + 2992n^6 + 4864n^4 - 8688n^2 + 3408) + \\ &\quad \left. + n^2(n^2 - 1)(2385n^{12} - 2379n^{10} - 757n^8 - 265n^6 + 4376n^4 - 3024n^2 - 528) \right]. \quad (45) \end{aligned}$$

Электрическое квантовое число q в знаменателе соответствует тому, что матричный элемент и интенсивность нулевого приближения, а также поправки четных порядков пропорциональны этому множителю. Следовательно, в пределе слабого поля лаймановские π_0 -линии, соответствующие переходам из

бездипольных состояний с $q = 0$, исчезают, в то время как поправки нечетных порядков, в частности первого и третьего, отличны от нуля. Эти поправки приводят к появлению π_0 -линий, интенсивность которых пропорциональна квадрату напряженности поля (подробнее см. в п. 3.2). Вклад поправок более

важен для линий с малыми q по сравнению с крайними штарковскими компонентами, соответствующими $q \sim n$. Различна также и асимптотическая зависимость при больших n для центральных,

$$\beta^{(1)\pi}(q \sim 1) \sim 1.5n^5, \quad \beta^{(3)\pi}(q \sim 1) \sim -10n^{13},$$

и крайних,

$$\beta^{(1)\pi}(q \sim n) \sim 1.5n^4, \quad \beta^{(3)\pi}(q \sim n) \sim 20n^{12},$$

штарковских компонент. При этом оценка критического поля, при котором поправка третьего порядка

становится сравнимой с поправкой первого порядка, не превышает оценки для ионизирующего поля, при котором верхний уровень оказывается ниже потенциального барьера, отделяющего внутреннюю область движения с данной энергией от внешней (см., например, [12]). Это означает, что теория возмущений оказывается применимой для всех практически интересных случаев, когда ионизационным распадом верхнего уровня в поле можно пренебречь.

Выражения для поправок к матричным элементам и интенсивностям σ -переходов более компактны:

$$r_{1S \leftarrow n}^{(3)\sigma} = -\frac{nq}{384(n^2-1)^3 Z^9} \left[n^2 q^2 (171n^{12} - 2277n^{10} + 1005n^8 + 55801n^6 - 17308n^4 + 4752n^2 - 672) - (n^2-1)(7371n^{14} + 1998n^{12} - 40445n^{10} + 3156n^8 + 3184n^6 + 53696n^4 - 24144n^2 + 432) \right], \quad (46)$$

$$\beta_{1S \leftarrow n}^{(3)\sigma} = -\frac{nq}{192(n^2-1)^2 Z^9} \left[n^2 q^2 (171n^{10} - 822n^8 + 963n^6 + 472n^4 - 2064n^2 + 1152) - 7371n^{14} + 5550n^{12} + 12589n^{10} - 9408n^8 - 2128n^6 - 4576n^4 + 8688n^2 - 3408 \right]. \quad (47)$$

Эти выражения пропорциональны q и исчезают для центральной штарковской линии ($q = 0$) вместе с остальными поправками нечетных порядков. Сама же линия имеет максимальную интенсивность среди лаймановских σ -компонент, а первая неисчезающая поправка к ней определяется восприимчивостью второго порядка теории возмущений, $\beta_{1S \leftarrow n}^{(2)\sigma}$, асимптотическую зависимость которой от n можно представить в виде [5]

$$\beta^{(2)\sigma}(q = 0) \sim 11.5n^8.$$

Область применимости этой величины можно оценить, рассчитав поправку четвертого порядка.

Аналогичные выражения для других серий выглядят тем более громоздкими, чем больше кратность вырождения нижнего уровня.

3.2. Восприимчивости четвертого порядка

В четвертом порядке теории возмущений линейная комбинация (10) содержит 129 отличных от нуля слагаемых, которые также представляются в виде полиномов от параболических квантовых чисел. Восемь из них уже определены общими соотношениями (21)–(23). Остальные же удовлетворяют соотношениям (25)–(26), при этом число таких коэффициентов и соответствующих им полиномов P_K и R_K возрастает по сравнению с третьим порядком примерно в два раза.

Мы рассчитали все аналитические выражения, определяющие коэффициенты $b_{i_1 i_2}^{(4)}$, имеющие значительно более громоздкий вид, чем приведенные выше для $b_{i_1 i_2}^{(3)}$. Более громоздкими по сравнению с третьим порядком являются и выражения для поправок четвертого порядка к матричному элементу (37) и интен-

сивности (38). В частности, для простейшего случая — серии Лаймана — самое простое выражение для восприимчивости имеет вид

$$\beta_{1S \leftarrow n}^{(4)\sigma} = -\frac{1}{4608(n^2-1)^3 Z^{12}} \left[-3n^4 q^4 (861n^{14} + 903n^{12} - 13137n^{10} + 24021n^8 - 7928n^6 - 34048n^4 + \right. \\ \left. + 44064n^2 - 15840) + 6n^2 q^2 (51657n^{18} - 27079n^{16} - 171975n^{14} + 131355n^{12} + 81290n^{10} - \right. \\ \left. - 20728n^8 - 30272n^6 - 34504n^4 + 15096n^2 + 7128) + 478881n^{22} + 719823n^{20} - 4791577n^{18} + \right. \\ \left. + 5154605n^{16} - 1962964n^{14} + 1895920n^{12} - 2052512n^{10} + 272464n^8 + \right. \\ \left. + 3759648n^6 - 10519344n^4 + 10555920n^2 - 3543264 \right]. \quad (48)$$

Численные значения коэффициентов разложения интенсивности (38) первых четырех порядков по F для переходов серии Лаймана приведены в табл. 1, для серии Бальмера — в табл. 2. Для подавляющего большинства линий поправки $r^{(N)}$ имеют тот же знак и порядок величины, что и соответствующие им $\beta^{(N)}$.

Мы не включили в таблицы переходы $L_\beta(\pi_0)$ и $H_\beta(\pi_0)$, поскольку в нулевом приближении интенсивность этих линий равна нулю и формальные значения коэффициентов разложений (37) и (38) могут оказаться равными бесконечности. Поправки первого и третьего порядков для этих линий отличны от нуля, следовательно, их интенсивности квадратичны по полю (результат возведения в квадрат матричного элемента первого порядка); также квадратичны поправки к этой зависимости, определяемые отношением комбинаций матричных элементов и частот третьего и первого порядков (отношение кубичной и линейной поправок). В частности, общее выражение для поправок к интенсивности «запрещенных» π_0 -линий серии Лаймана, соответствующих переходам $(n00) \rightarrow (100)$, можно записать в виде

$$I^{(3)}/I^{(1)} = -F^2 (2385n^{12} - 2379n^{10} - 757n^8 - 265n^6 + \\ + 4376n^4 - 3024n^2 - 528) \times \\ \times [96Z^6(n^2 - 1)(3n^2 + 1)]^{-1}. \quad (49)$$

Численные значения поправок первого порядка показывают, что интенсивности таких «запрещенных» линий достигают нескольких процентов от интенсивности соответствующих разрешенных линий в поле, напряженность которого составляет половину напряженности ионизирующего поля. При этом поправка третьего порядка не превышает 10% при напряженности, равной напряженности ионизирующего поля.

Для линии $L_\alpha(\pi_2)$ величина $\beta^{(3)}$ оказалась меньше, чем $\beta^{(2)}$, поэтому здесь судить о применимости

низших порядков теории возмущений для этой линии в достаточно сильных полях можно лишь по отношению поправок второго и четвертого порядков, аналогично линиям $L_\alpha(\sigma_0)$ и $L_\gamma(\sigma_0)$, у которых поправки первого и третьего порядков строго равны нулю.

Аномально высокие восприимчивости для $H_\alpha(\pi_8)$ по сравнению с остальными линиями этой серии вызваны малым значением ее интенсивности в пределе слабого поля. Она составляет всего 0.04% от интенсивности наиболее яркой линии данной серии.

Для серии Лаймана поправки второго и четвертого порядков (как для матричных элементов, так и для интенсивности) отрицательны, в то время как поправки первого и третьего порядков носят знакопеременный характер. Следует обратить внимание на общую закономерность для первых исчезающих поправок к интенсивности данной серии: как видно из табл. 1, они положительны для π -переходов и отрицательны для σ -переходов, что соответствует возрастанию в электрическом поле интенсивности π -линий (аналогично росту вероятности оптических переходов из глубоких примесных центров в полупроводниках [13]) и ослаблению σ -линий. Для серии Бальмера такой закономерности нет, и здесь влияние поля на отдельные штарковские компоненты как π -излучения, так и σ -излучения становится селективным. Такая же селективность действия поля на интенсивности линий наблюдается и для других серий излучения и поглощения водородоподобного атома [4, 5].

Как и в расчетах штарковской энергии, для расчета радиационных характеристик по теории возмущений важнейшим является вопрос о сходимости рядов по степеням поля F для матричных элементов дипольных переходов. Анализ полученных выражений и численных результатов для серий Лаймана и Бальмера, а также для некоторых переходов между ридбергов-

Таблица 1. Поправки первых четырех порядков $\beta^{(N)}$ к интенсивностям штарковских линий серии Лаймана

nqt	Линия	$\beta^{(1)}$	$\beta^{(2)}$	$\beta^{(3)}$	$\beta^{(4)}$
210	$L_\alpha(\pi_2)$	4.80(1)	-2.04(3)	4.00(2)	-1.45(7)
201	$L_\alpha(\sigma_0)$	0	-2.93(3)	0	-1.46(7)
320	$L_\beta(\pi_6)$	1.77(2)	-5.91(4)	5.40(6)	-6.91(9)
311	$L_\beta(\sigma_3)$	-6.00	-7.57(4)	7.71(6)	-7.15(9)
430	$L_\gamma(\pi_{12})$	4.99(2)	-6.08(5)	2.37(8)	-6.10(11)
410	$L_\gamma(\pi_4)$	1.56(3)	-2.23(4)	-6.60(8)	-6.78(11)
421	$L_\gamma(\sigma_8)$	-1.60(1)	-7.65(5)	3.45(8)	-6.56(11)
401	$L_\gamma(\sigma_0)$	0	-7.45(5)	0	-5.73(11)

Примечание: число в скобках определяет показатель степени десяти: $a(k) \equiv a \cdot 10^k$.

Таблица 2. Поправки первых четырех порядков $\beta^{(N)}$ к интенсивностям штарковских линий серии Бальмера

nqt	\rightarrow	n'	q'	m'	Линия	$\beta^{(1)}$	$\beta^{(2)}$	$\beta^{(3)}$	$\beta^{(4)}$
320	\rightarrow	2	-1	0	$H_\alpha(\pi_8)$	1.53(3)	9.80(5)	3.63(8)	9.63(11)
320	\rightarrow	2	1	0	$H_\alpha(\pi_4)$	3.80(2)	-1.96(4)	-2.26(6)	-5.38(9)
311	\rightarrow	2	0	1	$H_\alpha(\pi_3)$	2.52(2)	-5.38(4)	-5.60(6)	-5.94(9)
300	\rightarrow	2	-1	0	$H_\alpha(\pi_2)$	1.04(2)	-8.46(4)	-7.08(6)	-6.50(9)
320	\rightarrow	2	0	1	$H_\alpha(\sigma_6)$	8.73(1)	2.48(5)	3.33(7)	1.09(9)
311	\rightarrow	2	-1	0	$H_\alpha(\sigma_5)$	7.56(2)	1.70(5)	1.13(7)	-3.72(9)
311	\rightarrow	2	1	0	$H_\alpha(\sigma_1)$	1.65(2)	-7.01(4)	-1.69(6)	-6.15(9)
300	\rightarrow	2	0	1	$H_\alpha(\sigma_0)$	0	-8.76(4)	0	-6.49(9)
302	\rightarrow	2	0	1	$H_\alpha(\sigma_0)$	0	-6.85(4)	0	-5.77(9)
430	\rightarrow	2	-1	0	$H_\beta(\pi_{14})$	2.44(3)	2.06(6)	1.14(9)	2.85(11)
430	\rightarrow	2	1	0	$H_\beta(\pi_{10})$	8.13(2)	-4.34(5)	1.05(8)	-5.25(11)
421	\rightarrow	2	0	1	$H_\beta(\pi_8)$	4.32(2)	-6.82(5)	8.38(7)	-5.49(11)
410	\rightarrow	2	-1	0	$H_\beta(\pi_6)$	-99.1	-8.86(5)	2.02(8)	-5.64(11)
410	\rightarrow	2	1	0	$H_\beta(\pi_2)$	-3.40(3)	1.42(6)	3.32(9)	-1.81(12)
430	\rightarrow	2	0	1	$H_\beta(\sigma_{12})$	1.54(3)	3.53(5)	9.91(7)	-3.62(11)
421	\rightarrow	2	-1	0	$H_\beta(\sigma_{10})$	1.17(3)	-1.38(5)	-1.68(8)	-4.94(11)
421	\rightarrow	2	1	0	$H_\beta(\sigma_6)$	3.00(2)	-7.39(5)	1.54(8)	-5.70(11)
410	\rightarrow	2	0	1	$H_\beta(\sigma_4)$	-3.84(2)	-8.60(5)	4.03(8)	-6.16(11)
412	\rightarrow	2	0	1	$H_\beta(\sigma_4)$	-1.60(2)	-7.22(5)	2.56(8)	-5.71(11)
401	\rightarrow	2	-1	0	$H_\beta(\sigma_2)$	-9.72(2)	-5.39(5)	5.69(8)	-6.61(11)

Примечание: число в скобках определяет показатель степени десяти: $a(k) \equiv a \cdot 10^k$.

скими состояниями показывает, что члены ряда (37) до четвертого порядка включительно образуют убывающую (по абсолютной величине) последовательность при напряженности поля, не превосходящей некоторой критической напряженности F_{cr} , которая примерно вдвое больше напряженности ионизирующего поля для верхнего уровня. При этом сумма первых членов ряда вплоть до ионизирующего поля практически совпадает с точным значением матричного элемента. В табл. 3 дано сравнение значений квадрата матричного элемента, $|d^{(Int)}(F)|^2$, радиационного π -перехода между нижними штарковскими компонентами ($q = -(n - 1)$, $q' = -(n' - 1)$) ридберговских состояний водорода с $n = 30$, $n' = 10$, полученных численным интегрированием уравнения Шредингера для атома в поле с напряженностью, близкой к ионизирующей [3], с результатами расчетов по теории возмущений первых четырех порядков ($N = 1, 2, 3, 4$). В смежных колонках приведены относительные различия

$$\epsilon_N = \frac{|d^{(N)}(F)|^2 - |d^{(Int)}(F)|^2}{|d^{(Int)}(F)|^2},$$

выраженные в процентах. Как видно из таблицы, результат теории возмущений быстро сходится к точному значению, так что даже в непосредственной близости к ионизирующему полю (в таблице при $F = 700$ В/см) отличие результата четвертого порядка от точного составляет не более 7%. При этом все члены ряда образуют убывающую последовательность с фактором, примерно равным 1/2. С убыванием напряженности скорость сходимости резко возрастает, и отличие от точного значения устремляется к нулю: при $F = 200$ В/см результат теории возмущений четвертого порядка совпадает с результатом численного расчета в пределах используемых для представления данных четырех значащих цифр; при $F = 100$ В/см совпадение наступает уже в третьем порядке теории возмущений.

Аналогичное сравнение мы выполнили и для линии, следующей за крайней, соответствующей переходу из состояния верхнего уровня с $q = -(n - 3)$, невозмущенный матричный элемент для которого примерно вдвое меньше. Здесь расхождение результата теории возмущений с численным интегрированием еще меньше, чем в предыдущем случае. При $F = 700$ В/см для четвертого порядка оно составляет менее 5%.

Результаты экспериментального измерения и численных расчетов отношения вероятностей радиационных переходов между нижними и смежными с ними штарковскими компонентами состояний с

$n' = 10$ и $n = 30$, $n = 44$, полученные в работе [3], полностью согласуются с нашими данными при напряженности поля F , для которой эффекты тонкой структуры несущественны. Поправки высших порядков значительно улучшают согласие с экспериментальными данными, полученное в первом (линейном) приближении, особенно вблизи верхней границы диапазона использованных напряженностей. При этом вклад поправок четвертого и более высоких порядков выходит за рамки точности графического представления численных результатов, приведенного в работе [3], даже для максимального значения F .

Заметим, что изменение как частоты перехода, так и дипольного матричного элемента в поле определяют поправки к интенсивности, но отделить их вклад друг от друга для высших порядков нельзя (см. например, (42)). Тем не менее результаты численных расчетов показывают, что поправки к матричному элементу вносят значительный, а иногда и определяющий вклад в поправку к интенсивности линии. Для переходов из ридберговских состояний с $n \gg 1$ вклад поправок к матричным элементам в соответствующем порядке для интенсивности является основным, как это видно для третьего порядка из (44)–(47) и было также отмечено для первого и второго порядков в [4, 5].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основным результатом данной работы являются соотношения (11)–(14) для коэффициентов разложения (10) в ряд Рэлея–Шредингера волновой функции водородоподобного атома по степеням напряженности однородного электрического поля. Каждый член этого ряда является суперпозицией кулоновских функций Штурма в параболических координатах для уравнения Шредингера для водородоподобного атома.

Индукцированные полем поправки к дипольным матричным элементам и интенсивностям радиационных переходов между штарковскими уровнями представлены в виде асимптотических рядов (37), (38) по напряженности поля F . Для серий Лаймана и Балмера выписаны аналитические выражения и приведены численные значения поправок третьего и четвертого порядков. Эти поправки являются полиномами параболических квантовых чисел верхнего состояния и в ряде случаев могут давать заметный вклад в матричный элемент радиационного перехода вблизи порога ионизации.

Таблица 3. Значения квадратов зависящих от поля матричных элементов радиационного перехода между ридберговскими состояниями $(30, -29, 0)$ и $(10, -9, 0)$, полученные численным интегрированием уравнения Шредингера, $|d^{(Int)}(F)|^2$ [3], и рассчитанные в N -м порядке теории возмущений ($N = 1, 2, 3, 4$). Относительные различия ϵ_N даны в процентах

F , В/см	$ d^{(Int)}(F) ^2$	$ d^{(N)}(F) ^2$							
		$N = 1$	$\epsilon_1, \%$	$N = 2$	$\epsilon_2, \%$	$N = 3$	$\epsilon_3, \%$	$N = 4$	$\epsilon_4, \%$
100	0.2901	0.2908	0.24	0.2901	0	0.2901	0	0.2901	0
200	0.2821	0.2851	1.06	0.2824	0.11	0.2822	0.04	0.2821	0
300	0.2722	0.2795	2.68	0.2734	0.44	0.2725	0.11	0.2723	0.04
400	0.2598	0.2738	5.39	0.2630	1.23	0.2609	0.42	0.2603	0.19
500	0.2442	0.2682	9.83	0.2513	2.91	0.2472	1.23	0.2455	0.53
600	0.2235	0.2626	17.49	0.2382	6.58	0.2312	3.45	0.2277	1.88
700	0.1937	0.2569	32.63	0.2237	15.49	0.2126	9.76	0.2062	6.45

Несмотря на то что ряды теории возмущений для эффекта Штарка на атомах являются асимптотическими [1, 2, 6, 12], полученные данные для матричных элементов и интенсивностей серий Лаймана и Бальмера не дают этому факту систематического подтверждения, поскольку для большинства радиационных переходов как π -, так и σ -поляризации мы имеем

$$\frac{r_{ngm \rightarrow n'q'm'}^{(3)}}{r_{ngm \rightarrow n'q'm'}^{(2)}} \sim \frac{r_{ngm \rightarrow n'q'm'}^{(2)}}{r_{ngm \rightarrow n'q'm'}^{(1)}}, \quad (50)$$

$$\frac{\beta_{ngm \rightarrow n'q'm'}^{(3)}}{\beta_{ngm \rightarrow n'q'm'}^{(2)}} \sim \frac{\beta_{ngm \rightarrow n'q'm'}^{(2)}}{\beta_{ngm \rightarrow n'q'm'}^{(1)}}$$

а отличия от этих соотношений на порядок встречаются с одинаковой частотой в одну и другую сторону.

Третьего порядка во многих случаях оказывается достаточно для определения применимости теории возмущений. Однако если поправки первого и третьего порядков равны нулю (например, для σ -переходов между бездипольными состояниями), то для анализа сходимости ряда теории возмущений требуется четвертый порядок.

Проведенные здесь расчеты важны не только с академической точки зрения, но могут быть использованы и для практики. В частности, количественные данные для изменения интенсивности линий в однородном электрическом поле могут быть использованы для определения постоянной компоненты поля в плазме. Предложенный здесь метод расчета поправок высших порядков теории возмущений для штарковских состояний допускает

обобщение на случай взаимодействия атома с заряженной частицей или с системой частиц, когда малым параметром для теории возмущений будет величина, обратная расстоянию от ядра атома до частицы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования РФ (грант 97-0-5.1-63) и INTAS (грант 97-0369).

ЛИТЕРАТУРА

1. N. Høe, B. d'Elat, and G. Couland, Phys. Lett. A **85**, 327 (1981).
2. Р. Д. Дамбург, В. В. Колосов, в сб. *Ридберговские состояния атомов и молекул*, под ред. Р. Ф. Стеббинга и Ф. Б. Даннинга, Мир, Москва (1983), с. 42.
3. M. Bellerma, T. Bergeman, A. Haffmans, P. M. Koch, and L. Sirko, Phys. Rev. A **46**, 5836 (1992).
4. A. A. Kamenski and V. D. Ovsiannikov, J. Phys. B **33**, 491 (2000).
5. A. A. Kamenski and V. D. Ovsiannikov, J. Phys. B **33**, 5543 (2000).
6. С. П. Аллилуев, И. А. Малкин, ЖЭТФ **66**, 1283 (1974).
7. Г. Беге, Э. Сопитер, *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами*, Физматгиз, Москва (1960).
8. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц *Квантовая механика*, Наука, Москва (1974).

9. Н. Л. Манаков, Л. П. Рапопорт, *Опт. и спектр.* **33**, 988 (1972).
10. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции. Функции Бесселя, функции параболического цилиндра, ортогональные многочлены*, Наука, Москва (1966).
11. V. D. Ovsiannikov and S. V. Goossev, *Phys. Scripta* **57**, 506 (1998).
12. Л. А. Буреева, В. С. Лисица, *Возмущенный атом*, ИздАТ, Москва (1997).
13. С. В. Булярский, Н. С. Грушко, А. В. Жуков, *ЖЭТФ* **118**, 1092 (2000).