

МЕТОД РАСЧЕТА НАДПОРОГОВЫХ МНОГОФОТОННЫХ ПРОЦЕССОВ В АТОМАХ: ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ АТОМОВ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ И БЛАГОРОДНЫХ ГАЗОВ

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

*Воронежский государственный университет
394006, Воронеж, Россия*

Поступила в редакцию 11 апреля 2007 г.

В рамках метода модельного потенциала развита техника расчета надпороговых связанно-связанных переходов оптического электрона атома, основанная на использовании обобщенного штурмовского разложения функции Грина для потенциала с кулоновской асимптотикой. Рассчитаны динамические поляризуемости атомов щелочных металлов и благородных газов в области частот, превышающих порог ионизации.

PACS: 32.10.Dk, 32.80.Fb

1. ВВЕДЕНИЕ

Динамическая поляризуемость $\alpha(\omega)$ определяет линейный отклик квантовой системы на монохроматическое возмущение частоты ω . Она является одной из основных оптических характеристик атома и определяет наведенный внешним полем дипольный момент атома, сечение упругого (без изменения частоты) рассеяния света атомом, а также линейные по интенсивности световой волны сдвиг, расщепление и ионизационное уширение атомных уровней световым полем. Для газовой среды поляризуемость $\alpha(\omega)$ определяет диэлектрическую проницаемость и коэффициент преломления среды, а ее значения при мнимых частотах ($\alpha(i\omega)$) входят в выражения для постоянных межатомного (ван-дер-ваальсова) взаимодействия. В настоящее время задача расчета тензора динамической поляризуемости полностью решена лишь для атома водорода. Компактное аналитическое выражение для поляризуемости основного состояния было получено в работе [1] (см. также [2]), а его обобщение на случай произвольных состояний — в работах [3] (только для скалярной части $\alpha(\omega)$) и [4].

Методы расчета атомных поляризуемостей можно разделить на многочастичные и одночастичные.

В многочастичных расчетах, проводимых *ab initio*, в большинстве случаев используют хартри-фоковский подход и его модификации, позволяющие более точно учесть межэлектронное (корреляционное) взаимодействие при вычислении волновых функций и дипольных матричных элементов. В последние годы был предложен ряд таких подходов. Так, в работе [5] для расчета поляризуемости атома кислорода использовался многоконфигурационный метод Хартри–Фока. Хорошие результаты дает нерелятивистское и релятивистское «одинарно-двойное приближение» (single-double approximation) в рамках метода Хартри–Фока [6]. Этот подход использовался в работе [6] для расчета спектроскопических характеристик атома рубидия, а в работе [7] — цезия и франция, но уже с более точным учетом межэлектронного взаимодействия. В работе [8] постоянные ван-дер-ваальсова взаимодействия атомов щелочных металлов с атомами гелия рассчитывались с учетом поляризации атомного остова в рамках хартри-фоковского метода и приближения случайных фаз. Следует иметь в виду, что, несмотря на достаточно детальное развитие, многочастичные методы не позволяют с высокой точностью вычислять волновые функции высоковозбужденных уровней. Поэтому при расчете поляризуемостей приходится ограничиваться учетом конечного числа членов в сумме по промежуточным состояниям, пренебрегая вкладом

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

непрерывного спектра, или рассчитывать поляризуемость, вычисляя линейный отклик атома на внешнее возмущение путем прямого численного интегрирования уравнения Шредингера, добавляя оператор возмущения к гамильтониану атома. Кроме того, использование указанных методов существенно усложняется для «надпороговых» частот, $\hbar\omega > |E_n|$ (где E_n — энергия рассматриваемого атомного уровня), при которых у поляризуемости появляется мнимая часть, связанная с сечением фотоионизации, а пренебрежение вкладом непрерывного спектра становится некорректным.

В одночастичных методах расчета поляризуемостей, которые развиваются с середины 1950-х г.г. (см. обзор [10]), принимаются во внимание только переходы оптического электрона в поле атомного остова с кулоновской асимптотикой на далеких расстояниях. Учет многоэлектронных эффектов в этих методах осуществляется косвенно, например, через эмпирические значения энергии атомных уровней. Конкретные расчеты в одночастичном приближении основаны или на неявном суммировании по промежуточным состояниям путем решения неоднородного уравнения Шредингера для поправки к волновой функции в первом порядке теории возмущений [10–12], или на использовании явных полуэмпирических выражений для функции Грина оптического электрона атома. Второй подход реализуется в методе квантового дефекта [13] и методе модельного потенциала (ММП) Фьюса [14], причем в последнем случае удается существенно продвинуться в аналитических вычислениях и представить поляризуемость в виде однократного ряда гипергеометрических функций. Одночастичные методы не только технически значительно проще многочастичных, но и позволяют последовательно провести суммирование по промежуточным состояниям дискретного и непрерывного спектров при вычислении линейных и нелинейных восприимчивостей. Не претендуя на прецизионную точность, одночастичные методы позволяют сравнительно просто выполнить расчеты в широком интервале параметров задачи, а полученные результаты имеют приемлемую точность для использования в различных приложениях, не требующих прецизионных данных. Использование и развитие одночастичных методов продолжается и в настоящее время. В частности, в работе [15] в рамках теории квантового дефекта предложена уточняющая процедура, основанная на замене волновых функций основного и нескольких возбужденных состояний в функции Грина на более точные волновые функции из *ab initio* расчетов. Использование ука-

занной процедуры для расчета поляризуемостей ряда атомов на частотах до первого резонанса [15, 16] показывает хорошее согласие как с результатами более точных расчетов, так и с экспериментальными данными.

В настоящей статье предложена модификация удобного в техническом отношении ММП Фьюса, позволяющая распространить область его применения на расчеты надпороговых процессов. Как известно, использование ММП позволяет аналитически выполнить наиболее трудоемкую часть расчетов амплитуд многофотонных переходов — интегрирование по радиальным переменным — и выразить радиальные матричные элементы через ряды гипергеометрических функций. Однако эти ряды сходятся только при подпороговых (отрицательных) энергиях функций Грина, а при надпороговых (положительных) энергиях оказываются расходящимися. Между тем, атомные параметры, описывающие многофотонные процессы в надпороговой области частот, представляют интерес в связи с использованием в современных экспериментах с атомарными газами излучения высоких (вплоть до 27-й) гармоник лазеров оптического диапазона (см., например, [17]) и ультрафиолетового излучения лазеров на свободных электронах [18], а также развитием методов нелинейной лазерной спектроскопии высоковозбужденных атомных уровней (для которых уже частоты оптических лазеров соответствуют надпороговой области).

В разд. 2 вводится обобщенное штурмовское разложение для функции Грина уравнения Шредингера с потенциалом Фьюса, которое дает возможность суммировать ряды для матричных элементов многофотонных переходов при надпороговых энергиях промежуточных состояний, и обсуждается техника расчетов с ним. В разд. 3 рассматривается точность предлагаемого метода расчета надпороговых процессов и приводятся результаты численных расчетов динамической поляризуемости атомов щелочных металлов и благородных газов в надпороговой области частот. В Приложение вынесены детали техники расчетов.

2. ОБОБЩЕННЫЕ ШТУРМОВСКИЕ РАЗЛОЖЕНИЯ ФУНКЦИИ ГРИНА ДЛЯ ПОТЕНЦИАЛА ФЬЮСА И РАДИАЛЬНЫХ МАТРИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

В нерелятивистском одноэлектронном приближении (т. е. без учета тонкой структуры уровней) тензор поляризуемости атома с валентным электроном

в состоянии $|nlm\rangle$ (n, l, m — главное, орбитальное и магнитное квантовые числа) выражается через следующие радиальные матричные элементы (в статье используются атомные единицы) от радиальной части $g_L(E; r, r')$ функции Грина валентного электрона:

$$\mathcal{M}_{nl}^{l\pm 1}(\omega) = \langle nl | r g_{l\pm 1}(E_n + \omega; r, r') r' | nl \rangle. \quad (1)$$

Вводя обозначение

$$\rho_L^{(\pm)}(\omega) = \mathcal{M}_{nl}^L(\omega) \pm \mathcal{M}_{nl}^L(-\omega), \quad (2)$$

скалярную (α_{nl}^s), векторную (или антисимметричную, α_{nl}^v) и тензорную (или симметричную, α_{nl}^t) поляризуемости можно записать в виде

$$\begin{aligned} \alpha_{nl}^s(\omega) &= \frac{1}{3(2l+1)} \left[(l+1)\rho_{l+1}^{(+)}(\omega) + l\rho_{l-1}^{(+)}(\omega) \right], \\ \alpha_{nl}^v(\omega) &= \frac{l}{(2l+1)} \left[\rho_{l-1}^{(-)}(\omega) - \rho_{l+1}^{(-)}(\omega) \right], \\ \alpha_{nl}^t(\omega) &= -\frac{l}{3(2l+1)(2l+3)} \times \\ &\times \left[(2l-1)\rho_{l+1}^{(+)}(\omega) + (2l+3)\rho_{l-1}^{(+)}(\omega) \right]. \end{aligned} \quad (3)$$

Напомним, что инвариантные параметры $\alpha^{s,v,t}$ полностью определяют декартов тензор поляризуемости $\alpha_{ik}(\omega)$, см. [19], который для состояний с нулевым полным угловым моментом атома сводится к скаляру α^s : $\alpha_{ik}(\omega) = \alpha^s(\omega) \delta_{ik}$.

Основное достоинство ММП состоит в возможности получить простые аналитические выражения для волновой функции $|nl\rangle = R_{nl}(r)$ и функции Грина $g_L(E; r, r')$ валентного электрона [20–22]. Потенциал (точнее, псевдопотенциал ввиду его нелокальности) Фьюса V_F для валентного электрона атома получается добавлением к экранированному кулоновскому потенциалу ядра, $-Z/r$ ($Z = 1$ для валентного электрона в нейтральном атоме), операторного слагаемого

$$V_F = -\frac{Z}{r} + \sum_{l=0}^{\infty} \frac{B_l}{r^2} \hat{P}_l, \quad (4)$$

где \hat{P}_l — оператор проектирования на подпространство сферических функций с данным l ($\hat{P}_l Y_{lm} = \delta_{ll'} Y_{lm}$), а B_l — эмпирические параметры, снимающие «случайное» вырождение энергетических уровней по орбитальному моменту в кулоновской задаче. Радиальное уравнение Шредингера с потенциалом Фьюса получается из кулоновского заменой центростремительного потенциала:

$$\frac{l(l+1)}{2r^2} \rightarrow \frac{l(l+1) + 2B_l}{2r^2} \equiv \frac{\lambda_l(\lambda_l + 1)}{2r^2},$$

или, что то же самое, заменой орбитального квантового числа l на нецелый «орбитальный параметр»

$$\lambda_l = [(l + 1/2)^2 + 2B_l]^{1/2} - 1/2.$$

Аналогично, заменой $l \rightarrow \lambda_l$ получаются радиальные волновые функции состояний $|nl\rangle$ из кулоновских функций:

$$R_{nl}(r) = \frac{2Z^{3/2}}{\nu_{nl}^2} \left[\frac{n_r!}{\Gamma(n_r + 2\lambda_l + 2)} \right]^{1/2} \times \rho^{\lambda_l} e^{-\rho/2} L_{n_r}^{2\lambda_l+1}(\rho), \quad (5)$$

где $\rho = 2r/\nu_{nl}$, $\nu_{nl} = 1/\sqrt{-2E_{nl}}$, $n_r = n - l - 1 = 0, 1, \dots$ — радиальное квантовое число, $\Gamma(x)$ — гамма-функция, L_k^α — обобщенный полином Лагерра [23].

Использование ММП Фьюса в практических задачах требует знания энергий E_{nl} связанных состояний валентного электрона (например, из экспериментально полученного оптического спектра одноэлектронных возбуждений атома). В свою очередь, выражение для энергии связанных состояний (5) в потенциале Фьюса,

$$E_{nl} = -\frac{Z^2}{2(n_r + \lambda_l + 1)^2}, \quad (6)$$

используется для задания эмпирических параметров $\lambda_l = \lambda_l(E_{nl})$ для каждой серии уровней с заданным l через соответствующие экспериментальные энергии:

$$\lambda_l(E_{nl}) = \frac{Z}{\sqrt{-2E_{nl}}} - n_r - 1. \quad (7)$$

Эта процедура полностью аналогична ситуации в методе квантового дефекта [13], в котором экспериментальный спектр также параметризуется формулой типа (6) путем введения квантового дефекта $\mu_l(E_{nl})$, который связан с параметром $\lambda_l(E_{nl})$ соотношением $\mu_l(E_{nl}) = l - \lambda_l(E_{nl})$.

Аналогично радиальным волновым функциям (5) из известного штурмовского разложения кулоновской функции Грина (см., например, [21]) заменой l на λ_l можно получить функцию Грина валентного электрона в модельном потенциале Фьюса [20]:

$$g_l(E; r, r') = \nu \sum_{k=0}^{\infty} \frac{k! S_{kl}(2r/\nu) S_{kl}(2r'/\nu)}{\Gamma(k + 2\lambda_l + 2)(k + \lambda_l + 1 - Z\nu)}, \quad (8)$$

где

$$S_{kl} \left(\frac{2r}{\nu} \right) = \frac{2}{\nu} \left(\frac{2r}{\nu} \right)^{\lambda_l} \exp \left(-\frac{r}{\nu} \right) L_k^{2\lambda_l+1} \left(\frac{2r}{\nu} \right) \quad (9)$$

— штурмовские функции, $\nu = 1/\sqrt{-2(E+i0)}$. Как видно из формулы (8), функция Грина имеет полюсы при значениях энергии E , для которых выполняется равенство

$$k + \lambda_l + 1 - Z/\sqrt{-2E} = 0.$$

Эти полюсы соответствуют резонансам на уровнях энергии дискретного спектра, возникающим при совпадении энергетического параметра E функции Грина с энергией атомных уровней. Поскольку согласно общей теории полюсное (при $E \rightarrow E_{nl}$) слагаемое функции Грина имеет вид

$$\frac{R_{nl}(r)R_{nl}(r')}{E - E_{nl}}, \quad (10)$$

параметр λ_l в выражении (8) должен рассматриваться как (вообще говоря, комплексная) функция энергии ($\lambda_l = \lambda_l(E)$), удовлетворяющая соотношению (7) при $E = E_{nl}$. (Фактически, соотношение (7) определяет значения $\lambda_l(E_{nl})$ на бесконечной последовательности точек E_{nl} вещественной оси E с точкой сгущения $E = 0$ ($n \rightarrow \infty$) и задает аналитическую функцию $\lambda_l(E)$ на плоскости комплексной энергии (с точностью до целой функции)). Для значений энергии между полюсами функция $\lambda_l(E)$ определяется путем интерполяции по экспериментальному спектру атома (см. (7)), причем, согласно (10), интерполированная функция $\lambda_l(E)$ при значениях E , близких к E_{nl} , должна быть такой, чтобы выполнялось соотношение

$$\lambda_l(E) - \lambda_l(E_{nl}) \sim O((E - E_{nl})^2). \quad (11)$$

В остальном, как показывают расчеты, конкретный способ интерполяции не играет существенной роли. Описанные свойства функции $\lambda_l(E)$ аналогичны свойствам функции $\mu_l(E)$, входящей в функцию Грина валентного электрона в теории квантового дефекта [15, 24].

Наличие явных выражений (5) и (8) для волновых функций и функции Грина позволяет аналитически выполнить радиальные интегрирования в матричных элементах высших порядков теории возмущений типа (1) и представить $\mathcal{M}_{nl}^{\pm 1}$ в виде ряда гипергеометрических полиномов (подробнее см. [20–22]). Однако, как показано в Приложении, область сходимости получаемых рядов ограничена

неравенством $E_n + \omega < 0$, так что при частотах, превышающих порог ионизации, эти ряды и, соответственно, атомные поляризуемости с помощью штурмовского разложения (8) вычислить не удастся. Аналогичная проблема при расчете амплитуд многофотонных переходов в атоме водорода была решена в работе [4] путем специального преобразования штурмовского разложения кулоновской функции Грина, позволяющего обеспечить сходимость штурмовских рядов для матричных элементов при положительной энергии функции Грина. Аналогичным образом можно трансформировать представление (8) функции Грина для модельного потенциала.

Идея соответствующего преобразования состоит в использовании полноты системы штурмовских функций (9). Разлагая $S_{kl}(2r/\nu)$ в выражении (8) в ряд по функциям Штурма с аргументом $2r/\alpha$, где α — произвольный (масштабирующий) параметр,

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

и аналогично для $S_{kl}(2r'/\nu)$, получим для функции Грина представление в виде двойного ряда:

$$g_l(E; r, r') = \sum_{k, k'=0}^{\infty} g_{kk'}^l(\nu; \alpha, \alpha') S_{kl} \left(\frac{2r}{\alpha} \right) S_{k'l} \left(\frac{2r'}{\alpha'} \right). \quad (12)$$

Свободные (комплексные) параметры α, α' в этом разложении можно выбирать в зависимости от условий конкретной задачи. Для коэффициентов $g_{kk'}^l$ разложения (12) в работе [4] найдены замкнутые аналитические выражения через комбинации гипергеометрических функций. При одинаковых параметрах $\alpha' = \alpha$ (а именно этот случай в силу симметрии матричного элемента (1) интересен в нашей задаче) выражение для «ядра» $g_{kk'}^l$ функции Грина $g_l(E; r, r')$ имеет достаточно простой вид:

$$g_{kk'}^l(\nu; \alpha, \alpha) = \frac{\nu}{\Gamma(2\lambda_l + 2)} \left(\frac{\alpha - \nu}{\alpha + \nu} \right)^{k_{<}} \times \\ \times {}_2F_1(-k_{<}, \lambda_l + 1 - \eta; 2\lambda_l + 2; z) \times \\ \times \left(\frac{\alpha^2 - \nu^2}{4\alpha\nu} \right)^{k_{>}} \times \\ \times \frac{k_{>}! {}_2F_1(k_{>} + 1, k_{>} + 2\lambda_l + 2; k_{>} + \lambda_l + 2 - \eta; z^{-1})}{(\lambda_l + 1 - \eta)_{k_{>}+1}}, \quad (13)$$

где

$$k_{<} = \min\{k, k'\}, \quad k_{>} = \max\{k, k'\}, \quad \eta = Z\nu,$$

$$z = -\frac{4\alpha\nu}{(\alpha - \nu)^2}, \quad (a)_n = \frac{\Gamma(n + a)}{\Gamma(a)}.$$

Укажем, что гипергеометрическая функция ${}_2F_1$ в (13), содержащая $k_<$, есть полином степени $k_<$, в то время как вторая функция ${}_2F_1$ представляет собой полный гипергеометрический ряд Гаусса [25]. Нетрудно проверить, что при $\alpha = \nu$ разложение (12) с ядром (13) переходит в стандартный штурмовский ряд (8).

Хотя расчет матричных элементов (1) при $E_n + \omega > 0$ с функцией Грина (12) приводит к двойному ряду для $M_{nl}^L(\omega)$ (см. Приложение, формула (15)), наличие в нем свободного параметра α открывает новые возможности для вычислений. В частности, в кулоновской задаче благодаря целочисленности λ_l ($\lambda_l = l$) выбором α удается оборвать оба ряда в выражении (15) для $M_{nl}^L(\omega)$, используя свойство ортогональности полиномов Лагерра, и получить для поляризуемости замкнутое аналитическое выражение для произвольного состояния $|nlm\rangle$ [4]. При нецелых λ_l условием ортогональности воспользоваться нельзя, поэтому столь радикальных упрощений при использовании разложения (12) не происходит. Однако, как показано в Приложении, существует область значений α , при которых двойной ряд для $M_{nl}^L(\omega)$ быстро сходится (даже быстрее, чем обычный штурмовский ряд для поляризуемости при подпороговых частотах $E_n + \omega < 0$) и может быть легко вычислен компьютерными средствами.

3. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

С использованием обобщенного штурмовского разложения функции Грина (12) были проведены расчеты динамических поляризуемостей основных состояний атомов щелочных металлов и благородных газов. Для рассматриваемых состояний лишь скалярная часть тензора поляризуемости отлична от нуля и определяется скалярной поляризуемостью $\alpha^s(\omega)$. Валентный электрон щелочных атомов в основном состоянии имеет нулевой орбитальный момент $l = 0$, так что в пренебрежении тонкой структурой $\alpha^s(\omega)$ вычисляется непосредственно по формуле (3). (Учет тонкой структуры в ММП не приводит к усложнениям и сводится к замене в матричных элементах (1) функции Грина $g_l(E)$ на

$$\frac{1}{3}g_{l,j=l-1/2}(E) + \frac{2}{3}g_{l,j=l+1/2}(E)$$

и выбору параметров $\lambda_{lj}(E)$ с учетом тонкого расщепления уровней.) Как известно, в атомах благородных газов (кроме гелия) для основного и возбужденных состояний реализуются разные схемы связи угловых моментов, что делает расчеты более громоздкими. Как и в работе [26], мы представляем волновую функцию основного состояния валентных электронов атомов Ne, Ar, Kr, Xe с орбитальным моментом $l = 1$ в виде суперпозиции функций с полными моментами $j = 1/2$ и $j = 3/2$ и в конечном счете выражение для скалярной поляризуемости α^s сводится к комбинации радиальных матричных элементов типа $\rho_L^{(+)}(\omega)$, определяемых формулой (2). Кроме того, рассчитанные указанным образом одноэлектронные поляризуемости умножаются на число N эквивалентных электронов в полностью заполненной валентной оболочке атомов благородных газов ($N = 2$ для гелия и $N = 6$ для остальных атомов). Для всех атомов используются известные справочные данные [27] для одноэлектронных энергий основных и возбужденных состояний. Параметр $\lambda_L(E)$ в функциях Грина (12), (13) в области энергий $E_{n_0L} \leq E < 0$ (где E_{n_0L} — энергия низшего возбужденного состояния с орбитальным моментом L) определяется интерполяцией по известным данным [27] для энергий $E_{n'L} < E$ и $E_{n'L} > E$ ближайших связанных состояний $|n'L\rangle$ в соответствии с (11). (Как показывают расчеты, численные результаты слабо зависят от числа учитываемых состояний $|n'L\rangle$ и конкретного способа интерполяции.) Для $E < E_{n_0L}$ параметр $\lambda_L(E)$ полагается равным $\lambda_L(E_{n_0L})$, а при $E > 0$ — его значению, усредненному по величине $\lambda_L(E_{n'L})$ для высоковозбужденных состояний $|n'L\rangle$ с известными энергиями $E_{n'L}$. Как указано в работах [20, 26], поляризуемости основных состояний атомов щелочных металлов оказываются наиболее точными, если состояние валентного s -электрона описывается волновыми функциями в методе квантового дефекта [28], однако наш анализ показал, что это справедливо лишь при $\omega = 0$ и в области подпороговых частот, а в надпороговой области необходим самосогласованный подход с использованием как функции Грина, так и волновых функций для модельного потенциала Фьюса.

Рассчитанные описанным выше способом поляризуемости основных состояний благородных газов и атомов щелочных металлов при подпороговых частотах ($\omega < |E_{nl}|$) и статические поляризуемости $\alpha(0)$ совпадают с данными работ [20, 26], тоже рассчитанными с функцией Грина модельного потенциала Фьюса, но с использованием стандартного штурмовского разложения (8). В работах [20, 26]

Таблица 1. Надпороговая динамическая поляризуемость и сечение фотоионизации атома гелия

ω , эВ	$\alpha(\omega)$ [30], ат. ед.	$\alpha_{MPF}(\omega)$, ат. ед.	$\alpha_{cont}(\omega)$, ат. ед.	$\alpha_{ds}(\omega)$, ат. ед.	$\sigma_{MPF}(\omega)$, 10^{-18} см ²	$\sigma_{exp}(\omega)$ [31], 10^{-18} см ²
27	$-0.570 + i2.520$	$-0.69 + i2.73$	$0.82 + i2.73$	-1.51	6.94	6.40
30	$-0.758 + i1.911$	$-0.89 + i2.04$	$-0.04 + i2.04$	-0.85	5.76	5.38
35	$-0.809 + i1.242$	$-0.92 + i1.30$	$-0.45 + i1.30$	-0.47	4.30	4.09
40	$-0.739 + i0.843$	$-0.82 + i0.87$	$-0.51 + i0.87$	-0.31	3.28	3.16
45	$-0.645 + i0.594$	$-0.71 + i0.60$	$-0.48 + i0.60$	-0.23	2.56	2.48
50	$-0.555 + i0.433$	$-0.61 + i0.43$	$-0.44 + i0.43$	-0.17	2.05	2.02
55	$-0.473 + i0.326$	$-0.52 + i0.32$	$-0.38 + i0.32$	-0.14	1.66	1.67
58	$-0.426 + i0.288$	$-0.47 + i0.27$	$-0.35 + i0.27$	-0.12	1.48	1.58

Примечание. $\alpha_{MPF}(\omega)$ — результаты настоящей работы; $\alpha_{ds}(\omega)$ и $\alpha_{cont}(\omega)$ — вклады состояний дискретного и непрерывного спектров в $\alpha_{MPF}(\omega)$.

также показано, что статические поляризуемости в приближении потенциала Фьюса достаточно хорошо описывают экспериментальные данные, и приводится сравнение с результатами других авторов. В работах [29] на основе потенциала Фьюса рассчитаны статические поляризуемости и гиперполяризуемости возбужденных состояний атома гелия, хорошо согласующиеся с результатами более точных расчетов. Отметим, что при использовании обобщенного штурмовского разложения функции Грина (12) для подпороговых частот относительная точность расчета рядов (15) порядка 10^{-3} достигается при $k \approx 10$, $k' \approx k+5$. Детальное сравнение частотной зависимости надпороговых поляризуемостей различных атомов, вычисленных методом модельного потенциала, с данными, полученными из более точных расчетов, не представляется возможным, поскольку, как отмечалось во Введении, многоэлектронные расчеты поляризуемостей в области надпороговых частот затруднительны и известные нам данные весьма ограничены. По-видимому, наиболее точные расчеты надпороговой поляризуемости в достаточно широком интервале частот выполнены в работе [30] для атома гелия путем численного решения неоднородного двухэлектронного уравнения Шредингера для поправочной функции первого порядка теории возмущений с использованием метода комплексного вращения координат для учета эффектов непрерывного спектра. В табл. 1 дается сравнение результатов работы [30] с нашими результатами. Как уже отмечалось, при надпороговых частотах поляризуемость имеет мнимую часть, которая определяется вкладом непрерывного спектра в $\alpha(\omega)$ и теряет-

ся при учете лишь суммы по дискретному спектру в расчетах надпороговых поляризуемостей (см., например, [6]). Мнимая часть скалярной поляризуемости связана с сечением фотоионизации $\sigma_n(\omega)$ состояния $|n\rangle$ согласно оптической теореме:

$$\sigma_n(\omega) = \frac{4\pi\omega}{c} \text{Im} \alpha_n^s(\omega). \quad (14)$$

Обратим внимание, что величина $\text{Im} \alpha(\omega)$ может быть вычислена и независимо от расчета самой поляризуемости $\alpha(\omega)$ с помощью известного соотношения:

$$\text{Im} \langle nl | r g_{l\pm 1}(E_n + \omega; r, r') r' | nl \rangle = \pi |\langle E_n + \omega, l \pm 1 | r | nl \rangle|^2,$$

которое использовалось для дополнительного контроля точности в наших численных расчетах $\alpha(\omega)$ путем суммирования рядов (15). Для оценки вклада состояний дискретного и непрерывного спектров в $\text{Re} \alpha(\omega)$ в табл. 1 приведен вклад $\alpha_{ds}(\omega)$ состояний дискретного спектра в $\alpha_{MPF}(\omega)$ (полученный прямым суммированием вклада np^1P -состояний гелия с $n = 2-19$) и $\alpha_{cont}(\omega) = \alpha_{MPF}(\omega) - \alpha_{ds}(\omega)$. Как видно, для атома гелия вклад дискретного спектра является определяющим лишь вблизи порога (при малых энергиях фотоэлектрона $E = \omega - |E_{1s}|$, $E_{1s} = 24.58$ эВ), а затем монотонно убывает и составляет менее 30% при $E \approx |E_{1s}|$. (Отметим, что в атомах щелочных металлов вклад непрерывного спектра в $\text{Re} \alpha(\omega)$ оказывается незначительным во всей области частот [6].)

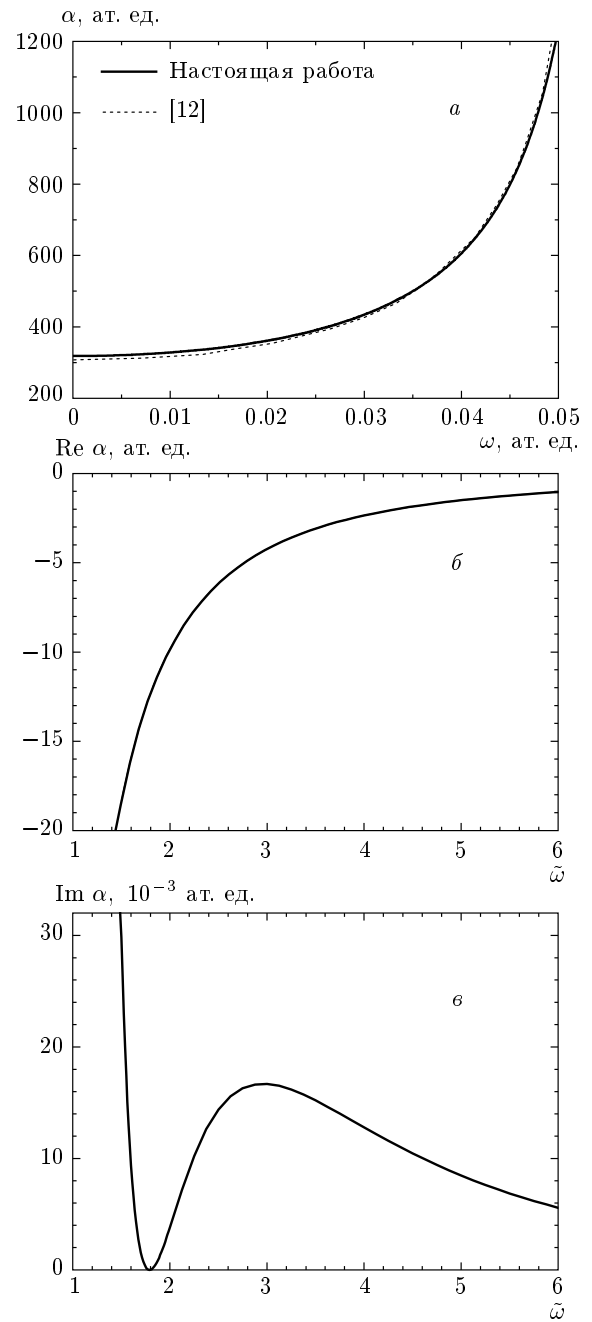
Таблица 2. Частоты ω_c , соответствующие куперовским минимумам в сечениях фотоионизации $\sigma(\omega)$ щелочных атомов

Атом	ω_c , ат. ед.				
	MPF	DHF(1)	DHF(v)	RRPA	Эксп.
Na	0.304	0.230	0.223	0.216	0.237
K	0.243	0.192	0.176		0.167
Rb	0.270	0.251	0.202	0.166	0.183
Cs	0.266	0.356	0.204	0.150	0.172

Примечание. MPF — модельный потенциал Фьюса, (4); DHF(1) — метод Дирака-Хартри-Фока в калибровке длины [35]; DHF(v) — метод Дирака-Хартри-Фока в калибровке скорости [35]; RRPA — релятивистское приближение случайных фаз [35]; Эксп. — экспериментальные данные [36].

Поскольку в наших расчетах величины $\text{Re } \alpha(\omega)$ и $\text{Im } \alpha(\omega)$ вычисляются единообразно, как вещественная и мнимая части аналитической функции $\alpha(\omega)$, в качестве критерия, который позволяет судить о применимости метода модельного потенциала для количественных оценок амплитуд надпороговых процессов, может служить сравнение мнимых частей поляризуемостей с сечениями фотоионизации, которые изучены значительно более полно, чем поляризуемости. В табл. 1 для такого сравнения используются экспериментальные значения сечения фотоионизации гелия [31]. Приведем также сравнение наших результатов для сечения фотоионизации гелия (в ат. ед.) на частотах 27-й, 29-й, 31-й и 33-й гармоник излучения титан-сапфирового лазера с энергией фотона $\hbar\omega = 1.55$ эВ ($\sigma_{27} = 0.107$, $\sigma_{29} = 0.092$, $\sigma_{31} = 0.079$, $\sigma_{33} = 0.069$) с данными, полученными из достаточно точных многочастичных расчетов [32]: $\sigma_{27} = 0.102$, $\sigma_{29} = 0.089$, $\sigma_{31} = 0.077$, $\sigma_{33} = 0.070$.

Как известно [33], в щелочных атомах сечение фотоионизации с увеличением частоты вначале убывает от конечного значения на пороге до некоторого минимального значения (известный куперовский минимум в сечении фотоионизации, связанный с изменением знака радиальных матричных элементов перехода из основного s -состояния в p -состояния континуума с полными угловыми моментами $j = 1/2, 3/2$), затем возрастает и далее монотонно уменьшается с ростом ω . Именно такое поведение демонстрируют мнимые части надпороговых поляризуемостей всех щелочных атомов (кро-



Динамическая поляризуемость основного состояния рубидия в области частот до первого резонанса $0 \leq \omega < E_{5p} - E_{5s}$ (а) и в области надпороговых частот $1.5|E_{5s}| \leq \omega \leq 6|E_{5s}|$ (б, в); $\tilde{\omega} = \omega/|E_{5s}|$, $|E_{5s}| = 4.176$ эВ = 0.1546 ат. ед.

ме лития, для которого куперовский минимум отсутствует) в методе модельного потенциала. Для примера на рисунке приведены частотные зависимости поляризуемости атома Rb как в области частот до первого резонанса (где наши результаты хо-

рошо согласуются с результатами более точных расчетов [12]), так и за порогом однофотонной ионизации. Как видно, вещественная часть поляризуемости при $\omega > |E_{5s}|$ отрицательна и монотонно убывает по абсолютной величине с ростом ω (аналогично случаю атома гелия, см. табл. 1). При достаточном удалении от порога она хорошо аппроксимируется известной высокочастотной асимптотикой: $\text{Re} \alpha_n^s(\omega \gg |E_n|) \approx -\omega^{-2}$. (Укажем, что этот закон является общим лишь для скалярной поляризуемости атомов (см., например [19, 21]) и неприменим к случаю векторной и тензорной поляризуемости, которые в области больших частот значительно быстрее убывают с ростом ω [34].) Напротив, частотная зависимость $\text{Im} \alpha(\omega)$ на рис. 6 немонотонна (в отличие от атома гелия) и согласуется с описанным выше поведением сечения фотоионизации, причем в пренебрежении эффектами тонкой структуры значение $\text{Im} \alpha(\omega)$ обращается в нуль вблизи точки куперовского минимума. В табл. 2 приведено сравнение положения куперовских минимумов (ω_c) в сечениях фотоионизации, рассчитанных в ММП с учетом тонкой структуры, с результатами *ab initio* расчетов (по данным работы [35]), а также с экспериментом [36]. Учитывая, что даже весьма трудоемкие многочастичные методы расчета волновых функций начального и конечного состояний атома при фотоионизации дают существенно различающиеся значения для положения куперовского минимума (см. табл. 2), результаты ММП можно считать вполне удовлетворительными. Как видно из табл. 2, они дают завышенные значения ω_c по сравнению с экспериментальными данными и наиболее близки к результатам последовательных теоретических расчетов в приближении Дирака–Хартри–Фока в калибровке длины (т. е. используя запись оператора \hat{V} дипольного взаимодействия электрона с излучением в виде $\hat{V} = e/c(\partial \mathbf{A}/\partial t \cdot \mathbf{r})$, где $\mathbf{A}(t)$ — векторный потенциал излучения). Отметим, что в настоящей работе также используются исходные выражения для поляризуемостей (см. (1)–(3)) в калибровке длины, поскольку для уравнения Шредингера с потенциалом (4) калибровки длины и скорости (т. е. при выборе \hat{V} в виде $\hat{V} = -e/c(\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{v}})$) являются неэквивалентными из-за наличия в (4) проекционных операторов \hat{P}_i . Указанный выбор калибровки в ММП обусловлен тем, что именно в калибровке длины основной вклад в радиальные матричные элементы типа (1) дает область больших расстояний r , в которой радиальные волновые функции для потенциала (4) могут служить разумной аппроксимацией волновых функций валентного электрона атома.

Приведенные выше сравнения и обсуждения показывают, что простой в техническом отношении модельный потенциал (4), который дает возможность использования в расчетах составных матричных элементов теории возмущений точный экспериментальный спектр одноэлектронных возбуждений атома, позволяет получить количественные оценки надпороговых поляризуемостей валентных атомных электронов, вполне приемлемые для многих приложений, не требующих прецизионной точности, в частности, для задач лазерной физики и нелинейной оптики газов. В табл. 1, 3, 4 приведены численные данные для надпороговых поляризуемостей атомов щелочных металлов и благородных газов. Как правило, в этих расчетах достаточно учитывать слагаемые с $k \approx 20\text{--}40$, $k' \approx k+10$ в рядах (15) для M_{nl}^L , причем с ростом ω число учитываемых членов тоже растет. Таким образом, использование модифицированной функции Грина (12) кардинально упрощает расчеты надпороговых поляризуемостей по сравнению, например, с использованием стандартного спектрального разложения функции Грина, что требует суммирования ряда по спектру дискретных состояний валентного электрона и численного расчета интеграла по виртуальным состояниям континуума [26]. Более того, такой подход принципиально неприменим для расчета матричных элементов высших порядков теории возмущений (начиная с третьего), поскольку, как показано в работе [37], в этом случае вклады сумм по дискретному спектру и интегралов по континууму оказываются расходящимися и компенсируются лишь в полном матричном элементе.

В настоящей работе предложены модификация функции Грина для потенциала Фьюса и метод расчета составных матричных элементов теории возмущений в атомах для надпороговых частот монохроматического внешнего поля, при которых энергии функций Грина, соответствующих виртуальным состояниям электрона, лежат в континууме. Фактически, предложенный метод использования свободных параметров в задачах с функциями Грина с положительными энергиями можно рассматривать как аналитическую реализацию методов «дискретизации континуума» (complex scaling), широко используемых в численных алгоритмах для решения задач, связанных с непрерывным спектром (см., например [38]). Наряду с поляризуемостями, развитая техника позволяет также рассчитывать нелинейные восприимчивости атомов в широком интервале частот, включая надпороговую область.

Авторы благодарны А. М. Попову за полезные за-

Таблица 3. Поляризуемости атомов щелочных металлов в основных состояниях при надпороговых частотах; $(-n) \equiv 10^{-n}$

ω , ат. ед.	$\alpha(\omega)$, ат. ед., Li	$\alpha(\omega)$, ат. ед., Na	$\alpha(\omega)$, ат. ед., K
0.2	$-16.8 + i2.25(-1)$	$-24.5 + i4.75(-1)$	$-23.7 + i6.93(-2)$
0.25	$-10.3 + i3.07(-1)$	$-14.4 + i4.52(-2)$	$-14.4 + i5.82(-4)$
0.3	$-7.05 + i2.83(-1)$	$-9.57 + i1.64(-4)$	$-9.71 + i1.66(-2)$
0.4	$-3.95 + i1.89(-1)$	$-5.16 + i1.38(-2)$	$-5.33 + i3.02(-2)$
0.6	$-1.77 + i7.93(-2)$	$-2.24 + i1.78(-2)$	$-2.33 + i1.99(-2)$
0.8	$-1.00 + i3.77(-2)$	$-1.25 + i1.17(-2)$	$-1.31 + i1.09(-2)$
1.0	$-0.64 + i2.02(-2)$	$-0.80 + i7.31(-3)$	$-0.84 + i6.20(-3)$
ω , ат. ед.	$\alpha(\omega)$, ат. ед., Rb	$\alpha(\omega)$, ат. ед., Cs	
0.2	$-25.2 + i1.66(-1)$	$-26.1 + i1.61(-1)$	
0.25	$-15.3 + i6.21(-3)$	$-15.9 + i8.17(-3)$	
0.3	$-10.3 + i2.61(-3)$	$-10.8 + i1.13(-3)$	
0.4	$-5.64 + i1.54(-2)$	$-5.90 + i1.10(-2)$	
0.6	$-2.46 + i1.32(-2)$	$-2.58 + i1.00(-2)$	
0.8	$-1.38 + i7.74(-3)$	$-1.44 + i5.88(-3)$	
1.0	$-0.88 + i4.54(-3)$	$-0.92 + i3.44(-3)$	

Таблица 4. Поляризуемости атомов благородных газов в основных состояниях при надпороговых частотах

ω , ат. ед.	$\alpha(\omega)$, ат. ед., Ne	$\alpha(\omega)$, ат. ед., Ar	$\alpha(\omega)$, ат. ед., Kr	$\alpha(\omega)$, ат. ед., Xe
1.0	$-2.41 + i4.97$	$-4.52 + i5.43$	$-5.01 + i5.73$	$-3.52 + i7.70$
1.2	$-2.36 + i3.44$	$-3.83 + i3.55$	$-4.24 + i3.72$	$-3.36 + i5.58$
1.4	$-2.14 + i2.46$	$-3.18 + i2.43$	$-3.51 + i2.53$	$-3.05 + i4.17$
1.6	$-1.89 + i1.80$	$-2.65 + i1.73$	$-2.91 + i1.78$	$-2.73 + i3.21$
1.8	$-1.65 + i1.36$	$-2.22 + i1.27$	$-2.44 + i1.30$	$-2.42 + i2.52$
2.0	$-1.44 + i1.05$	$-1.88 + i0.96$	$-2.06 + i0.98$	$-2.15 + i2.02$

мечания. Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 07-02-00574).

$$\int_0^\infty dt e^{-\beta t} t^{a-1} L_k^{c-1}(xt) L_n^{c'-1}(yt) = \frac{(c)_k (c')_n \Gamma(a)}{k! n! \beta^a} F_2 \left(a; -k, -n; c, c'; \frac{x}{\beta}, \frac{y}{\beta} \right),$$

ПРИЛОЖЕНИЕ

Интегрирование по радиальным переменным в матричном элементе (1) проводится с помощью формулы

где F_2 — гипергеометрическая функция двух переменных (функция Аппеля) [25], которая в нашем случае является двойным полиномом (степени k по x/β и степени n по y/β). В результате для \mathcal{M}_{nl}^L получаем ряд следующего вида:

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{nl}^L &= \sum_{k,k'=0}^{\infty} g_{kk'}^L(\nu; \alpha, \alpha) A_{k'}(n, \alpha) A_k(n, \alpha) \equiv \\ &\equiv \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{k'=0}^{\infty} a_{kk'}, \end{aligned} \quad (15)$$

симметричный по индексам суммирования, $a_{kk'} = a_{k'k}$. Величина $g_{kk'}^L$ дается формулой (13), а матричные элементы

$$A_k(n, \alpha) = \langle S_{kL}(2r/\alpha) | r | R_{nl}(r) \rangle$$

выражаются через гипергеометрические полиномы F_2 как

$$\begin{aligned} A_k(n, \alpha) &= \frac{\alpha \Gamma(\zeta) \sqrt{\Gamma(n + \lambda_l + 1)} (2\lambda_L + 2)_k}{4k! \sqrt{n_r!} \Gamma(2\lambda_l + 2)} \times \\ &\times x^{\lambda_L + 2} y^{\lambda_l + 2} \times \\ &\times F_2(\zeta; -k, -n_r; 2\lambda_L + 2, 2\lambda_l + 2; x, y), \end{aligned} \quad (16)$$

где

$$\zeta = \lambda_L + \lambda_l + 4, \quad x = \frac{2n}{n + \alpha}, \quad y = \frac{2\alpha}{n + \alpha}.$$

Строгое исследование сходимости ряда (15) состояло бы в том, чтобы найти в нем асимптотику внутренней суммы при больших k . Однако такая задача требует громоздких вычислений, поэтому ограничимся здесь исследованием поведения далеких членов ряда (15) на краях ($k \rightarrow \infty, k' \approx \text{const}$) и на диагонали ($k = k' \rightarrow \infty$) симметричной матрицы $a_{kk'}$. Необходимые для этого асимптотики функций ${}_2F_1(a, -k; c; x)$ и $F_2(a; -k, b; c, c'; x, y)$ при больших k найдены в работе [39], а поведение при больших k второй функции ${}_2F_1$ в выражении (13) для $g_{kk'}^L(\nu; \alpha, \alpha)$ легко устанавливается с помощью следующих преобразований [25]:

$$\begin{aligned} {}_2F_1(k + 1, k + 2\lambda + 2; k + \lambda + 2 - \eta; 1/z) &= \\ &= (1 - z^{-1})^{-k - \lambda - \eta - 1} \times \\ &\times {}_2F_1(\lambda + 1 - \eta, -\lambda - \eta; k + \lambda + 2 - \eta; 1/z) \approx \\ &\approx \left(\frac{4\alpha\nu}{(\alpha + \nu)^2} \right)^{k + \lambda + \eta + 1}. \end{aligned} \quad (17)$$

В результате для $a_{kk'}$ получаем следующие оценки: при фиксированном k' и $k \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned} a_{kk'} \sim k^\eta \left[a_1 k^{-\lambda_l - 4} + a_2 k^{\nu_0 + 1} \left(\frac{\alpha - \nu_0}{\alpha + \nu_0} \right)^k \right] \times \\ \times \left(\frac{\alpha - \nu}{\alpha + \nu} \right)^k, \end{aligned} \quad (18)$$

при $k' = k \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned} a_{kk} \sim \left[a_1 k^{-\lambda_l - 4} + a_2 k^{\nu_0 + 1} \left(\frac{\alpha - \nu_0}{\alpha + \nu_0} \right)^k \right]^2 \times \\ \times \left[c_1 + c_2 k^{2\eta} \left(\frac{\alpha - \nu}{\alpha + \nu} \right)^{2k} \right]. \end{aligned} \quad (19)$$

Здесь $\nu_0 \equiv \nu_{nl} > 0$, а коэффициенты $a_{1,2}$ и $c_{1,2}$ не зависят от k, k' .

Как видно из оценок (18), (19), необходимым условием сходимости ряда (15) является выполнение неравенств

$$\left| \frac{\alpha - \nu_0}{\alpha + \nu_0} \right| < 1, \quad \left| \frac{\alpha - \nu}{\alpha + \nu} \right| < 1. \quad (20)$$

При положительной энергии функции Грина, когда ν есть чисто мнимая величина, $\nu = i|\nu|$, условиям (20) можно удовлетворить, выбирая α в первой четверти комплексной плоскости: $\text{Re } \alpha > 0, \text{Im } \alpha > 0$. Численные расчеты подтверждают, что этого достаточно для сходимости. В то же время, из первого неравенства в (20) видно, что использование стандартного штурмовского разложения функции Грина (8) ($\alpha = \nu$) приводит к сходящемуся ряду в подпороговом случае (когда $\text{Im } \nu = 0$) и расходящемуся ряду в области надпороговых частот (где $\text{Re } \nu = 0$).

Приведенный выше анализ сходимости справедлив и при использовании функции Грина (12), (13) для расчета неупругих двухфотонных переходов в дискретном спектре, $|n\rangle \rightarrow |n'\rangle$, при частотах, превышающих энергию связи хотя бы одного из состояний $|n\rangle, |n'\rangle$; обобщение соотношений (18), (19) на этот случай достаточно очевидно. Отметим также, что в соотношениях (18), (19)

$$a_1 \propto 1/\Gamma(\lambda_L - \lambda_l - 2).$$

Поэтому в случае кулоновского потенциала, когда $\lambda_L - \lambda_l - 2$ переходит в $L - l - 2$ и является целым отрицательным числом, члены с a_1 в (18), (19), а следовательно, и в матричном элементе \mathcal{M}_{nl}^L исчезают. В этом случае выбором $\alpha = \nu_0 = n$ можно оборвать ряды в выражении (15), т. е. получить замкнутый аналитический результат для \mathcal{M}_{nl}^L , см. [4]. Отсутствие членов с a_1 в соотношениях типа (18), (19) для случая кулоновского потенциала позволяет также существенно упростить анализ сходимости штурмовских разложений нелинейных восприимчивостей атома водорода в надпороговой области частот [40].

ЛИТЕРАТУРА

1. M. Gavrila, Phys. Rev. **163**, 147 (1967).
2. 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).
3. J. T. Broad, Phys. Rev. A **31**, 1494 (1985).
4. А. А. Крыловецкий, Н. Л. Манаков, С. И. Мармо, ЖЭТФ **119**, 45 (2001).
5. Н. Р. Saha, Phys. Rev. A **47**, 2865 (1993).
6. M. S. Safronova, C. J. Williams, and C. W. Clark, Phys. Rev. A **69**, 022509 (2004).
7. M. S. Safronova, W. R. Johnson, and A. Derevianko, Phys. Rev. A **60**, 4476 (1999).
8. C. Zhu, A. Dalgarno, S. G. Porsev, and A. Derevianko, Phys. Rev. A **70**, 032722 (2004).
9. A. Dalgarno, Adv. Phys. **11**, 281 (1962).
10. A. Dalgarno and J. T. Lewis, Proc. Roy. Soc. London A **233**, 70 (1955).
11. S. Cohen and S. I. Themelis, J. Chem. Phys. **124**, 134106 (2006).
12. M. Marinescu, H. R. Sadeghpour, and A. Dalgarno, Phys. Rev. A **49**, 5103 (1994).
13. M. J. Seaton, Rep. Progr. Phys. **46**, 167 (1983).
14. G. Simons, J. Chem. Phys. **55**, 756 (1971).
15. V. E. Chernov, D. L. Dorofeev, I. Y. Kretinin, and B. A. Zon, Phys. Rev. A **71**, 022505 (2005).
16. V. E. Chernov, D. L. Dorofeev, I. Y. Kretinin, and B. A. Zon, J. Phys. B **38**, 2289 (2005).
17. Y. Nabekawa, H. Hasegawa, E. J. Takahashi, and K. Midorikawa, Phys. Rev. Lett. **94**, 043001 (2005); M. Böttcher, H. Rottke, N. Zhavoronkov, W. Sandner, P. Agostini, M. Gisselbrecht, and A. Huetz, Phys. Rev. A **75**, 033408 (2007).
18. E. T. Kennedy, J. Phys.: Conf. Ser. **58**, 41 (2007).
19. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Физматлит, Москва (2002).
20. Н. Л. Манаков, В. Д. Овсянников, Л. П. Рапопорт, Опт. и спектр. **38**, 206 (1975).
21. Л. П. Рапопорт, Б. А. Зон, Н. Л. Манаков, *Теория многофотонных процессов в атомах*, Атомиздат, Москва (1978).
22. N. L. Manakov, V. D. Ovsiannikov, and L. P. Rapoport, Phys. Rep. **141**, 319 (1986).
23. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, т. 2, Наука, Москва (1974).
24. Б. А. Зон, Н. Л. Манаков, Л. П. Рапопорт, ДАН СССР **188**, 560 (1969); В. А. Давыдкин, Б. А. Зон, Н. Л. Манаков, Л. П. Рапопорт, ЖЭТФ **60**, 124 (1971).
25. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, т. 1, Наука, Москва (1973).
26. N. L. Manakov and V. D. Ovsiannikov, J. Phys. B **10**, 569 (1977).
27. C. E. Moore, *Atomic Energy Levels*, Nat. Bur. Stand. (U.S.) Circ. 467, Vol. II (1952).
28. D. R. Bates and A. Damgaard, Phil. Trans. Roy. Soc. A (London) **242**, 101 (1949).
29. А. Деревянко, W. R. Johnson, В. Д. Овсянников, В. Г. Пальчиков, D. R. Plante, G. von Oppen, ЖЭТФ **115**, 494 (1999); A. Derevianko, W. R. Johnson, V. D. Ovsiannikov, V. G. Pal'chikov, D. R. Plante, and G. von Oppen, Phys. Rev. A **60**, 986 (1999).
30. W. C. Liu, Phys. Rev. A **56**, 4938 (1997).
31. J. A. R. Samson, Z. X. He, and G. N. Haddad, J. Phys. B **27**, 877 (1994).
32. L. A. A. Nikolopoulos and P. Lambropoulos, J. Phys. B **39**, 883 (2006).
33. У. Фано, Дж. Купер, *Спектральные распределения сил осцилляторов в атомах*, Наука, Москва (1972).
34. Н. Л. Манаков, В. А. Свиридов, А. Г. Файнштейн, ЖЭТФ **95**, 790 (1989).
35. M. G. J. Fink and W. R. Johnson, Phys. Rev. A **34**, 3754 (1986).
36. G. V. Marr and D. M. Creek, Proc. Roy. Soc. A **304**, 233 (1968).
37. Н. Л. Манаков, С. И. Мармо, А. Г. Файнштейн, ЖЭТФ **91**, 51 (1986).
38. W. P. Reinhardt, Ann. Rev. Phys. Chem. **33**, 223 (1982); В. R. Junker, Adv. Atom. Mol. Phys. **18**, 208 (1982).
39. Н. Л. Манаков, С. И. Мармо, А. Г. Файнштейн, ТМФ **59**, 49 (1984).
40. Н. Л. Манаков, С. И. Мармо, Е. А. Пронин, ЖЭТФ **125**, 288 (2004).