УДК 539.186.2

ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ ДЛЯ ИНТЕНСИВНОСТИ ШТАРКОВСКИХ ЛИНИЙ АТОМА ВОДОРОДА*

© 2001 г. А. А. Каменский, В. Д. Овсянников

Воронежский государственный университет

1. Введение

Оптические свойства атома, помещенного в постоянное электрическое поле, претерпевают изменения и становятся функциями напряженности поля. Данное явление, обычно называемое в литературе эффектом Штарка, в настоящее время наиболее полно описано для изменения частоты спектральных линий, обусловленного изменением энергии атомных уровней в поле. Однако, наряду с изменением частот происходит и изменение интенсивности линий. До сих пор данный эффект остается малоизученным, и во многих случаях ответа на вопрос о зависимости интенсивности от напряженности поля найти в литературе невозможно. Цель настоящей работы − теоретический расчет по теории возмущений полевой зависимости интенсивности штарковских линий водородоподобного атома.

Сдвиг, расщепление и уширение штарковских уровней энергии в водороде были вычислены для произвольно высоких порядков по электрическому полю F [1], [2]. Индуцированное полем изменение интенсивности водородоподобных линий рассматривалось как перераспределение по штарковским компонентам при трансформации атомных уровней от состояний сферически симметричного гамильтониана $\left|nlm\right\rangle$ к состояниям аксиально-симметричного (кулоновское плюс однородное электрическое поле) гамильтониана, описываемых в базисе параболических волновых функций $\left|nn_1n_2m\right\rangle$ — так называемых штарковских подуровней (см. [3], [4]). В таком приближении, использовавшемся ранее для описания эффекта Штарка, вероятности радиационных переходов свободного атома оставались неизменными для каждой компоненты, независимо от того, увеличивалась или уменьшалась сила поля, поскольку соответствующие матричные элементы радиационных переходов определялись на основе формулы Гордона, которая не учитывала зависимости от поля волновых функций начального и конечного состояний ([4], [5]).

Однако очевидно, что оба фактора, определяющих интенсивность излучения атома при переходе из начального состояния $\left|nn_1n_2m\right\rangle$ в конечное $\left|n'n_1'n_2'm'\right\rangle$

$$I_{n,n'} \sim \omega_{nn'}^4 \left|d_{n,n'}\right|^2, \qquad (1)$$

то есть четвертый порядок частоты линии $\omega_{nn'}^4$ и квадрат дипольного матричного элемента $\left|d_{n,n'}\right|^2$, оба зависят от напряженности электрического поля F. Так что зависимость интенсивности от поля также очевидна. Эта зависимость для линий, соответствующих переходам между высоковозбужденными ридберговскими уровнями, наблюдалась впервые экспериментально в 1992 г. [6]. Теоретическая интерпретация результатов эксперимента основывалась на учете зависимости от поля волновой функции верхнего состояния, которая определялась из диагонализации энергетической матрицы на ограниченном подпространстве ближайших по энергии состояний, или путем численного интегрирования уравнений с разделяющимися параболическими переменными.

Недавно были получены общие формулы для вычисления членов первого и второго порядка [7] для зависимости интенсивности линии от поля, хорошо согласующиеся с экспериментальными результатами работы [6]. Однако поправок первых двух порядков может оказаться недостаточно для описания эффекта в области высоких полей. Кроме того, для переходов между бездипольными состояниями поправки либо первого, либо второго

* Работа выполнена при финансовой поддержке Минобразования РФ (грант 97-0-5.1-63).

порядка (в зависимости от поляризации излучения) равны нулю. Поэтому из первых двух остается только одна неисчезающая поправка к радиационному матричному элементу перехода, тогда как для оценки применимости теории требуется знать хотя бы две последовательные неисчезающие поправки.

Эффект зависимости интенсивности от напряженности поля дает дополнительную спектроскопическую информацию о структуре атома, которая может быть использована на практике для оптической диагностики однородных полей, воздействующих на атомы, и для управления излучением и поглощением света атомами в поле. Зависимость интенсивности линий делает возможным экспериментально измерить индуцированное полем изменение радиационного матричного элемента и, следовательно, определить *индуцированные полем поправки к волновой функции* начального и конечного состояний.

Зависимость частотного фактора от поля в уравнении (1) легко получается из данных для эффекта Штарка *для энергии* начального и конечного состояний [1]. Аналогичная зависимость для матричного элемента также может быть получена на основе данных эффекта Штарка *для волновой функции*. Однако, хотя общие уравнения для поправок высших порядков к кулоновской волновой функции в однородном электрическом поле кажутся довольно простыми, подробный анализ подобных данных оказывается громоздким, поскольку требует нахождения решения для двух связанных дифференциальных уравнений с зависящими от поля собственными значениями и собственными функциями. Задача собственных значений решается с использованием рекурсивной процедуры для коэффициентов линейной комбинации полиномов Лагерра, представляющих волновую функцию атома в поле, в то время как разложение Релея-Шредингера для волновых функций в степенной ряд по полю F требует использования некоторых дополнительных операций для выделения явной зависимости от поля из аргументов волновой функции [2].

Процедура получения степенного ряда для штарковских волновых функций без решения системы двух связанных уравнений с разделяющимися параболическими переменными ξ и η, может быть построена на основе интегральной формы уравнения Шредингера для атома в поле с использованием замкнутого аналитического представления редуцированной функции Грина в параболических координатах [7].

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 функций параболических квантовых чисел начального и конечного уровней. В настоящей работе мы представляем общий метод расчета поправок высших порядков, обобщающий метод теории возмущений для вырожденных состояний, использованный в работах [7], и позволяющий построить общую программу получения высших поправок как в аналитическом виде, так и численно. Применение метода к расчету поправок первого и второго порядков дает результат, идентичный полученным в [7]. Получены также и простые аналитические выражения в виде функций параболических квантовых чисел для поправок третьего порядка. Мы приводим как аналитические, так и численные результаты для серии Лаймана.

2. Поправки высших порядков для штарковских состояний водорода

Общеизвестный метод разделения переменных для расчета эффекта Штарка энергетических уровней водорода, описанный в учебниках по квантовой механике [4, 8], оказывается неэффективным для получения волновой функции в виде степенных рядов, коэффициенты которых не зависели бы от поля (рядов Релея-Шредингера). Наиболее эффективным для этой цели оказывается использование кулоновской функции Грина в параболических координатах [9]. Благодаря тому, что оператор взаимодействия атома с полем в параболических координатах диагонален, параболические состояния одной и той же оболочки с фиксированным главным квантовым числом n оказываются независимыми. Поэтому расчет поправки первого порядка к волновой функции и второго порядка к энергии оказывается осуществимым с помощью теории возмущений для невырожденных состояний и частично редуцированной функции Грина [7]. Однако уже во втором порядке матричный элемент взаимодействия атома с полем оказывается недиагональным и состояния параболического базиса, принадлежащие данной n-оболочке, перемешиваются полем. В этой связи расчет поправки второго и последующих порядков должен основываться на теории возмущений для вырожденных состояний. Основные формулы для поправок второго порядка нами были выписаны в [7]. В настоящей работе мы приводим обобщение этих формул, позволяющее автоматизировать расчеты с использованием аналитических компьютерных программ типа MAPLE. Поскольку в расчете поправок высших порядков используются все поправки более низких порядков, надежность программы автоматически проверяется на низших порядках. В качестве примера в данной работе приводятся результаты расчетов поправок до третьего порядка включительно.

2.1. Теория возмущений для параболических состояний

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

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

где

$$A_{nn_1n_2m} = \frac{1}{n^2}\sqrt{\frac{2Z^3(n_1+m)!(n_2+m)!}{n_1!\,n_2!}}, \quad (3)$$

— нормировочная постоянная, Z — заряд атомного ядра,

$$\begin{aligned} f^m_k(x) &= \frac{k!}{(k+m)!}e^{-x/2}x^{m/2}L^m_k(x) = \\ &= \frac{1}{m!}e^{-x/2}x^{m/2}{}_1F_1(-k;m+1;x), \end{aligned} \quad (4)$$

— функция Штурма кулоновского волнового уравнения с обобщенными полиномами Лагерра $L^m_k(x)$, которые могут быть представлены также и через вырожденную гипергеометрическую функцию ${}_1F_1(-k;\ m+1;x)$ [10].

В случае взаимодействия атома с однородным электрическим полем

$$\hat{V}(\mathbf{r}) = zF, \quad (5)$$

где z является составляющей вектора координаты электрона $\mathbf{r}$ вдоль вектора электрического поля $\mathbf{F}$, решение для точной волновой функции можно получить из интегрального уравнения для вырожденных состояний [11]

$$\begin{aligned} &\Psi_{nn_1n_2m}(\mathbf{r}) = \\ &= \sum_{n_1'=0}^{n-m-1} a_{n_1'}\psi_{nn_1'n_2'm}(\mathbf{r}) - G_E'(\mathbf{r},\mathbf{r}')\widehat{V}(\mathbf{r}')\left|\Psi_{nn_1n_2m}(\mathbf{r}')\right\rangle = \\ &= \sum_{n_1'=0}^{n-m-1} a_{n_1'}\left[1+G_E'(\mathbf{r},\mathbf{r}')\widehat{V}(\mathbf{r}')\right]^{-1}\left|\psi_{nn_1'n_2'm}(\mathbf{r}')\right\rangle, \end{aligned} \quad (6)$$

где введены коэффициенты $a_{n_1'} = \left\langle\psi_{nn_1'n_2'm}\middle|\Psi_{nn_1n_2m}\right\rangle$ при начальном условии $a_{n_1'} \underset{F\to 0}{\to} \delta_{n_1'n_1}$ (символ Кронекера), G_E', редуцированная функция Грина:

$$G_E'(\mathbf{r},\mathbf{r}') = G_E(\mathbf{r},\mathbf{r}') - \sum_{n_1'=0}^{n-m-1}\frac{\psi_{nn_1'n_2'm}(\mathbf{r})\psi^*_{nn_1'n_2'm}(\mathbf{r}')}{E_n - E} \quad (7)$$

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

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

Функцию Грина (7) можно выразить через редуцированную функцию Грина с энергией невозмущенного атома E_n

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

$$\begin{aligned} G^{(n)}_m(\xi,\eta;\xi',\eta') &= \frac{2Z}{n}\sum_{k_1=0}^{\infty}\sum_{k_2=0}^{\infty}\left(\frac{(k_1+m)!}{k_1!}\frac{(k_2+m)!}{k_2!}\times\right.\\ &\left.\times\frac{f^m_{k_1}\left(\frac{Z\xi}{n}\right)f^m_{k_1}\left(\frac{Z\xi'}{n}\right)f^m_{k_2}\left(\frac{Z\eta}{n}\right)f^m_{k_2}\left(\frac{Z\eta'}{n}\right)}{k_1+k_2+m+1-n}\right)+\\ &+\frac{2Z}{n^2}\sum_{\nu_1=0}^{n-m-1}\frac{(\nu_1+m)!}{\nu_1!}\frac{(\nu_2+m)!}{\nu_2!}\times\\ &\times\left(\frac{5}{2}+\xi\frac{\partial}{\partial\xi}+\xi'\frac{\partial}{\partial\xi'}+\eta\frac{\partial}{\partial\eta}+\eta'\frac{\partial}{\partial\eta'}\right)\times\\ &\times f^m_{\nu_1}\left(\frac{Z\xi}{n}\right)f^m_{\nu_1}\left(\frac{Z\xi'}{n}\right)f^m_{\nu_2}\left(\frac{Z\eta}{n}\right)f^m_{\nu_2}\left(\frac{Z\eta'}{n}\right),\\ &\nu_2 = n-\nu_1-m-1. \end{aligned} \quad (8)$$

воспользовавшись разложением в ряд Тейлора

$$G'_E(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \sum_{N=0}^{\infty}(G_m^{(n)}(\mathbf{r},\mathbf{r}'))^{N+1}(\Delta E)^N = \\ = G_m^{(n)}(\mathbf{r},\mathbf{r}') + \Delta E G_m^{(n)}(\mathbf{r},\mathbf{r}')G'_E(\mathbf{r},\mathbf{r}'). \tag{9}$$

Благодаря аксиальной симметрии возмущения (5), зависимость от угловой переменной φ остается такой же, как и для невозмущенной волновой функции (2). Она не сказывается на вычислениях, поэтому в дальнейшем может быть опущена.

Коэффициенты $a_{n'_1}$ в волновой функции (6) после некоторых преобразований с учетом диагональности матричного элемента оператора возмущения (5):

$$V_{n_1n'_1} = \left\langle \psi_{nn_1n_2m} \middle| V(\mathbf{r}) \middle| \psi_{nn'_1n'_2m} \right\rangle = \frac{3Fn}{2Z}(n_1 - n_2)\delta_{n_1n'_1},$$

можно выразить через самих себя следующим образом:

Вычисление коэффициентов $b_{i_1i_2}$ представляет собой рекуррентную процедуру. Подставив разложение (11) в (10), (6), после некоторых преобразований получаем для любого коэффициента из (11), кроме b_{00}, выражение вида:

$$b_{k_1k_2} = \sum_{t_1t_2} X_{t_1t_2k_1k_2} b_{t_1t_2}, \tag{12}$$

где

$$X_{t_1t_2k_1k_2} = \frac{2Z\delta_{k_1+k_2,0}}{3nF(k_1-k_2)}\sum_{N=2}^{\infty}\Delta E^{(N)}\widetilde{U}_{n_1+k_1n_2+k_2n_1+t_1n_2+t_2} + \\ + \sum_{l_1l_2}(v_{n_1+t_1n_2+t_2l_1l_2} - \Delta E u_{n_1+t_1n_2+t_2l_1l_2})\times \\ \times\left(\frac{2Z\delta_{k_1+k_2,0}V_{n_1+k_1n_2+k_2l_1l_2}}{3n(k_1-k_2)F} - \delta_{l_1n_1+k_1}\delta_{l_2n_2+k_2}\right), \tag{13}$$

$$a_{n'_1} = \frac{\left\langle \psi_{nn'_1n'_2m}(\mathbf{r}) \middle| \widehat{V}(\mathbf{r})G_m^{(n)}(\mathbf{r},\mathbf{r}')(\widehat{V}(\mathbf{r}') - \Delta E) \middle| \Psi_{nn_1n_2m}(\mathbf{r}') \right\rangle + (\Delta E - \Delta E^{(1)})a_{n'_1}}{V_{n'_1n'_1} - \Delta E^{(1)}}, \tag{10}$$

где $\Delta E^{(1)} = V_{n_1n_1}$, — поправка к энергии первого порядка.

Выражения (6), (10) позволяют выразить поправку любого порядка к волновой функции через поправки предыдущих порядков малости по полю. Исключение составляет только один член суммы (6) с $n'_1 = n_1$, $n'_2 = n_2$, для определения которого необходимо будет воспользоваться условием нормировки.

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

Свойства ортогональности обобщенных полиномов Лагерра позволяют вычислить интегралы по параболическим переменным в (6), (10) аналитически, представив точную волновую функцию в виде линейной комбинации функций Штурма уравнения Шредингера в параболических координатах для *невоЗмущенного атома*:

$$\Psi_{nn_1n_2m} = \\ = A_{n_1n_2m}\sum_{i_1}\sum_{i_2} b_{i_1i_2}(n_1n_2m) f^m_{n_1+i_1}\left(\frac{Z\xi}{n}\right) f^m_{n_2+i_2}\left(\frac{Z\eta}{n}\right). \tag{11}$$

$$v_{k_1k_2k'_1k'_2} = \frac{n^2}{2Z}\frac{A^2_{k'_1k'_2}}{A^2_{k_1k_2}}\Big[(\delta_{k'_1+k'_2,n_1+n_2} - \delta_{k'_1+k'_2,n_1+n_2-1})\times \\ \times((k'_1+m+1)\widetilde{V}_{k_1k_2k'_1+1k'_2} + (k'_2+m+1)\widetilde{V}_{k_1k_2k'_1k'_2+1}) + \\ + \left(\delta_{k'_1+k'_2,n_1+n_2} + \frac{2n(1-\delta_{k'_1+k'_2,n_1+n_2})}{k'_1+k'_2+m+1-n}\right)\widetilde{V}_{k_1k_2k'_1k'_2} + \\ + (\delta_{k'_1+k'_2,n_1+n_2+1} - \delta_{k'_1+k'_2,n_1+n_2})(k'_1\widetilde{V}_{k_1k_2k'_1-1k'_2} + k'_2\widetilde{V}_{k_1k_2k'_1k'_2-1})\Big] \tag{14}$$

Здесь $\widetilde{V}_{k_1k_2k'_1k'_2} = A^2_{k_1k_2m}\left\langle f_{k_1}f_{k_2} \middle| \hat{V} \middle| f_{k'_1}f_{k'_2}\right\rangle$. Выражение для $u_{k_1k_2k'_1k'_2}$ получается из $v_{k_1k_2k'_1k'_2}$ заменой $\widetilde{V}_{k_1k_2k'_1k'_2}$ на $\widetilde{U}_{k_1k_2k'_1k'_2} = A^2_{k_1k_2m}\left\langle f_{k_1}f_{k_2} \middle| f_{k'_1}f_{k'_2}\right\rangle$. Тензор (13) неопределен при $k_1 = k_2 = 0$.

Каждый из коэффициентов $b_{i_1i_2}$ раскладываем в ряд по силе поля, вынося для удобства зависящий от поля и главного квантового числа масштабный множитель:

$$b_{i_1i_2} = \sum_{N=0}^{\infty}F^N\left(\frac{n}{2Z}\right)^{3N}b^{(N)}_{i_1i_2}. \tag{15}$$

Из общих соображений можно показать, что для ненулевых слагаемых N-го порядка каждый индекс в сумме (11) пробегает значения от $-2N$ до $2N$, только если другой индекс равен нулю. Оставшиеся ненулевые коэффициенты $b^{(N)}_{i_1 i_2}$ соответствуют $|i_1| = 2M$, $2M-1$ и $|i_2| \le 2N - 2M$ (M = 1, ..., $N-1$). Таким образом, полное число ненулевых коэффициентов $b^{(N)}_{i_1 i_2}(n_1 n_2 m)$ будет $8N^2 + 1$. Например, волновая функция первого порядка включает 9 слагаемых, второго — 33, а третьего — 73. Симметрия оператора возмущения (5) сказывается и на симметрии коэффициентов:

$$b^{(N)}_{i_1 i_2}(n_1 n_2 m) = (-1)^N b^{(N)}_{i_2 i_1}(n_2 n_1 m) \tag{16}$$

Аналитические выражения в виде полиномов от параболических квантовых чисел для коэффициентов $b^{(1)}_{i_1 i_2}$ и $b^{(2)}_{i_1 i_2}$ и их свойства приводятся в [7].

Энергия, а, следовательно, и величины $X_{t_1 t_2 k_1 k_2}$ также представляют собой набор слагаемых различных степеней по F. Описанный здесь формализм позволяет получить и поправку к энергии ΔE любого порядка, выразив ее через коэффициенты $b_{i_1 i_2}$ более низкого порядка. Однако, поправки к энергии в электрическом поле рассчитаны практически в произвольно высоких порядках ([1]), поэтому в данной работе мы полагаем эти величины известными.

Можно показать, что в случае $t_1 = -t_2 = t$ тензор (13) дает вклад только при $N = 1$. Поэтому, для первых трех порядков коэффициентов $b_{k_1 k_2}$ имеем:

$$F\left(\frac{n}{2Z}\right)^3 b^{(1)}_{k_1 k_2} = \sum_{t_1 t_2} X^{(1)}_{t_1 t_2 k_1 k_2} b^{(0)}_{t_1 t_2} = X^{(1)}_{00 k_1 k_2}; \tag{17}$$

$$F\left(\frac{n}{2Z}\right)^3 b^{(2)}_{k_1 k_2} = \sum_{t_1 t_2} X^{(1)}_{t_1 t_2 k_1 k_2} b^{(1)}_{t_1 t_2}; \tag{18}$$

$$F^2\left(\frac{n}{2Z}\right)^6 b^{(3)}_{k_1 k_2} = \sum_{t_1 t_2}\left(X^{(1)}_{t_1 t_2 k_1 k_2} F\left(\frac{n}{2Z}\right)^3 b^{(2)}_{t_1 t_2} + X^{(2)}_{t_1 t_2 k_1 k_2} b^{(1)}_{t_1 t_2}\right). \tag{19}$$

Следовательно, для определения $b^{(N)}_{k_1 k_2}$ при $N > 1$ достаточно знать поправки к энергии не выше ΔE^N.

Соотношения (17)—(19) справедливы для всех коэффициентов, кроме $b^{(N)}_{00}$. Коэффициенты $b^{(N)}_{00}$ находятся из условия нормировки волновой функции. Рассмотрим N-й порядок выражения $\left\langle \Psi_{n n_1 n_2 m} \middle| \Psi_{n n_1 n_2 m} \right\rangle = 1$, выделим из него $b^{(0)}_{k_1 k_2} = \delta_{k_1 0}\delta_{k_2 0}$, символ Кронекера снимет одно суммирование. Тогда для $N > 0$ получим

$$\begin{aligned} b^{(N)}_{00} = &-\frac{1}{2}\sum_{k_1 k_2} \frac{A^2_{n_1 n_2}}{A^2_{n_1+k_1 n_2+k_2}} \times \\ &\times \sum_{l_1 l_2} \sum_{i=1}^{N} b^{(i)}_{k_1 k_2} b^{(N-i)}_{l_1 l_2} \widetilde{U}_{n_1+k_1 n_2+k_2 n_1+l_1 n_2+l_2} - \\ &- \sum_{t_1 t_2 \ne (00)} b^{(N)}_{t_1 t_2} \widetilde{U}_{n_1 n_2 n_1+t_1 n_2+t_2}. \end{aligned} \tag{20}$$

Итак, $b^{(N)}_{00}$ при $(i_1 i_2) \ne (00)$ выражаются через такие же коэффициенты всех предыдущих порядков малости. После этого находится $b^{(N)}_{00}$ по формуле (20). Таким образом, рекуррентные соотношения являются довольно сложными, если ставить цель получить общее выражение для коэффициента $b^{(N)}_{i_1 i_2}$ в произвольном порядке теории возмущений N. Тем не менее, для «крайних» коэффициентов удается получить общие выражения вида:

$$\begin{aligned} b^{(N)}_{2N0} &= (-1)^N \frac{(n_1 + m + 1)_{2N}}{N!}, \\ b^{(N)}_{-2N0} &= \frac{(n_1 - 2N + 1)_{2N}}{N!}. \end{aligned} \tag{21}$$

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

2.3. Дипольный матричный элемент и интенсивность радиационного перехода

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

$$d_{nn'}(F) = \left\langle \Psi_{n n_1 n_2 m} \middle| \mathbf{d} \middle| \Psi_{n' n_1' n_2' m'} \right\rangle, \tag{22}$$

может быть записан в форме степенного ряда по силе поля F с помощью разложения волновых функций (11) начального и конечного состояний. Для третьего порядка имеем:

$$\begin{aligned} d^{(3)}_{n' \leftarrow n} = &\left\langle \psi^{(0)}_{n'} \middle| d \middle| \psi^{(3)}_{n} \right\rangle + \left\langle \psi^{(1)}_{n'} \middle| d \middle| \psi^{(2)}_{n} \right\rangle + \\ &+ \left\langle \psi^{(2)}_{n'} \middle| d \middle| \psi^{(1)}_{n} \right\rangle + \left\langle \psi^{(3)}_{n'} \middle| d \middle| \psi^{(0)}_{n} \right\rangle. \end{aligned} \tag{23}$$

Результат получается в виде линейной комбинации дипольных матричных элементов от функций Штурма (4), которые приводятся в [7]. Запишем частоту перехода, дипольный матричный элемент и интенсивность в виде рядов:

$$\omega_{nn'} = \omega_{nn'}^{(0)} + F\omega_{nn'}^{(1)} + F^2\omega_{nn'}^{(2)} + F^3\omega_{nn'}^{(3)} + \dots \quad (24)$$

$$d_{nn'}(F) = d_{nn'}(0)(1 + Fr_{nn'}^{(1)} + F^2 r_{nn'}^{(2)} + F^3 r_{nn'}^{(3)} + \dots) \quad (25)$$

$$I_{nn'}(F) = I_{nn'}(0)(1 + F\beta_{nn'}^{(1)} + F^2\beta_{nn'}^{(2)} + F^3\beta_{nn'}^{(3)} + \dots). \quad (26)$$

Учитывая (1), запишем связь между коэффициентами разложения

$$\beta_{nn'}^{(1)} = 4\frac{\omega_{nn'}^{(1)}}{\omega_{nn'}^{(0)}} + 2r_{nn'}^{(1)}; \quad (27)$$

$$\beta_{nn'}^{(2)} = 4\frac{\omega_{nn'}^{(2)}}{\omega_{nn'}^{(0)}} + 6\left(\frac{\omega_{nn'}^{(1)}}{\omega_{nn'}^{(0)}}\right)^2 + 8\frac{\omega_{nn'}^{(1)}}{\omega_{nn'}^{(0)}} r_{nn'}^{(1)} + r_{nn'}^{(1)2} + 2r_{nn'}^{(1)}; \quad (28)$$

$$\begin{aligned} \beta_{nn'}^{(3)} = {} & 4\left[\frac{\omega_{nn'}^{(3)}}{\omega_{nn'}^{(0)}} + 3\frac{\omega_{nn'}^{(1)}\omega_{nn'}^{(2)}}{\omega_{nn'}^{(0)2}} + \left(\frac{\omega_{nn'}^{(1)}}{\omega_{nn'}^{(0)}}\right)^3\right] + \\ & +4r_{nn'}^{(1)}\left[2\frac{\omega_{nn'}^{(2)}}{\omega_{nn'}^{(0)}} + 3\left(\frac{\omega_{nn'}^{(1)}}{\omega_{nn'}^{(0)}}\right)^2\right] + \\ & +4(r_{nn'}^{(1)2} + 2r_{nn'}^{(2)})\frac{\omega_{nn'}^{(1)}}{\omega_{nn'}^{(0)}} + 2(r_{nn'}^{(3)} + r_{nn'}^{(1)}r_{nn'}^{(2)}). \end{aligned} \quad (29)$$

Вследствие (16) они также удовлетворяют соотношениям симметрии

$$\begin{aligned} r_{nqm\to n'q'm'}^{(N)} &= (-1)^N r_{n-qm\to n'-q'm'}^{(N)}, \\ \beta_{nqm\to n'q'm'}^{(N)} &= (-1)^N \beta_{n-qm\to n'-q'm'}^{(N)}. \end{aligned} \quad (30)$$

Аксиальная симметрия системы делает эти величины также независящими от знака магнитного квантового числа m:

$$\begin{aligned} r_{nqm\to n'q'm'}^{(N)} &= r_{nq-m\to n'q'-m'}^{(N)}, \\ \beta_{nqm\to n'q'm'}^{(N)} &= \beta_{nq-m\to n'q'-m'}^{(N)}. \end{aligned} \quad (31)$$

3. Штарковские 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.

Поправка третьего порядка к волновой функции представляет собой линейную комбинацию (11), где коэффициенты $b_{i_1 i_2}^{(3)}$ находятся с помощью (19) и (20). В общем случае имеется 73 отличных от нуля коэффициента, каждый из которых можно представить в виде полиномов от параболических квантовых чисел начального и конечного состояний. Непосредственная подстановка волновой функции в (23) приведет к длинному выражению, содержащему гипергеометрические функции (для первого и второго порядков см. [7]). Эти выражения упрощаются, если нижнее состояние имеет нулевые параболические квантовые числа.

Рассмотрим частный случай — серию Лаймана (переходы в основное состояние с $n' = 1, q' = m' = 0$). Поправки третьего порядка к дипольному матричному элементу и интенсивности линии имеют вид:

$$\begin{aligned} r_{1S\leftarrow n}^{(3)\pi} = -\frac{n}{384q(n^2-1)^3 Z^9}[& n^2(171n^{12} - 2277n^{10} \\ & +1005n^8 + 55801n^6 - 17308n^4 + 4752n^2 \\ & -672)q^4 - (n^2-1)(7587n^{14} - 1353n^{12} \\ & -24815n^{10} - 8571n^8 + 3880n^6 + 53768n^4 \\ & -24144n^2 + 432)q^2 + n^2(n^2-1)^2(1035n^{12} \\ & -3129n^{10} - 1391n^8 - 491n^6 + 4792n^4 \\ & -648n^2 + 216)]; \end{aligned} \quad (32)$$

$$\begin{aligned} \beta_{1S\leftarrow n}^{(3)\pi} = -\frac{n}{192q(n^2-1)^2 Z^9}[& n^2(171n^{10} - 822n^8 \\ & +963n^6 + 472n^4 - 2064n^2 + 1152)n^4 \\ & -(7416n^{14} - 6576n^{12} - 9496n^{10} + 5952q^8 \\ & +2992n^6 + 4864n^4 - 8688n^2 - 3408)q^2 \\ & +n^2(n^2-1)(2385n^{12} - 2379n^{10} - 757n^8 \\ & -265n^6 + 4376n^4 - 3024n^2 - 528)]; \end{aligned} \quad (33)$$

$$\begin{aligned} r_{1S\leftarrow n}^{(3)\sigma} = -\frac{nq}{384q(n^2-1)^3 Z^9}[& n^2(171n^{12} - 2277n^{10} \\ & +1005n^8 + 55801n^6 - 17308n^4 - 4752n^2 \\ & -672)q^2 - (n^2-1)(7371n^{14} + 1998n^{12} \\ & -40445n^{10} + 3156n^8 - 3184n^6 - 53696n^4 \\ & -24144n^2 + 432)]; \end{aligned} \quad (34)$$

$$\beta^{(3)\sigma}_{1S\leftarrow n} = -\frac{nq}{192q(n^2-1)^2 Z^9}[n^2(171n^{10}-822n^8 +963n^6+472n^4-2064n^2+1152)q^2 -7371n^{14}+5550n^{12}+12589n^{10}-9408n^8 -2128n^6-4576n^4+8688n^2-3408)]. \quad (35)$$

Соответствующие численные значения для коэффициентов разложения дипольного матричного элемента (25) и интенсивности (26) приведены в таблице 1. Мы исключили переход $L_\beta(\pi_0)$, поскольку в нулевом приближении эта линия отсутствует. Поправки второго порядка отрицательны, в то время как поправки первого и третьего порядков носят знакопеременный характер. Следует заметить, что порядок поправки сильно зависит от квантовых чисел верхнего состояния. Так, для линии $L_\alpha(\pi_2)$ величина $\beta^{(3)}$ оказалась меньше, чем $\beta^{(2)}$, что свидетельствует о применимости низших порядков теории возмущений для этой линии в достаточно сильных полях.

4. Заключение

Таким образом, рекуррентное соотношение (12), позволяет получить коэффициенты разложения (11) для волновой функции водородоподобного атома в однородном электрическом поле по функциям Штурма в любом порядке теории возмущений *N*. Индуцированные полем поправки к дипольным матричным элементам и интенсивностям радиационных переходов между штарковскими уровнями представлены в виде асимптотических рядов по напряженности поля *F*. Для серии Лаймана выписаны аналитические выражения и приведены численные значения поправок третьего порядка. Эти поправки имеют более значительную зависимость от параболических квантовых чисел верхнего состояния и в ряде случаев могут давать заметный вклад вблизи порога ионизации.

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

$$\frac{r^{(3)}_{nqm\to n'q'm'}}{r^{(2)}_{nqm\to n'q'm'}} \sim \frac{r^{(2)}_{nqm\to n'q'm'}}{r^{(1)}_{nqm\to n'q'm'}}, \frac{\beta^{(3)}_{nqm\to n'q'm'}}{\beta^{(2)}_{nqm\to n'q'm'}} \sim \frac{\beta^{(2)}_{nqm\to n'q'm'}}{\beta^{(1)}_{nqm\to n'q'm'}}, \quad (36)$$

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 оказываются нулевыми (например, для σ-переходов между бездипольными состояниями), то для анализа сходимости ряда теории возмущений требуется четвертый порядок.

Проведенные здесь расчеты могут оказаться важными не только с академической точки зрения. 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

Таблица 1. Относительные поправки первых трех порядков $r^{(N)}$, $\beta^{(N)}$ к дипольным матричным элементам и интенсивностям штарковских компонент серии Лаймана. Числом в скобках отмечен показатель степени десятки: $a(k) \equiv a \times 10^k$

nqm	Линия	$r^{(1)}$	$r^{(2)}$	$r^{(3)}$	$\beta^{(1)}$	$\beta^{(2)}$	$\beta^{(3)}$
210	$L_\alpha(\pi_2)$	8	-1.066(3)	4.683(4)	48	-2.044(3)	399.5
201	$L_\alpha(\sigma_0)$	0	-1.061(3)	0	0	-2.930(3)	0
320	$L_\beta(\pi_6)$	48	-3.217(4)	6.746(6)	177	-5.908(4)	5.401(6)
311	$L_\beta(\sigma_3)$	-23.25	-3.383(4)	4.145(6)	-6	-7.566(4)	7.709(6)
430	$L_\gamma(\pi_{12})$	172.5	-3.318(5)	2.232(8)	498.7	-6.077(5)	2.370(8)
410	$L_\gamma(\pi_4)$	754.4	-3.152(5)	-6.349(7)	1560	-2.227(4)	-6.596(8)
421	$L_\gamma(\sigma_8)$	-59.2	-3.616(5)	1.821(8)	-16.0	-7.647(5)	3.453(8)
401	$L_\gamma(\sigma_0)$	0	-3.533(5)	0	0	-7.451(5)	0

с системой частиц, когда малым параметром для теории возмущений будет величина, обратная расстоянию от ядра атома до частицы.

Список литературы

1. Hoe N, d'Elat B and Couland G // Phys. Lett. A. 1981. 85. 327—331

2. Дамбург Р. Д., Колосов В. В. В книге Ридберговские состояния атомов и молекул. под ред. Стеббинга Р. Ф. и Даннинга Ф. Б. М. Мир, 1983. с. 42—87.

3. Condon E. U. and Shortley G. H. 1935 The Theory of Atomic Spectra (Cambridge: Cambridge University Press).

4. Бёте Г., Солпитер Э. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. Москва 1960. 562 с.

5. Буреева Л. А. и Лисица В. С. Возмущенный атом. М. ИздАТ. 1997. 464 с.

6. Bellermann M., Bergeman T., Haffmans A., Koch P. M. and Sirko L. // Phys Rev A 1992. 46 5836-44.

7. Kamenski A. A. and Ovsiannikov V. D.// J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2000. 33 491-505; ibid. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2000. 33 5543-5558.

8. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М. Наука. 1974. 752 с.

9. Манаков Н. Л., Рапопорт Л. П. // Оптика и спектроскопия. 1972 33. 988-992.

10. Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции. Функции Бесселя, функции параболического цилиндра, ортогональные многочлены.. "Наука''. Москва 1966. 295 с.

11. Ovsiannikov V. D., Goossev S. V. // Physica Scripta. 1998. 57. 506-513