

12 89-Ч/162-5

ГОСУДАРСТВЕННЫЙ КОМИТЕТ СССР  
ПО НАРОДНОМУ ОБРАЗОВАНИЮ

МОСКОВСКИЙ ОРДЕНА ТРУДОВОГО КРАСНОГО ЗНАМЕНИ  
ИНЖЕНЕРНО-ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

В. П. Крайнов

МАТРИЧНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ ПЕРЕХОДОВ  
МЕЖДУ ВОЗБУЖДЕННЫМИ СОСТОЯНИЯМИ АТОМОВ

Текст лекций

Л43

Утверждено  
редсоветом института

Москва 1989

ФБ1  
Ч3.2/к1

Крайнов В.П. Матричные элементы переходов между возбужденными состояниями атомов. Текст лекций. М.: Изд. МИФИ, 1989. - 20 с.

Приведены результаты расчетов матричных дипольных элементов между квазиклассическими состояниями атомов. В дискретном спектре фиксируются главные и орбитальные квантовые числа начального и конечного состояний, в то время как для низколежащих состояний непрерывного спектра фиксируются энергии и орбитальные квантовые числа. Обсуждаются сингулярности диагональных дипольных матричных элементов в непрерывном спектре. Аналитические результаты сравниваются с точными расчетами на примере высоковозбужденных состояний атома водорода. Рассматривается влияние квантового дефекта и некулоновских фаз на значения матричных элементов. Результаты могут быть использованы для анализа процессов многофотонной ионизации ридберговских состояний атомов в сильных электромагнитных полях, а также процессов возбуждения этих состояний.



1500331803



Московский  
инженерно-физический  
институт, 1989 г.

Редактор О.А. Сафонова  
Техн. редактор Н.М. Воронцова  
Корректор Г.А. Станкевич

Тем. план 1989 г., поз. Д

Л.-20851 Подписано в печать 3.04.89г.  
Формат 60x84 1/16 Объем 1,25 п.л. Уч.-изд.л. 1  
Тираж 220 экз. Цена 10 коп. Изд. № 055-1 Заказ 662  
Московский инженерно-физический институт. Типография МИФИ.  
115409, Москва, Каширское шоссе, 31

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Квантовый расчет сечений и вероятностей перехода между высоковозбужденными (ридберговскими) состояниями атомов под действием электромагнитного поля сводится к вычислению дипольных матричных элементов перехода. Волновые функции ридберговских состояний сильно осцилируют, поэтому применение численных методов интегрирования затруднено; с ростом квантовых чисел и для состояний непрерывного спектра с малыми энергиями численные методы требуют мощных ЭВМ и больших затрат машинного времени. По этой причине актуальна задача развития приближенных аналитических методов расчета, позволяющих выяснить асимптотическую зависимость дипольных матричных элементов от квантовых чисел начального и конечного состояний перехода.

В высоковозбужденном состоянии электрон в среднем находится далеко от атомного остатка, поэтому в первом приближении его волновую функцию можно считать водородоподобной. Дипольный матричный элемент с кулоновскими волновыми функциями вычисляется аналитически в общем виде: ответ содержит гипергеометрические функции. Однако для переходов между высоковозбужденными состояниями проведение качественных оценок затруднено, поскольку большими оказываются, вообще говоря, все три параметра полной гипергеометрической функции. В зависимости от соотношения между этими параметрами асимптотические разложения гипергеометрических функций имеют весьма разнообразный вид.

Влияние структуры атомного остатка на движение высоковозбужденного электрона, т.е. отклонения от модели водородоподобного атома, можно сравнительно просто учесть методом квантового дефекта [1]. В квазиклассических волновых функциях при этом результативно главное квантовое число  $n$  заменяют на эффективное главное квантовое число  $\bar{n} = n - M_z$ , где величина  $M_z$  называется квантовым дефектом. Значение  $M_z$  быстро убывает с ростом орбитального квантового числа  $l$ , так как при этом уменьшается вероятность нахождения высоковозбужденного атомного электрона в области, занятой атомным остатком. Практически квантовый дефект приходится учитывать только для небольших значений  $l = 0, 1, 2$ .

В настоящей лекции рассмотрены различные приближенные аналитические формулы для радиальных дипольных матричных элементов перехода между высоковоизбужденными атомными состояниями и между состояниями непрерывного спектра с малыми энергиями, которые также являются квазиклассическими. Аналитические формулы имеются практически во всем диапазоне изменений квантовых чисел  $n$ ,  $l$  и  $n'$ ,  $l'$ , области применимости которых к тому же частично перекрываются. Всюду используется атомная система единиц  $e = \hbar = m = 1$ .

## 2. ПРОСТОЙ ПРИМЕР

Детально рассмотрим простой пример радиального дипольного матричного элемента  $\langle n | r | n' \rangle$  дипольного перехода между высоковоизбужденными состояниями атома водорода с большими главными квантовыми числами  $n, n' \gg 1$  и малыми орбитальными квантовыми числами  $l, l \sim 1$ . Будем предполагать также, что состояния не являются слишком близкими друг к другу, т.е.  $n - n' \gg 1$ , но  $n - n' \ll n, n'$ , так что начальная и конечная классические траектории мало отличаются друг от друга.

В этом случае можно воспользоваться принципом соответствия, согласно которому матричный элемент равен компоненте Фурье от соответствующей классической величины (в данном случае – радиальной координаты) как функции времени. Итак, получаем [2]:

$$\langle n | r | n' \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T r(t) \cos \omega t dt, \quad \omega = \frac{n - n'}{n^3}. \quad (1)$$

Здесь  $T = 2\pi n^3$  – период классических колебаний электрона вокруг ядра,  $r(t)$  – классическая радиальная координата как функция времени,  $\omega$  – частота перехода между состояниями.

При  $l=0$  из параметрических уравнений орбиты [3]

$$r = (n \xi)^2 / 2, \quad t = (n \xi)^3 / 6 \quad (2)$$

находим, что

$$r(t) = 6^{2/3} t^{2/3} / 2. \quad (3)$$

(отметим, что в этой зависимости отсутствует  $n$ , т.е. орбита одинакова как для начального, так и для конечного состояний).

Подставляя (3) в (1), приходим к интегралу

$$4 \quad \langle n | r | n' \rangle = \frac{6^{2/3}}{T \omega^{5/3}} \int_0^\infty \psi^{2/3} \cos \psi d\psi. \quad (4)$$

Вследствие  $n - n' \gg 1$  верхний предел интегрирования в (4) можно заменить на бесконечность и окончательно получаем

$$\langle n | r | n' \rangle = \pm \frac{6^{2/3} \Gamma(2/3)}{2\pi\sqrt{3}} \frac{1}{n^3 \omega^{5/3}}. \quad (5)$$

Таким образом, с увеличением частоты перехода радиальный дипольный матричный элемент между состояниями с малыми орбитальными моментами убывает как  $\omega^{-5/3}$ .

В принципе можно теперь отказаться от условия  $n - n' \gg 1$ , считая, что состояния  $n$  и  $n'$  могут быть близки друг к другу. Тогда непосредственное вычисление интеграла в (4) приводит к результату:

$$\langle n | r | n' \rangle = \pm \frac{n^2}{\Delta n} \Gamma'_{\Delta n}(\Delta n), \quad (6)$$

где  $\Delta n = n - n'$ , а  $\Gamma'$  – производная от функции Бесселя по аргументу. При  $\Delta n \gg 1$  выражение (6) переходит в (5), в чем несложно убедиться, используя асимптотические свойства функции Бесселя при большом аргументе и равном ему индексе.

Обратим внимание на трудности, которые имеют место при вычислении интегралов типа (4) на ЭВМ как площади под кривой подынтегральной функции. Подынтегральное выражение в (4) с ростом  $\psi$  увеличивается, и при формальном устремлении верхнего предела к бесконечности получаем расходящийся интеграл. В действительности, нужно предварительно проинтегрировать (4) по частям:

$$\int_0^\infty \psi^{2/3} \cos \psi d\psi = -\frac{2}{3} \int_0^\infty \psi^{-1/3} \sin \psi d\psi \quad (7)$$

и только после этого устремлять верхний предел к бесконечности. Впрочем, и в правой части (7) сходимость является довольно медленной.

Другое обобщение рассматриваемого примера имеет место при отказе от условия  $n - n' \ll n, n'$ . Пусть теперь  $n - n' \sim n, n'$ . Тогда принцип соответствия Гейзенберга (1) становится несправедливым. Однако, исходя из квазиклассических волновых функций начального и конечного состояний, его легко обобщить так, чтобы он оставался справедливым и при  $n - n' \sim n, n'$ :

$$\langle n/\tau/n' \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi T'}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_{\tau}(t) \cos \omega t dt. \quad (8)$$

Здесь  $T$  и  $T'$  - периоды классического движения атомного электрона соответственно в начальном и конечном состояниях, т.е.  $T = 2\pi n^3$  и  $T' = 2\pi n'^3$ . Интеграл в (8) берется по периоду и не зависит от  $n$ ,  $n'$ , определяясь только  $\omega$ , так как зависимость  $\tau(t)$  в (3) не зависит от  $n$ ,  $n'$ . В результате вместо (5) получаем более общий результат:

$$\langle n/\tau/n' \rangle = \pm \frac{6^{2/3} \Gamma(2/3)}{2\pi\sqrt{3}} \frac{1}{\sqrt{(nn')^3 \omega^{5/3}}}. \quad (9)$$

Подобным образом вычисляются радиальные дипольные матричные элементы и в других случаях, и в последующих параграфах лекции изложение будет проведено конспективно, т.е. в основном будут приводиться результаты и условия их применимости.

### 3. ПЕРЕХОДЫ МЕЖДУ БЛИЗКИМИ СВЯЗАННЫМИ СОСТОЯНИЯМИ

В этом пункте предположим, что главные квантовые числа начального и конечного состояний  $n$  и  $n'$  близки друг к другу, т.е. их разность  $\Delta n = |n-n'| < \langle n, n' \rangle$ . В предыдущем пункте была получена формула (6) для матричного элемента, относящаяся к случаю малых орбитальных квантовых чисел  $l$  и  $l' = l \pm 1$  в соответствии с дипольными правилами отбора. Здесь же на  $l$  не будет накладываться никаких ограничений.

Матричный дипольный радиальный элемент в квазиклассическом приближении определяется формулой (1) принципа соответствия Гейзенберга. Однако в этой формуле координата  $\tau(t)$  уже не определяется из (3), а имеет более сложный вид, соответствующий классическому движению атомного электрона по эллиптической орбите. Вычисления матричного элемента были впервые проведены в работе Буреевой [4]:

$$\begin{aligned} \langle nl/\tau/n'l' \rangle = & (nn'/\Delta n) \left\{ \mp \frac{\mathcal{T}'_{\Delta n}}{\Delta n} (\Delta n \mathcal{E}) + \right. \\ & \left. + \sqrt{\mathcal{E}^{-2} - 1} \mathcal{T}_{\Delta n} (\Delta n \mathcal{E}) \right\}, \quad l' = l - 1. \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь  $\mathcal{T}$ ,  $\mathcal{T}'$  - функция Бесселя и ее производная по аргументу,  $\mathcal{E}$  представляет собой эксцентриситет орбиты классического движения электрона, т.е.

$$\mathcal{E} = \sqrt{1 - l^2/n n'} \quad (11)$$

(вместо  $n$  или  $n'$  стоит среднее значение  $\sqrt{n n'}$ , несколько уточняющее результат, так как  $n$  и  $n'$  близки друг к другу). Знаки  $\mp$  в (10) описывают соответственно случаи  $n' > n$  и  $n' < n$ .

Отметим, что матричные элементы (10) особенно велики при малых  $\Delta n$ . При  $\Delta n = 0$  формула (10) неприменима, и ее следует заменить более простым выражением, которое вообще является точным, а не приближенным:

$$\langle nl/\tau/n'l-1 \rangle = -(3/2)n^2 \mathcal{E}. \quad (12)$$

Несколько сложнее обстоит дело в более реалистическом случае, когда квантовые дефекты состояний отличны от нуля. Радиальный дипольный матричный элемент определяется исходной формулой:

$$\langle nl/\tau/n'l-1 \rangle = \int_0^\infty R_{nl}(\tau) R_{n'l-1}(n) \tau^3 d\tau, \quad (13)$$

где  $R_{nl}(\tau)$ ,  $R_{n'l-1}(n)$  - радиальные квазиклассические волновые функции, учитывающие квантовый дефект. Они имеют вид:

$$R_{nl}(\tau) = \frac{a_{nl}}{2\sqrt{\pi}} \cos \left\{ \int_{nl}^2 p_{nl}(\tau') d\tau' - \frac{\pi}{4} \right\}, \quad (14)$$

где радиальный импульс  $p_{nl}(\tau)$  определен соотношением:

$$p_{nl}(\tau) = \left\{ -\frac{1}{\tau^2} + \frac{2}{2} - \frac{(l+1/2)^2}{\tau^2} \right\}^{1/2}, \quad (15)$$

$\nu = n - \mu_l$  - эффективное квантовое главное число,  $\mu_l$  - квантовый дефект. Нормировочный множитель  $a_{nl}$

$$a_{nl} = (2/\pi\nu^3)^{1/2}. \quad (16)$$

Прямое вычисление (13) с волновыми функциями (14) было впервые выполнено в работе Зона и Давыдкина [5]:

$$\langle nl/\tau/n'l-1 \rangle = \frac{\nu'}{\Delta\nu} \left\{ \mp \left[ \frac{\mathcal{T}'_{\Delta\nu}}{\Delta\nu} (\Delta\nu \mathcal{E}) + \right. \right.$$

$$+\pi^{-1}(1-\varepsilon)\sin(\bar{\gamma}\Delta\gamma)\Big] + \sqrt{\varepsilon^2 - 1} \left[ \bar{F}_{\Delta\gamma}(\Delta\gamma\varepsilon) - \right. \\ \left. - (\bar{\gamma}\Delta\gamma)^{-1} \sin(\bar{\gamma}\Delta\gamma) \right] \Big\}. \quad (17)$$

Снова знак "+" относится к случаю  $n' < n$ , а знак "-" к случаю  $n' > n$ . Величина  $\Delta\gamma = |\gamma' - \gamma|$  в данном случае уже не обязана быть целым числом, так что  $\sin(\bar{\gamma}\Delta\gamma)$  отличен от нуля. При нецелых  $\Delta\gamma$  функции  $\bar{F}_{\Delta\gamma}$  называются функциями Ангера и определяются соотношением:

$$\bar{F}_{\Delta\gamma}(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \cos(\Delta\gamma\theta - z\sin\theta) d\theta. \quad (18)$$

При целых  $\Delta\gamma$  интеграл (18) определяет функции Бесселя.

Как уже отмечалось, обычно имеют дело с малыми орбитальными квантовыми числами, так что величина  $x = l/\gamma \ll 1$ . В этом случае громоздкое выражение (17) может быть упрощено:

$$\langle nl/r/n'l-1 \rangle = \frac{\gamma\gamma'}{\Delta\gamma} \left\{ F_0 + xF_1 + \frac{1}{2}x^2F_2 \right\}. \quad (19)$$

Функции  $F_0(\Delta\gamma)$ ,  $F_1(\Delta\gamma)$ ,  $F_2(\Delta\gamma)$  табулированы в таблице, взятой из работы [6] (это — коэффициенты в разложении (17) по степеням малого числа  $x$ ).

$\Delta\gamma$	$F_0$	$F_1$	$F_2$	$\Delta\gamma$	$F_0$	$F_1$	$F_2$
0,05	0,075	-0,003	-0,075	0,95	0,379	-0,448	0,229
0,10	0,148	-0,012	-0,147	1,00	0,325	-0,440	0,321
0,15	0,219	-0,028	-0,214	1,05	0,268	-0,425	0,417
0,20	0,286	-0,048	-0,275	1,10	0,208	-0,404	0,504
0,25	0,349	-0,074	-0,327	1,15	0,148	-0,375	0,581
0,30	0,405	-0,104	-0,368	1,20	0,087	-0,340	0,648
0,35	0,454	-0,137	-0,397	1,25	0,027	-0,298	0,703
0,40	0,496	-0,174	-0,413	1,30	-0,030	-0,252	0,743
0,45	0,529	-0,210	-0,414	1,35	-0,084	-0,202	0,767
0,50	0,553	-0,248	-0,402	1,40	-0,134	-0,148	0,775
0,55	0,568	-0,285	-0,375	1,45	-0,178	-0,092	0,765
0,60	0,574	-0,321	-0,334	1,50	-0,207	-0,036	0,738
0,65	0,571	-0,354	-0,280	1,55	-0,249	0,021	0,694

Продолжение таблицы

$\Delta\gamma$	$F_0$	$F_1$	$F_2$	$\Delta\gamma$	$F_0$	$F_1$	$F_2$
0,70	0,558	-0,383	-0,214	1,60	-0,274	0,077	0,634
0,75	0,537	-0,408	-0,138	1,65	-0,292	0,130	0,560
0,80	0,508	-0,428	-0,054	1,70	-0,303	0,179	0,470
0,85	0,471	-0,441	0,038	1,75	-0,306	0,224	0,369
0,90	0,428	-0,448	0,133				

Из этой таблицы видно, что радиальные дипольные матричные элементы являются знакопеременными величинами, меняя знак при малых орбитальных квантовых числах при  $\Delta\gamma = 1,27$ . Изменения знака происходят и при больших значениях  $\Delta\gamma$ , не указанных в таблице.

Из структуры (17) видно, что из-за наличия осциллирующей зависимости от  $\Delta\gamma$  квантовым дефектом можно пренебречь, когда он мал по сравнению с единицей, а не с главным квантовым числом. Квантовый дефект велик для относительно малых значений орбитального квантового числа. Поэтому разложение (19) имеет довольно общий характер в тех случаях, когда квантовый дефект существенно отличен от нуля.

В работе [7] формула (17) была обобщена на случай, когда квантовые числа  $n$  и  $n'$  не являются достаточно близкими друг к другу. Было показано, что формула (17) остается справедливой при  $n - n' \sim n$ , только под  $\Delta\gamma$  следует понимать

$$\Delta\gamma = \omega(\gamma\gamma')^{3/2}. \quad (20)$$

При  $n - n' \ll n$  из (20) получаем старое определение  $\Delta\gamma = |\gamma - \gamma'|$ . Однако этот результат получен в результате интерполяционной процедуры между известными формулами для  $n - n' \ll n$  (это формула (17)) и  $n - n' \sim n$  (см. ниже).

#### 4. ПРАВИЛО БЕТЕ

Г. Бете [8] сформулировал эмпирическое правило отбора для кулоновских дипольных матричных элементов: при изменении главного квантового числа  $n$  орбитальный момент  $l$  изменяется с подавляющей вероятностью в ту же сторону, что и  $n$ . Исходя из (10), несложно проверить, когда это правило выполняется и по какой причине. Если орбитальный момент  $l$  мал ( $l \sim 1$ ), то вторым слагаемым в правой части (10) можно пренебречь, и

тогда видно, что правило Бете не удовлетворяется, так как оба матричные элементы с  $l' = l \pm 1$  практически равны друг другу. Это видно и из формулы (6).

По мере роста  $l$  справедливость правила Бете улучшается, так как согласно (10) при изменении  $l$  в ту же сторону, что и  $n$ , происходит фактическое сложение двух слагаемых в формуле (10), в то время как при изменении  $l$  в противоположную сторону по отношению к изменению  $n$  имеет место фактическое вычитание этих слагаемых друг из друга. Особенно сильна компенсация при  $l > n^{2/3}$ .

Насколько выполняется правило Бете для переходов с небольшим изменением главного квантового числа  $n$ , можно судить из результатов работы [9]. В этой работе правило Бете было обобщено следующим образом: в процессе дипольного перехода главное квантовое число  $n$  изменяется преимущественно в том же направлении, что и  $l$ , и на ту же величину. Иными словами, при фиксированном значении  $n$  матричный элемент  $\langle nl/z/n-1 l-1 \rangle$  заметно больше всех других матричных элементов  $\langle nl/z/n+k l-1 \rangle$  с  $k \neq -1$  почти во всем диапазоне орбитальных квантовых чисел  $l$ , кроме самых малых. В последнем случае преобладающими будут два матричных элемента с  $\Delta n = \pm 1$ . Матричные элементы с  $|\Delta n| \geq 2$  численно заметно меньше.

С качественной точки зрения указанное обобщение правила Бете вытекает из квазиклассических соображений: максимальен матричный элемент перехода без изменения числа узлов радиальной волновой функции — это и есть матричный элемент  $\langle nl/z/n-1 l-1 \rangle$ .

Обобщение правила Бете оказывается очень существенным в проблеме суммирования большого числа матричных элементов при решении задач о многофотонных переходах между атомными состояниями [10].

Что касается собственно правила Бете, то чем больше  $\Delta n$ , тем лучше оно выполняется (если, конечно,  $l > n^{2/3}$ ).

Чтобы понять, насколько точны сами квазиклассические выражения для радиальных матричных элементов, приведенные выше, целесообразно привести следующие поправки к ним по квазиклассическому параметру  $1/n$ . Это было сделано в работе [7]. Исходя из точных формул Гордона для радиальных дипольных матричных элементов [11], содержащих гипергеометрические функции, производилось их асимптотическое разложение. В данном случае гипергеометрические функции фактически сводятся к по-

линомам Якоби, которые при больших  $n$  имеют очень высокий порядок ( $\sim n$ ). Главные члены полиномов Якоби содержатся в конце ряда разложения по степеням аргумента. Если просуммировать ряд, начиная с конца, используя условие  $n \gg 1$ , то оказывается, что в сумме существенно число слагаемых, которое хотя и мало по сравнению с  $n$ , но велико по абсолютной величине, так что сумма сходится к функции Бесселя. В результате из точных формул Гордона можно также получить формулы Буревой (10).

Аналогичным образом в работе [7] была получена поправка следующего порядка в полиномах Якоби, однако она требует гораздо большего объема вычислений. Приведем здесь лишь наиболее простые выражения, которые получаются для переходов между состояниями с  $l'=0$  и  $l=1$ :

$$\begin{aligned} \langle n'0/z/n1 \rangle = & (n^2/4n) \left\{ \pm T'_{\Delta n}(\Delta n) + \right. \\ & \left. + (1/n) [T_{\Delta n}(\Delta n) - \Delta n T'_{\Delta n}(\Delta n)] \right\}. \end{aligned} \quad (21)$$

Знак “-” в этом выражении относится к случаю  $n < n'$ , а знак “+” — к случаю  $n > n'$ . Слагаемое в квадратных скобках (21) представляет собой поправку порядка  $1/n$  к квазиклассическому выражению (6). Эту поправку можно назвать фактором Гаунта для радиальных матричных элементов дипольного перехода с малыми орбитальными квантовыми числами.

Если  $\Delta n \gg 1$ , то поправку в (21) можно учесть, если просто в формуле (6) заменить  $n^2$  на  $n n'$ . Для этого случая понятен фактор  $n n'$ , содержащийся в (10). Однако при  $\Delta n \sim 1$  квазиклассическая поправка в (21) не сводится к такой простой замене, и нужно использовать (21), если возникает необходимость в поправках.

Необходимость в подобных поправках возникает в тех случаях, когда первый порядок квазиклассического приближения приводит к нулевому результату. Например, при расчете динамической поляризуемости высоковозбужденных атомных состояний [12] вклад состояний выше и ниже по энергии, чем рассматриваемое состояние, взаимно компенсирует друг друга. Это утверждение не является случайным, а следует из того, что в классической механике коммутатор координаты и импульса равен нулю, а не единице, как в квантовой механике. Поляризуемость может быть выражена через такой коммутатор (в статическом электрическом поле для атома водорода это сделано в [13]).

## 5. ПЕРЕХОДЫ МЕЖДУ ДАЛЕКИМИ СВЯЗАННЫМИ СОСТОЯНИЯМИ

Результаты п. 3 относились к случаю близких связанных состояний, когда  $\Delta n \ll n$ . Здесь рассмотрим случай далеких друг от друга по энергии связанных квазиклассических состояний, когда  $\Delta n = |n - n'| \sim n, n'$ . Квазиклассические радиальные дипольные матричные элементы в этой области значений параметров были получены в работе [14].

Если  $l \ll n, n'$ , то эти матричные элементы оказываются достаточно большими и равны:

$$\begin{aligned} & \langle nl/z/n'l-1 \rangle = (\ell^2/\pi\sqrt{3}) \omega^{-1}(nn')^{-3/2}. \\ & \left\{ \mp K_{2/3}(\omega\ell^{3/2}) + K_{1/3}(\omega\ell^{5/2}) \right\}. \end{aligned} \quad (22)$$

Здесь обозначено

$$\omega = \left| \frac{1}{2n^2} - \frac{1}{2n'^2} \right| \quad (23)$$

— частота перехода между рассматриваемыми состояниями. Далее,  $K_{2/3}$  и  $K_{1/3}$  — функции Макдональда.

Формула (22) применима и в случае, когда частота перехода реалистического сложного атома не описывается соотношением (23), а берется из численных расчетов или экспериментальных данных. Знак "+" в формуле (22) относится к случаю  $n' < n$ , а знак "-" — к случаю  $n' > n$ .

Формулы (22) и (10) совпадают друг с другом на краях своей применимости, а именно в области  $n \gg \Delta n \gg 1$ . При этом формула (22) принимает вид:

$$\begin{aligned} & \langle nl/z/n'l-1 \rangle = \frac{\ell^2}{\pi\sqrt{3}\Delta n} \left\{ \mp K_{2/3} \left( \frac{\Delta n \ell^3}{3n^3} \right) + \right. \\ & \left. + K_{1/3} \left( \frac{\Delta n \ell^3}{3n^3} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (24)$$

Этот же вид имеет формула (10), если при  $\Delta n \gg 1$  и  $l \ll n$  использовать асимптотическое разложение функций Бесселя через функции Макдональда (или через функции Эйри, с которыми функции  $K_{2/3}$  и  $K_{1/3}$  связаны простыми соотношениями: выражение (24) через функции Эйри получено в работе Берсонса [15]).

Если  $\omega\ell^3 \ll 1$ , т.е.  $\ell \ll \pi^{2/3}$ , то из (22), получаем, как и следовало ожидать, формулу (9).

Если орбитальные квантовые числа достаточно велики, а именно  $l \sim n$ , то матричные элементы становятся экспоненциально малыми. Их аналитические выражения весьма громоздки — они приведены в [16]. Разумеется, это утверждение справедливо лишь для далеких друг от друга состояний, когда  $n - n' \sim n, n'$ . Для близких состояний в соответствии с (10) матричные элементы с ростом  $l$ , хотя и убывают, но медленно.

## 6. ПЕРЕХОДЫ МЕЖДУ СОСТОЯНИЯМИ НЕПРЕРЫВНОГО СПЕКТРА

На первый взгляд, матричные элементы между состояниями непрерывного спектра можно было бы получить из приведенных выше матричных элементов между квазиклассическими состояниями связанных переходов аналитическим продолжением, при котором главное квантовое число  $n$  заменяется на  $i/p$ , где

$p$ -импульс состояния непрерывного спектра. Соответственно заменяется  $n'$  на  $i/p'$ . Считаем, что импульсы  $p$  и  $p'$  малы по сравнению с ридберговским импульсом, т.е.  $p, p' \ll 1$ . Тогда состояния непрерывного спектра также являются квазиклассическими.

Однако так как минимальная разность главных квантовых чисел  $\Delta n$  связанных состояний равна единице, то при таком аналитическом продолжении импульсы состояний непрерывного спектра ограничены неравенством  $p-1-p'-1 \geq 1$ , что при близких значениях  $p$  и  $p'$  сводится к неравенству  $\Delta p = p' - p \geq p^2$ . Следовательно, таким путем нельзя получить матричные элементы свободно-свободных переходов между близкими по энергии состояниями, когда  $\Delta p < p^2$ . Такие матричные элементы следует вычислять непосредственно, что и делается в первой части этой работы [17].

Интересующий нас радиальный дипольный матричный элемент свободно-свободного перехода имеет общий вид, аналогичный (13):

$$\langle p'l'/z/pl \rangle = \int_0^\infty R_{pl}(z) R_{p'l'}(z) z^3 dz. \quad (25)$$

Функции  $R_{pl}(z)$  и  $R_{p'l'}(z)$  представляют собой квазиклассические радиальные волновые функции непрерывного спектра. Предположим, что они нормированы на энергию, так что

$$\int_0^\infty R_{pl}(z) R_{p'l'}(z) z^2 dz = \delta(p^2 - p'^2). \quad (26)$$

Если имеем дело с кулоновским потенциалом, то на основе принципа соответствия Гейзенберга матричный элемент (25) равен компоненте Фурье от координаты соответствующего классического движения электрона:

$$\langle p' l' / z | p l \rangle = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dt \, \varepsilon(t) \cos \{ (E' - E)t - (L' - L)\psi(t) \}. \quad (27)$$

Здесь обозначено

$$\varepsilon(t) = a(\xi \cosh \xi - 1), \quad (28)$$

$$t = a^{3/2} (\xi \sinh \xi - \xi)$$

— координата и время для классического электрона, движущегося по кулоновской траектории. Далее,  $L = l + 1/2$  и  $L' = l' + 1/2$ , а  $a = p_c^{-2}$ , где  $p_c$  — некоторый средний импульс между  $p$  и  $p'$ . Величина

$$\xi = [1 + (L_c p_c)^2]^{1/2} \quad (29)$$

представляет собой эксцентриситет классической орбиты, а  $L_c$  есть некоторое среднее между  $L$  и  $L'$ . Наконец,  $\psi(t)$  представляет собой полярный угол классического движения электрона

$$\psi(t) = L_c \int \frac{dt}{\varepsilon^2(t)}. \quad (30)$$

Выражение (27) справедливо, когда траектории начального и конечного состояний электрона близки друг к другу, т.е.  $\Delta p = p' - p \ll p$ . Здесь рассмотрим более общий случай, когда могут реализовываться и случаи  $\Delta p \gtrsim p, p'$ , причем  $p, p' \ll 1$ , так что состояния  $p$ ,  $p'$  являются квазиклассическими. В таком случае уже нельзя воспользоваться принципом соответствия Гейзенберга, а следует исходить из общей формулы (25), подставляя в нее радиальные квазиклассические волновые функции  $R_{pl}(z)$ ,  $R_{p'l'}(z)$ . Таким образом, рассмотрим также и случай, когда классические траектории начального и конечного движения сильно отличаются друг от друга, оставаясь квазиклассическими.

Ограничимся случаем не слишком больших значений орбитальных квантовых чисел  $l$ ,  $l'$ , так что выполняются условия  $pl \ll 1$ ,  $p'l' \ll 1$ . Таким образом, считаем классические траектории фактически параболическими.

Выше при аналогичном рассмотрении связанных квазиклассических матричных элементов с малыми орбитальными моментами не возникало никаких сингулярностей. Увидим, что для состояний непрерывного спектра при  $\Delta p \rightarrow 0$  возникают сингулярности.

Волновая функция непрерывного спектра  $R_{pl}(z)$  имеет вид:

$$R_{pl}(z) = \frac{1}{2} \left( \frac{2}{\pi p(z)} \right)^{1/2} \cos \left\{ \int_0^z d(p') \left( \frac{\pi}{4} + \delta_l \right) \right\}. \quad (31)$$

Здесь обозначено

$$p(z) = \left( p^2 + \frac{2}{z} \right)^{1/2}. \quad (32)$$

Условие  $pl \ll 1$  позволяет пренебречь центростремительным потенциалом и обратить, таким образом, левую точку поворота в фазовом множителе (31) в нуль. Единственная зависимость от орбитального квантового числа  $l$  возникает в величине  $\delta_l$ , которая представляет собой некулоновскую фазу рассеяния метода квантового дефекта. При этом  $\delta_l = \pi \mu_l$ , где  $\mu_l$  — квантовый дефект квазиклассического состояния с тем же значением  $l$ . Эта зависимость от  $l$  не приводит к каким-либо сингулярностям в матричном элементе.

Случай сильно отличающихся импульсов  $p$  и  $p'$  начального и конечного состояний был рассмотрен в работе [18]. Анализическим продолжением приведенных выше результатов для связанных состояний получаем:

$$\langle p l / z | p' l' \rangle = 0.47 \omega^{-5/3} \cos \left( \Delta_l - \frac{\pi \Delta p}{6 |\Delta p|} \right). \quad (33)$$

Здесь обозначено

$$\omega = \frac{1}{2} p'^2 - \frac{1}{2} p^2 \quad (34)$$

— частота атомного перехода между состояниями непрерывного спектра,  $\Delta_l = \delta_l - \delta_{l'}$  — разность фаз рассеяния ( $\Delta_l = 0$  для кулоновского потенциала). При  $\Delta_l = 0$  выражение (33) может быть получено аналитическим продолжением формулы (9) по указанному выше рецепту.

Обратимся теперь к противоположному предельному случаю близких значений  $p$  и  $p'$ , когда  $\Delta p \ll p, p'$ . Матричный элемент (25) может быть вычислен, подставляя (31) в (25), либо воспользовавшись формулой (27), вытекающей из принципа соответствия Гейзенберга, которая пригодна как раз в данном предельном

случае и не годится для получения (33). Вычисления были проведены в работе [17]. Они аналогичны тем, что выполнялись в работе [5] и работе [19] для состояний дискретного спектра с учетом квантового дефекта. Результат имеет вид:

$$\begin{aligned} \langle p'l/z|p'l' \rangle &= (\pi p)^{-1} (\Delta p)^{-2} \left\{ \cos \Delta_l + \right. \\ &\left. + \int_0^\infty \left( \sinh \frac{x}{2} \right)^{-2} \sin \alpha(x) \sin [\alpha(x) + \Delta_l] dx \right\}. \end{aligned} \quad (35)$$

Здесь обозначено

$$\alpha(x) = \frac{\Delta p}{2p^2} (\sinh x - x). \quad (36)$$

Интеграл в (35) в общем виде может быть вычислен только численно. Результат такого вычисления приведен на рис. 1.

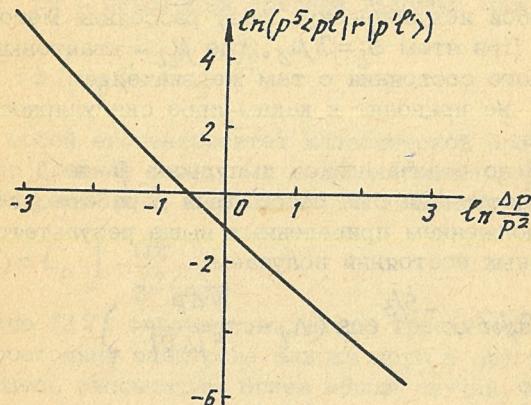


Рис. 1. Зависимость радиального матричного элемента перехода между состояниями непрерывного спектра от разности импульсов  $\Delta p$  начального и конечного состояний (в дважды логарифмическом масштабе)

В пределе близких  $p$  и  $p'$ , когда  $\Delta p \ll p^2$ , интеграл (35) может быть вычислен аналитически. Главный член разложения по  $\Delta p$  имеет вид:

$$\langle p'l/z|p'l' \rangle = \frac{\cos \Delta_l}{2\pi p} \left\{ \frac{1}{(\Delta p + i\gamma)^2} + \frac{1}{(\Delta p - i\gamma)^2} \right\}, \quad (37)$$

т.е. содержит полюс второго порядка. При интегрировании в многофотонных матричных элементах по  $\Delta p$  мнимая часть вклада от (37) сокращается. Это вытекает из вещественности интеграла (25) с вещественными волновыми функциями (31) (на этот факт было впервые указано М.В. Федоровым). В выражении (37)  $\gamma \rightarrow +0$ .

Из (37) следует, что при  $\Delta p \ll p^2$  матричный элемент зависит от частоты перехода  $\omega$  как  $\omega^{-2}$ .

Обратимся к противоположному предельному случаю  $\Delta p \gg p^2$ . Вычисляя интеграл (35) в этом предельном случае, получаем не что иное как выражение (33), где  $\omega = p \Delta p$  — предельный случай частоты перехода при  $\Delta p \ll p, p'$ . Естественно, что при  $\Delta p \sim p$ , когда выражение (35) неприменимо, предельный результат (33) сохраняет свою силу, но с истинным значением (34) частоты перехода  $\omega$ . Так как при этом матричный элемент зависит от частоты перехода как  $\omega^{-5/3}$ , а степень 5/3 слабо отличается от степени 2, то понятно, что график матричного элемента на рис. 1 представляет собой слабо изогнутую кривую.

Универсальные выражения для матричного элемента, справедливые при всех значениях параметров в условиях квазиклассичности начального и конечного состояний, требуют знания соответствующих общих асимптотических выражений для гипергеометрических функций, сводящихся для дипольных матричных элементов в случае атома водорода к полиномам Якоби. В данном случае речь идет о полиномах Якоби  $P_n^{\alpha, \beta}(\cos \theta)$ , когда все три параметра  $n, \alpha, \beta \gg 1$ . Асимптотическое представление для них было получено в работе Гореславского и Крайнова [20]. Ввиду громоздкости оно здесь не приводится.

## 7. ЧИСЛЕННЫЕ РАСЧЕТЫ

В работе [19] предложен достаточно быстрый метод численного расчета радиальных дипольных (а также квадрупольных) матричных элементов между атомными ридберговскими состояниями.

Этот метод близок к процедуре разложения по параметру  $x = l_c/\gamma_c$ , использованному в работе [6]. Радиальный матричный элемент  $\langle \lambda l/z | \lambda' l' \rangle$  представляют в форме:

$$\langle \lambda l/z | \lambda' l' \rangle = 1.5 \gamma_c^2 \sqrt{1-x^2} \langle \lambda l/\phi | \lambda' l' \rangle. \quad (38)$$

Напомним, что  $\gamma_c$  — среднее из  $\gamma$  и  $\gamma'$  (обычно геометрическое среднее), а  $l_c$  — среднее из  $l$  и  $l' = l \pm 1$ . Для функций  $\langle \lambda l/\phi | \lambda' l' \rangle$  используется разложение

$$\langle \Delta l / \varphi | \Delta l' \rangle = g_0(\Delta l) \left\{ 1 + x^2 [1 + \Delta l/2] \right\} + \\ + g_1(\Delta l) (x + x^3) - \frac{\sin(\pi \Delta l)}{\pi \Delta l} x^2, \quad (39)$$

содержащее две функции  $g_0(\Delta l)$  и  $g_1(\Delta l)$ , аналогичные функциям  $F_0(\Delta l)$ ,  $F_1(\Delta l)$ ,  $F_2(\Delta l)$ , приведенным в таблице . Сокращение числа функций произошло просто по той причине, что функции  $g_3(\Delta l)$  и  $g_2(\Delta l)$  при более высоких членах разложения радиального матричного элемента по степеням  $x$  можно сравнительно просто выразить через функции  $g_0(\Delta l)$  и  $g_1(\Delta l)$ . Графики функций  $g_0(\Delta l)$  и  $g_1(\Delta l)$ , взятые из работы [19], представлены на рис. 2. С помощью этих графиков и формул (38 – 39) можно сравнительно просто и быстро вычислить надлежащий радиальный дипольный матричный элемент при произвольном, в том числе и нецелом значении  $\Delta l$ .

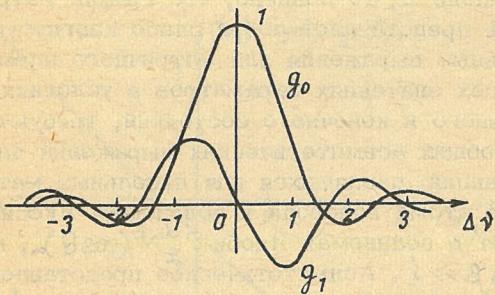


Рис. 2. Функции  $g_0(\Delta l)$  и  $g_1(\Delta l)$ , определяющие радиальный дипольный матричный элемент между состояниями дискретного спектра по формулам (38 – 39)

В работе [19] производилось сравнение вычисленных указанным способом матричных элементов с точными значениями для случая атома водорода. С ростом главного квантового числа ошибка приближенного расчета уменьшалась. Для квантовых чисел в районе 8 – 10 она составляла около 0,1%, в то время как для квантовых чисел в районе 30 она не превышала 0,02% для  $d-f$ -переходов (ошибка увеличивается с ростом орбитального квантового числа  $l$ ).

В работе [21] точные значения радиальных дипольных матричных элементов для атома водорода сравнивались с аналитиче-

скими оценками, приведенными выше. Сначала анализировалась пригодность формулы (10) для случая связанных переходов. Их точность оценивается в 10% для  $\Delta l = 1$  и 50% для  $\Delta l = 10$ , если само главное квантовое число начального состояния  $l = 5 - 10$ . Если же  $l > 25$ , то при всех  $\Delta l = 1 - 10$  точность формулы (10) оказывается весьма высокой (порядка десятых долей процента). При этом точность оказывается слабо зависящей от значения орбитального квантового числа  $l$ .

Если  $\Delta l \sim l$ , то в работе [21] производилась также оценка точности формулы (22). При  $\Delta l = 10$  и  $l = 15 - 75$  аналитический результат совпадает с точным значением в пределах долей процента, если орбитальное квантовое число  $l$  порядка единицы. Если же  $l = 10$ , то расхождение увеличивается до 15%.

В случае переходов между состояниями непрерывного спектра анализировалась точность формулы (35). Для близких по энергии состояний воспроизводится зависимость  $\omega^{-2}$  от частоты перехода, предсказываемая формулой (37). С увеличением  $\omega$  в соответствии с (33) зависимость от частоты переходит в  $\omega^{-5/3}$ . При очень большой частоте  $\omega$ , когда энергия конечного состояния велика по сравнению с энергией начального состояния, возникает зависимость вида  $\omega^{-7/2}$ . Ее можно получить и аналитически [21], считая кисечное состояние плоской волной.

Можно сделать вывод, что в пределах применимости приведенных аналитических формул для радиальных дипольных матричных элементов имеется весьма хорошее согласие с точными значениями, которые можно вычислить для атома водорода. Аналитические формулы имеют весьма различный вид в различных диапазонах квантовых чисел начального и конечного состояний.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Рапопорт Л.П., Зон Б.А., Манаков Н.Л. Теория многофotonных процессов в атомах. М.: Атомиздат, 1978, § 2.3.
2. Мигдал А.Б., Крайнов В.П. Приближенные методы квантовой механики. М.: Наука, 1966, с. 129.
3. Ландау Л.Д., Либшиц Е.М. Механика. М.: Наука, 1988, § 15.
4. Буреева Л.А. Астрономический журнал, 1968, т. 45, с. 1215.
5. Зон Б.А., Давыдкин В.А. Оптика и спектроскопия, 1981, т. 51, с. 25.
6. Давыдкин В.А., Делоне Н.Б., Зон Б.А., Крайнов В.П. Литовский физический журнал, 1980, т. 20, с. 175.

7. Ганцев Р.А., Казакова Н.Ф., Крайнов В.П.//В сб. Химия плазмы, вып. 12; под ред. Б.М. Смирнова. М.: Энергоатомиздат, 1985, с. 96.
8. Бете Г. Квантовая механика. М.: Мир, 1965, с. 195.
9. Делоне Н.Б., Крайнов В.П. Препринт/ФИАН СССР, № 18. М., 1979.
10. Делоне Н.Б., Крайнов В.П. Атом в сильном световом поле. М.: Энергоатомиздат, 1984.
11. Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Квантовая электродинамика. М.: Наука, 1980, § 52.
12. Делоне Н.Б., Крайнов В.П. ЖЭТФ, 1982, т. 83, с. 2016.
13. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М.: Наука, 1974, с. 334.
14. Гореславский С.П., Делоне Н.Б., Крайнов В.П. ЖЭТФ, 1982. т. 82, с. 1789.
15. Берсонс И.Я. ЖЭТФ, 1982, т. 83, с. 1276.
16. Гореславский С.П., Делоне Н.Б., Крайнов В.П. *Journ. Phys. B*, 1982, v. 15, p. 421.
17. Гореславский С.П., Делоне Н.Б., Крайнов В.П. *Journ. Phys. B*, 1989, v. 22, p. 528.
18. Гореславский С.П., Делоне Н.Б., Крайнов В.П. *Journ. Phys. B*, 1983, v. 16, p. 2369.
19. Ошагор В., Picart J., Tran Minh N., Chapelle  
*Journ. Phys. B*, 1988, v. 37, p. 1985.
20. Гореславский С.П., Крайнов В.П.//В сб. Атомные расчеты. Совет по спектроскопии АН СССР, М., 1987.
21. Trippenbach M., Rzazewski K., Fedorov M.V., Kazakov A.E. *Journ. Phys. B*, 1989, v. 22, p. 232.