

УДК 539.184.01

ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ АВТОИОНИЗАЦИОННЫХ УРОВНЕЙ ДВУХЭЛЕКТРОННЫХ АТОМОВ

A. Ю. Матулис и У. И. Сафронова

С использованием функции Грина двухэлектронной системы рассмотрена энергия и ширина автоионизационных уровней в рамках двух порядков теории возмущений. Показано, что в высших порядках существуют диаграммы, вклады которых расходятся при малой ширине уровня. Проведено частичное суммирование этих диаграмм. В качестве иллюстрации метода рассмотрено несколько автоионизационных уровней атома Не.

Введение

В экспериментах по рассеянию электронов на ионах гелия, фотоионизации, а также ионной бомбардировке нейтральных атомов гелия было установлено существование нескольких серий автоионизационных уровней [1–4]. Эти уровни играют немаловажную роль при определении свойств астрофизической и лабораторной плазмы [5, 6]. Поэтому автоионизационным уровням в последнее время посвящено немало теоретических работ [7–12]. В работе [7] дана классификация и качественно исследованы общие свойства. В работах [8, 9] проводятся вычисления при помощи суперпозиции водородных функций, а в работах [10–12] используются так называемые «сильно связанные» уравнения.

В настоящей работе развиваются диаграммные методы теории возмущений применительно к автоионизационным уровням двухэлектронных систем. Это представляет интерес двоякого рода. Во-первых, методы теории возмущений были успешно применены к расчетам стационарных основных и возбужденных состояний атомов [13–15], и можно надеяться, что они окажутся практически полезными и в расчетах автоионизационных уровней; во-вторых, построение ряда теории возмущений для автоионизационного уровня представляет теоретический интерес, как пример использования методики квантовых гриновских функций. Чтобы показать основные отличительные черты теории возмущений для квазистационарного уровня, в первом разделе подробно определяется энергия и ширина уровня $2s^2 \ ^1S$ с точностью до двух порядков теории возмущений. Во втором разделе исследуются высшие порядки ряда, выделяется класс диаграмм, вклады которых преобладают при малых ширинах уровней, проводится необходимая перестройка ряда, чтобы исключить эти диаграммы. В конце раздела кратко сформулированы правила составления диаграмм и их вкладов для перестроенного ряда теории возмущений. В третьем разделе приведены численные результаты для некоторых автоионизационных уровней атома гелия: $2s^2 \ ^1S$; $2s2p \ ^1, \ ^3P$; $2p^2 \ ^1S, \ ^3P, \ ^1D$.

1. Вклады диаграмм двух нижних порядков ряда

Энергия двухэлектронной системы определяется как полюс функции Грина, определенной на комплексной энергетической плоскости, которую, следуя работе [16], представим в следующем виде:

$$G^A(z) = \frac{1}{z - E_0^A - M^A(z)}. \quad (1)$$

Здесь символом A обозначена совокупность квантовых чисел, характеризующих состояние, т. е. конфигурация $n_1 l_1 n_2 l_2$, терм $2s+1L$ и другие квантовые числа, если такие имеются. $E_0^A = \epsilon_{n_1 l_1} + \epsilon_{n_2 l_2}$ — невозмущенная энергия, определенная как сумма невозмущенных одноэлектронных энергий. Символом $M^A(z)$ обозначена сумма вкладов от диаграмм так называемого M -оператора (содержащего диаграммы без особенных разрезов) [16]. Таким образом, точная энергия системы E^A определяется из уравнения

$$E^A - E_0^A - M^A(E^A) = 0. \quad (2)$$

Будем строить теорию возмущений на водородных функциях вторичного квантования.

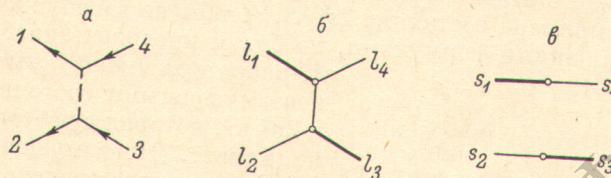


Рис. 1. Диаграммные элементы.

а — V -вертекс, б — угловой аналог V -вертекса, в — спиновый аналог.

В качестве вакуума выберем состояние атома без электронов. Тогда в каждом порядке будем иметь по одной диаграмме из последовательно соединенных V -вертексов, показанных на рис. 1, а (цифрами для краткости обозначены совокупности одноэлектронных квантовых чисел $1 \equiv n_1, l_1, m_1, s_1$).

Не детализируя правил составления вкладов от диаграмм, напомним, что каждому разрезу между вертексами сопоставляется энергетический знаменатель $\epsilon_{n'_1 l'_1} + \epsilon_{n'_2 l'_2} - z$, где $\epsilon_{n'_1 l'_1}$ и $\epsilon_{n'_2 l'_2}$ — энергии электронных линий, пересекающих разрез справа налево, а каждому V -вертексу (рис. 1 а) сопоставляется произведение радиального интеграла

$$\begin{aligned} & \frac{1}{Z} R_k(n_1 l_1 n_4 l_4; n_2 l_2 n_3 l_3) = \\ & = \frac{1}{Z} \int_0^\infty dr \int_0^\infty dr' \frac{r^k}{r^{k+1}} P(n_1 l_1 | r) P(n_4 l_4 | r') \times \\ & \quad \times P(n_2 l_2 | r') P(n_3 l_3 | r') \end{aligned} \quad (3)$$

и приведенных матричных элементов оператора сферической функции [16]

$$(l_1 \parallel C^{(k)} \parallel l_4) (l_2 \parallel C^{(k)} \parallel l_3).$$

Символом $P(nl|r)$ обозначена радиальная часть водородной одноэлектронной функции вторичного квантования, определяемая из уравнения

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \epsilon_{nl} \right] P(nl|r) = 0. \quad (4)$$

Мы будем выражать энергию в атомных единицах, поделенных на квадрат заряда ядра Z . Каждой диаграмме, кроме того, сопоставляются две матрицы преобразования, угловая и спиновая, диаграммы которых получаются заменой всех V -вертексов в динамической диаграмме их угловыми и спиновыми аналогами (рис. 1, б и в соответственно) и присоединением угловых и спиновых «обкладок», которые изображены на рис. 2, а и б. Угловой и спиновой аналоги V -вертекса и «обкладки» являются обобщенными коэффициентами Клебша—Гордана, а матрицы преобразования

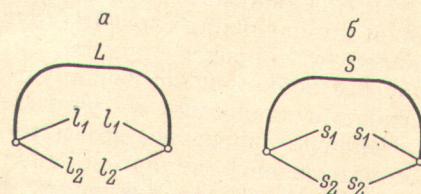


Рис. 2. Диаграммные «обкладки».

а — угловая, б — спиновая.

выражаются через известные $3nj$ -коэффициенты [17]. В дальнейшем мы будем рисовать лишь динамические диаграммы.

M -оператор должен быть диагонализирован между вырожденными невозмущенными двухэлектронными состояниями, если они характеризуются одинаковыми термами. Это будет учтено при проведении конкретных вычислений.

Автоионизационным называется уровень, энергия которого больше первого ионизационного потенциала атома, т. е. энергии основного состояния положительного иона. Поэтому всегда имеется состояние из непрерывного спектра, энергия которого равняется энергии рассматриваемого автоионизационного уровня. Чтобы проиллюстрировать возникающие в связи с этим особенности ряда теории возмущений, рассмотрим в качестве примера состояние $2s^2 1S$. Чтобы не загромождать настоящий раздел излишними формулами, не будем проводить диагонализацию

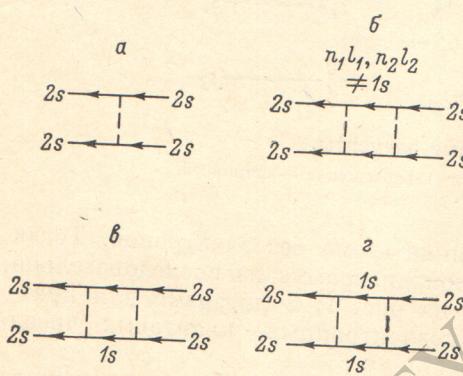


Рис. 3. Диаграммы M -оператора.
а — первый порядок; б, в, г — второй порядок.

M -оператора между вырожденными невозмущенными состояниями $2s^2 1S$ и $2p^2 1S$, которая существенно ничего не меняет. Невозмущенная энергия $2s^2 1S$ состояния равняется $E_0 = 2\epsilon_{2s} = -\frac{1}{4}$. Диаграмма первого порядка изображена на рис. 3, а. Ее вклад равен

$$M_1 = \frac{1}{Z} R_0 (2s2s; 2s2s) \quad (5)$$

(для краткости опускаем символ $A = 2s^2 1S$).

Во втором порядке удобно вместо одной диаграммы рисовать три (рис. 3, б, в, г), вклады которых имеют различные аналитические свойства.

Здесь отдельно выделена диаграмма «в», одна промежуточная линия которой принадлежит слою $1s$ (другая линия произвольная: она может принадлежать также и слою $1s$). Вклад диаграммы «в» берется с противоположным знаком и компенсирует вклад с промежуточным состоянием $1s^2$, которое в диаграмме «в» учитывается дважды.

Вклады диаграммы «б» и «г» [будем обозначать их $M_{2s}(z)$ и $M_{2s}(z)$ соответственно] являются аналитическими функциями в окрестности точки $z = E_0$, и, ограничиваясь двумя порядками теории возмущений при решении уравнения (2), могут быть заменены на $M_{2b}(E_0)$ и $M_{2g}(E_0)$ (т. е. так же, как и при расчетах энергии стационарного состояния). Вклад диаграммы «в» представим в виде суммы дискретной и непрерывной частей

$$M_{2s}(z) = D(z) + C(z), \quad (6)$$

$$D(z) = -\frac{2}{Z^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{R_0^2(2s1s; 2sns)}{\epsilon_{ns} + \epsilon_{1s} - z}, \quad (7)$$

$$C(z) = -\frac{2}{Z^2} \int_0^{\infty} dk \frac{R_0^2(2s1s; 2sks)}{\frac{1}{2}k^2 + \epsilon_{1s} - z}. \quad (8)$$

Функция $D(z)$ аналитична в окрестности $z = E_0$ и, согласно сказанному выше, может быть заменена на $D(E_0)$. Функция $C(z)$ определена в комплексной плоскости z с разрезом вдоль действительной оси от $\epsilon_{1s} = -\frac{1}{2}$

до ∞ . Следовательно, весь второй порядок $M_2(z)$, а также и функция Грина $G(z)$ определены в комплексной плоскости с тем же разрезом. Стационарным состояниям системы соответствуют полюса функции Грина на действительной оси, а автоионизационным (т. е. квазистационарным) состояниям соответствуют полюса на аналитическом продолжении с верхнего берега разреза в нижнюю полуплоскость, причем мнимая часть полюса $\Gamma = -\text{Im}E$ называется шириной уровня и обратно пропорциональна времени жизни квазистационарного состояния (ср., например [18]).

Подставляя вклады от диаграмм в уравнение (2), ограничиваясь случаем малой ширины уровня и преобразуя интеграл (8) с использованием формулы

$$\lim_{\alpha \rightarrow +0} \frac{1}{x - i\alpha} = \mathcal{P} \frac{1}{x} + i\pi\delta(x), \quad (9)$$

получаем решение в следующем виде:

$$E = E_0 + \frac{1}{Z} R_0(2s2s; 2r2s) + M_{26}(E_0) + M_{2s}(E_0) + D(E_0) - \frac{2}{Z^2} P \int_0^\infty \frac{du}{\sqrt{2u}} \frac{R_0^2(2s1s; 2sks)|_{k=\sqrt{2u}}}{u + \varepsilon_{1s} - E_0}, \quad (10)$$

$$\Gamma = \frac{2\pi}{Z^2} \frac{1}{k} R_0^2(2s1s; 2sks)|_{k=\sqrt{\frac{1}{2}}}. \quad (11)$$

Следует отметить, что выражение (10) формально совпадает с суммой двух порядков энергии для стационарного состояния (единственное отличие, что интегралы по непрерывному спектру следует понимать в смысле главного значения), ширина уровня (11) равняется, как и должно быть, полной вероятности распада состояния $2s^2$ под действием межэлектронного взаимодействия, рассчитанной в первом борновском приближении. Действительно, согласно «золотому» правилу Ферми, вероятность распада равняется произведению 2π , квадрата матричного элемента $\frac{1}{Z^2} R_0^2(2s1s; 2sks)|_{k=\sqrt{\frac{1}{2}}}$ и плотности конечных состояний $\rho = \left(\frac{d\varepsilon_k}{dk}\right)^{-1} = \frac{1}{k}$.

2. Учет высших порядков и перестройка ряда

В высших порядках ряда для M -оператора также отдельно выделим диаграммы с промежуточными линиями $1s$. В третьем порядке встречается диаграмма, изображенная на рис. 4, *a*, непрерывная часть вклада которой логарифмически расходится при $\text{Re } z > -\frac{1}{2}$ и $\text{Im } z \rightarrow 0$. Ма-

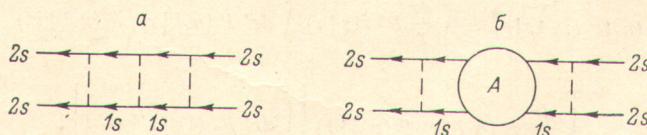


Рис. 4. Диаграммы высших порядков.

a — расходящаяся, *б* — нерасходящаяся.

тематически эта расходимость обусловлена наличием нулей на действительной оси в энергетических знаменателях, соответствующих двум разрезам между вертексами, и логарифмической расходимостью радиального интеграла $R_0(1s1s; k_1sk_2s)$, при $k_1 \rightarrow k_2$. Вклад аналогичной диаграммы с несингулярным блоком *A*, включенным вместо радиального интеграла,

(рис. 4, б), не расходится. Следует отметить, что при расчете энергии стационарного состояния вклад диаграммы, показанной на рис. 4, а, не расходится, поскольку в этом случае нет нулей знаменателей и двойное интегрирование по k сглаживает сингулярность радиального интеграла. Нетрудно установить, что в высших порядках ряда расходящимися будут вклады диаграмм, полученных путем включения произвольного количества V -вертексов, изображенных на рис. 5, а, в две промежуточные

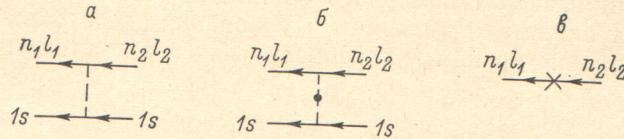


Рис. 5. Преобразование V -вертекса.
а — V -вертекс, б — регулярная часть, в — сингулярная часть.

линии любой диаграммы, одна из которых принадлежит слою $1s$. Физический смысл указанной необходимости заключается в следующем. Когда один электрон переходит в состояние $1s$, второй электрон может перейти в реальное состояние непрерывного спектра, причем этот электрон будет чувствовать не только поле ядра, но и поле электрона $1s$. Благодаря дальнодействию кулоновских сил, это поле не может быть учтено по теории возмущений.

Вклады этих расходящихся диаграмм важны при малых ширинах уровней и должны быть просуммированы. Иначе говоря, каждые две

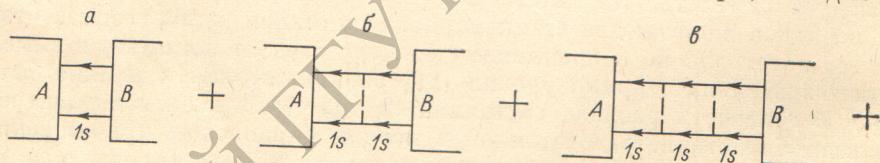


Рис. 6. Сумма расходящихся диаграмм высших порядков.

промежуточные линии, одна из которых принадлежит слою $1s$, должны быть «одеты», как показано на рис. 6. Это суммирование, однако, не является необходимым. Достаточно суммировать диаграммы не с полными радиальными интегралами $R_0 (1s1s; n_1 l n_2 l)$, а только с сингулярными частями этих интегралов $R (n_1 l; n_2 l)$, которые определим следующим образом:

$$R_0 (n_1 l n_2 l; 1s1s) = \bar{R}_0 (n_1 l n_2 l; 1s1s) + R (n_1 l; n_2 l), \quad (12)$$

где

$$\begin{aligned} \bar{R}_0 (n_1 l n_2 l; 1s1s) &= \int_0^\infty \frac{dr}{r} P^2 (1s | r) \int_0^r dr' P (n_1 l | r') P (n_2 l | r') + \\ &+ \int_0^\infty \frac{dr}{r} P (n_1 l | r) P (n_2 l | r) \left\{ \int_0^r dr' P^2 (1s | r') - 1 \right\}, \end{aligned} \quad (13)$$

$$R (n_1 l; n_2 l) = \int_0^\infty \frac{dr}{r} P (n_1 l | r) P (n_2 l | r). \quad (14)$$

Сопоставим регулярной части радиального интеграла $\bar{R}_0 (n_1 l n_2 l; 1s1s)$ графический элемент, показанный на рис. 5, б, а сингулярной части $R (n_1 l; n_2 l)$ — графический элемент, показанный на рис. 5, в. Тогда расходящимися будут лишь диаграммы с включенными элементами, пока-

занными на рис. 5, в в промежуточную линию, идущую рядом с линией $1s$. Сумму диаграмм, показанных на рис. 6, преобразуем в сумму диаграмм, показанных на рис. 7, а, причем в этой сумме уже нет расходящихся при $\text{Re } z > -\frac{1}{2}$ и $\text{Im } z \rightarrow 0$ диаграмм. Утолщенной линии соответствует сумма диаграмм, показанная на рис. 7, б. Именно, это суммирование и осуществляет перестройку ряда, исключающее расходящиеся диаграммы.

Проведем суммирование, изображенное на рис. 7, б, переходя в координатное представление. Для этого интегрирование по r в радиальных интегралах, соответствующих вертексам, к которым примыкает рассматриваемая линия, будем проводить после суммирования по квантовым

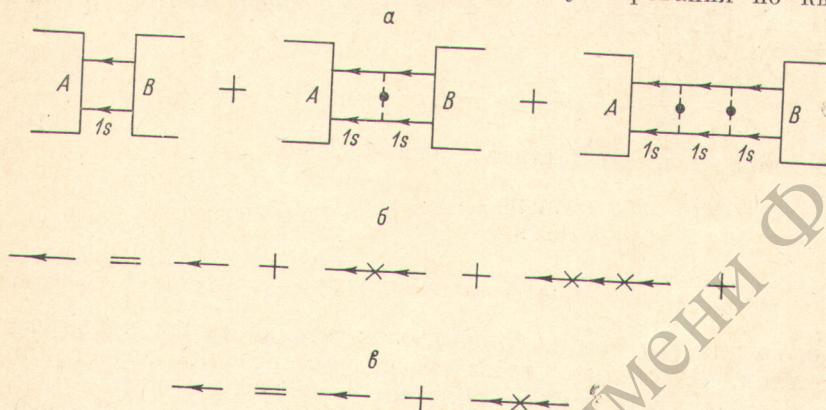


Рис. 7. Перестройка суммы расходящихся диаграмм ряда теории возмущений.
а — перестроенный ряд, б — определение «одетой» (утолщенной) линии, в — уравнение для определения утолщенной линии.

числам этой линии. Концам рассматриваемой линии сопоставим радиальные функции $P(nl|r)$. Тогда каждой линии, идущей рядом с линией $1s$, будет соответствовать выражение

$$G_l(r_1, r_2 | z + \frac{1}{2}) = \sum_n \frac{P(nl | r_1) P(nl | r_2)}{\varepsilon_{nl} - \frac{1}{2} - r}. \quad (15)$$

Знак суммы означает суммирование по дискретному и интегрирование по непрерывному спектру. Нетрудно убедиться, что это есть Фурье-образ функции Грина одноэлектронного уравнения (4). Действительно, используя уравнение (4), а также полноту системы радиальных однозадачных функций, получаем

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr_1^2} - \frac{1}{r_1} + \frac{l(l+1)}{2r_1^2} - \frac{1}{2} - z \right] G_l(r_1, r_2 | z + \frac{1}{2}) = \\ & = \sum_n P(nl | r_1) P(nl | r_2) = \delta(r_1 - r_2). \end{aligned} \quad (16)$$

Суммирование диаграмм рис. 7, б проведем при помощи уравнения, изображенного на рис. 7, в. Ему соответствует интегральное уравнение

$$\begin{aligned} \tilde{G}_l(r_1, r_2 | z + \frac{1}{2}) &= G_l(r_1, r_2 | z + \frac{1}{2}) - \\ & - \frac{1}{Z} \int_0^\infty dr \frac{1}{r} G_l(r_1, r | z + \frac{1}{2}) \tilde{G}_l(r, r_2 | z + \frac{1}{2}), \end{aligned} \quad (17)$$

где функция Грина $\tilde{G}_l(r_1, r_2 | z + \frac{1}{2})$ соответствует утолщенной линии.

Используя уравнение (16), преобразуем (17) в дифференциальное уравнение

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr_1^2} - \left(1 - \frac{1}{Z} \right) \frac{1}{r_1} + \frac{l(l+1)}{2r_1^2} - \frac{1}{2} - z \right] \tilde{G}_l \left(r_1, r_2 | z + \frac{1}{2} \right) = \delta(r_1 - r_2). \quad (18)$$

По аналогии с выражением (15) решение уравнения (18) может быть представлено в виде

$$\tilde{G}_l \left(r_1, r_2 | z + \frac{1}{2} \right) = \sum_n \frac{\tilde{P}(nl | r_1) \tilde{P}(nl | r_2)}{\tilde{\varepsilon}_{nl} - \frac{1}{2} - z}, \quad (19)$$

где радиальная функция $\tilde{P}(nl | r)$ и одноэлектронная энергия $\tilde{\varepsilon}_{nl}$ определяются из уравнения

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{Z-1}{Z} \frac{1}{z} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \tilde{\varepsilon}_{nl} \right] \tilde{P}(nl | r) = 0. \quad (20)$$

Изменением масштаба нетрудно показать, что

$$\tilde{\varepsilon}_{nl} = \left(1 - \frac{1}{Z} \right)^2 \varepsilon_{nl}, \quad (21)$$

$$\tilde{P}(nl | r) = P(nl | \frac{Z-1}{Z} r). \quad (22)$$

Из уравнения (20) наглядно виден физический смысл проведенного суммирования. А именно, проведенное суммирование перенормирует энергию и волновую функцию электрона, движущегося в поле положительного иона, т. е. в поле ядра, экранированном другим электроном.

Теперь, сопоставляя каждой утолщенной линии выражение (19) и проводя интегрирование по r , можем сформулировать окончательные правила составления вкладов от диаграмм перестроенного ряда теории возмущений для M -оператора.

1. Отдельно рисуются диаграммы, в которых одна из промежуточных линий принадлежит слову $1s$, причем линия, идущая рядом с линией $1s$, рисуется утолщенной.

2. Утолщенной линии сопоставляется энергия $\tilde{\varepsilon}_{nl}$.

3. В радиальном интеграле, соответствующем вертексу с утолщенной линией nl , функция $P(nl | r)$ меняется на $\tilde{P}(nl | r)$.

4. В утолщенную и $1s$ линии вставляются вертексы, показанные на рис. 5, б.

Далее, ограничиваясь определенными приближениями для M -оператора, следует решить уравнение (2), аналогично решению, проведенному в первом разделе. В частности, если ограничиться двумя порядками перестроенного ряда для M -оператора, то решение выражается теми же самыми формулами (10) и (11) с вышеуказанный заменой волновых функций и энергий, соответствующих утолщенной линии диаграммы 2, в.

Проведенная перестройка ряда не ограничивается случаем, когда энергия автоионизационного уровня превышает лишь энергию основного состояния положительного иона. Она может быть легко обобщена на тот случай, когда энергия автоионизационного уровня превышает также и энергии нескольких возбужденных состояний положительного иона. В этом случае, как нетрудно видеть, должны быть «одеты» линии, идущие рядом со всеми теми линиями, энергии которых ниже энергии автоионизационного уровня.

3. Автоионизационные уровни атома Не

В качестве иллюстрации предлагаемого метода приведем численные результаты расчета нескольких автоионизационных уровней атома Не: $2s^2 \ ^1S$; $2s2p \ ^1,^3P$; $2p^2 \ ^1S$, 3P , 1D в рамках двух порядков теории возмуще-

Таблица 1
Вклады от диаграмм первого и второго порядка (ат. ед.)

Конфигурация	Терм	ZE_1	Z^2E_2	$Z^2 \frac{1}{\pi\sqrt{2}} \Gamma$	$Z^2 \tilde{E}_2$	$Z^2 \frac{1}{\pi\sqrt{2}} \tilde{\Gamma}$
$2s^2$	1S	0.150390625	-0.037125	0.000560	-0.039980	0.000836
$2s2p$	1P	0.19140625	-0.096871	0.000552	-0.097692	0.000232
	3P	0.1328125	-0.027688	0.000037	-0.027183	0.000284
$2p^2$	3P	0.1640625	-0.039390	0	-0.039390	0
	1D	0.18515625	-0.084259	0.001017	-0.085808	0.001388
	1S	0.216796875	-0.110532	0.000424	-0.112582	0.000489
Недиагональные элементы $2s^2, 2p^2$	1S	0.0507437	-0.030278	-0.000487	-0.026956	-0.000399

Таблица 2
Энергии и ширины автоионизационных уровней Не (эв)

Конфигурация	Терм	E	\tilde{E}	$E^{[10]}$	E^{exp}	Γ	$\tilde{\Gamma}$	$\Gamma^{[10]}$
$2s^2$	1S	57.83	57.68	57.86	57.9 [2]	0.1132	0.1238	0.1406
$2s2p$	1P	59.69	59.72	60.27	60.135 [1]	0.0667	0.0280	0.04375
	3P	58.38	58.39	58.36	58.5 [2]	0.0045	0.0343	0.0106
$2p^2$	3P	59.76	59.76	—		0	0	—
	1D	59.69	59.65	60.025		0.1229	0.1678	0.0732
	1S	61.95	61.96	62.81		0.0057	0.0001	0.0188

ний. Нулевая энергия для всех термов одинакова и равна $E_0 = -\frac{1}{4}$. Выражения первого, второго порядков и ширины уровней E_1, E_2, Γ , а также соответствующие им перенормированные величины $\tilde{E}_2, \tilde{\Gamma}$ вычислялись на ЭВМ по ранее разработанной методике [13]. Поскольку имеются два повторяющиеся терма 1S в конфигурациях $2s^2$ и $2p^2$, то M -оператор был диагонализирован в первом порядке. Результаты представлены в табл. 1 и 2. В табл. 1 приведены результаты отдельных порядков ряда в атомных единицах. Сравнивая E_2 с \tilde{E}_2 (второй и четвертый столбцы) и Γ с $\tilde{\Gamma}$ (третий и пятый столбцы), видим, что проведенное частичное суммирование мало меняет энергию (это еще более отчетливо видно из сравнения полных энергий E и \tilde{E}_2), но сильно меняет ширины уровней. Причем та ширина уровня, которая меньше, меняется значительнее. Это подтверждает утверждение, что выбранный класс суммируемых диаграмм важен именно при малых ширинах уровня. Тот факт, что энергия не очень чувствительна к частичным суммированиям диаграмм высших порядков ряда, согласуется с результатами других работ [13, 14], где такие суммирования проведены для стационарных состояний. Это, по-видимому, указывает на то, что в ряду для энергии все диаграммы одинаково важны. В табл. 2 приведены окончательные результаты. Энергия отсчитана от энергии основного состояния. Для сравнения приведены результаты работы [10] (столбцы третий и седьмой), а также экспериментальные результаты для энергии [1, 2] (четвертый столбец). Сравнивая, можно заключить, что два порядка ряда теории возмущений для энергии по точности не уступают методу «сильно связанных» уравнений. Сравнивая же с результатами работ [13, 14],

можно заключить, что для автоионизационных уровней теория возмущений дает примерно такую точность, как и для стационарных уровней. Для ширин уровней имеется лишь одно экспериментальное значение $\Gamma(2s2p, ^1P) = 0.038 \pm 0.004$. Сравнивая приведенные в табл. 2 значения Γ , $\bar{\Gamma}$, а также $\Gamma^{[10]}$, видим, что здесь наблюдается большой разброс. Это указывает на необходимость более точных расчетов. В том числе, по-видимому, некоторые результаты следует ожидать и от анализа высших порядков ряда теории возмущений.

Авторы благодарны А. Н. Ивановой и Л. Н. Лабзовскому за полезные дискуссии и интерес к работе.

Литература

- [1] R. Madden, K. Colding. *Astrophys. J.*, **141**, 364, 1965; *Phys. Rev. Letts.*, **10**, 516, 1963.
- [2] J. A. Simpson, G. E. Chamberlain, S. R. Mielczarek. *Phys. Rev.*, **139**, A1039, 1965; *J. Opt. Soc. Am.*, **54**, 269, 1964.
- [3] S. M. Silverman, E. N. Lassettre. *J. Chem. Phys.*, **40**, 1265, 1964.
- [4] M. E. Rudd. *Phys. Rev., Letts.*, **15**, 580, 1965.
- [5] A. Burgess. *Astrophys. J.*, **139**, 776, 1964.
- [6] И. Л. Бейгман, Л. А. Вайнштейн, Р. А. Сюняев. *УФН*, **95**, 267, 1968.
- [7] J. W. Cooper, V. Fano, F. Prats. *Phys. Rev. Letts.*, **10**, 518, 1963.
- [8] P. L. Altic, E. N. Mooge. *Phys. Rev. Letts.*, **15**, 100, 1965.
- [9] L. Lipsky, A. Russek. *Phys. Rev.*, **142**, 59, 1966.
- [10] P. G. Burke, D. O. McVicar. *Proc. Phys. Soc. (London)*, **86**, 989, 1965.
- [11] J. H. Masek. *Phys. Rev.*, **146**, 50, 1966.
- [12] P. L. Altic, E. N. Mooge. *Proc. Phys. Soc. (London)*, **92**, 853, 1967.
- [13] У. И. Сафронова, А. Н. Иванова, В. В. Толмачев. *Лит. физ. сб.*, **7**, 303, 1967; *ТЭХ*, **8**, 110, 1968.
- [14] H. P. Kelly. *Phys. Rev.*, **131**, 684, 1963; **136**, B896, 1964.
- [15] А. Ю. Матулис, А. А. Бандзайтис. *Лит. физ. сб.*, **6**, 497, 1966.
- [16] А. Ю. Матулис, Э. П. Нашленас, А. А. Бандзайтис. *Лит. физ. сб.*, **5**, 289, 1965.
- [17] А. П. Юцис, А. А. Бандзайтис. *Теория момента количества движения в квантовой механике*. Изд. «Минтис», Вильнюс, 1965.
- [18] Н. Гугенгольц. *Квантовая теория систем многих тел*. Изд. «Мир», М., 1967.

Поступило в Редакцию 25 марта 1969 г.