

СИЛЫ ОСЦИЛЛЯТОРОВ В СЛУЧАЕ НЕЛОКАЛЬНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ

Т. К. Ребане, А. И. Разгонов, А. Г. Петрашень
и М. Н. Адамов

Исследуются различные представления силы осциллятора, а также формулы сумм сил осцилляторов для нелокальных потенциалов. Нелокальность потенциала приводит к изменению связей между представлениями сил осцилляторов, а также к изменению значений сумм сил осцилляторов по сравнению со случаем локального потенциала. Общая теория проиллюстрирована на примере расчетов сил осцилляторов и их сумм для атомов щелочных металлов с применением нелокального потенциала Саймонса. Результаты показывают, что при используемой параметризации потенциала Саймонса наилучшие значения сил осцилляторов интенсивных линий дает «смешанное» представление, и лишь в виде исключения — представление через дипольный момент перехода.

Введение

В современной теории атомов, молекул и твердого тела нашли широкое применение разнообразные эффективные гамильтонианы [1, 2], содержащие так называемые псевдопотенциалы. В методе псевдопотенциала оператор потенциальной энергии, как правило, нелокален и может быть представлен в виде

$$V = U + \mathcal{H}. \quad (1)$$

Здесь U — локальный оператор умножения на некоторую заданную функцию $u(\xi)$, а \mathcal{H} — интегральный оператор с ядром $K(\xi, \xi')$. Через ξ обозначена совокупность динамических переменных систем. Действие оператора \mathcal{H} на волновую функцию Ψ определяется формулой

$$\mathcal{H}\Psi(\xi) = \int K(\xi, \xi') \Psi(\xi') d\xi'. \quad (2)$$

Из эрмитовости V следует, что функция $U(\xi)$ вещественна и что ядро оператора \mathcal{H} обладает свойством симметрии $K(\xi, \xi') = K(\xi', \xi)^*$.

Пусть L — некоторый квантовомеханический оператор. Нелокальность потенциальной энергии приводит к тому, что выражение для коммутатора $[H, L]$, составленного с нелокальным гамильтонианом

$$H = T + V, \quad (3)$$

содержит добавочное слагаемое $[\mathcal{H}, L]$ по сравнению со случаем локального потенциала (когда $V=U$). Поэтому разнообразные формулы, доказываемые с помощью перестановочных соотношений для локальных операторов энергии, вообще говоря, не будут справедливыми для нелокальных операторов. Хорошо известно, что различные эквивалентные формы представления сил осцилляторов, а также формулы для спектральных сумм сил осцилляторов основываются на использовании коммутаторов вида $[H, L]$ и выведены для локальных гамильтонианов. Для нелокальных потенциалов эти формулы неверны. Поэтому различные представления сил осцилляторов (в форме «дипольного момента», «скорости» и т. д.), эквивалентные для систем с локальными потенциалами, отнюдь не эк-

вивалентны при нелокальных потенциалах. При использовании последних встает важная для практических расчетов задача оптимального выбора представления силы осциллятора, дающего наилучшее согласие с опытом.

Взвешенные по энергиям переходов спектральные суммы сил осцилляторов [3, 4]

$$S_A^{(k)} = \sum_B f_{AB} (\omega_{BA})^k \quad (4)$$

играют важную роль в ряде задач — в расчете поляризуемости, тормозной способности, дисперсионных сил и др. [Мы используем атомную систему единиц $e = \hbar = m = 1$; в формуле (4) f_{AB} — сила осциллятора дипольного перехода системы из стационарного состояния A в стационарное состояние B , E_A и E_B — энергии системы в этих состояниях, $\omega_{BA} = E_B - E_A$]. Для локальных потенциалов выполняется известное правило суммы Томаса—Рейхе—Куна

$$S_A^{(0)} = \sum_B f_{AB} = N, \quad (5)$$

где N — число электронов в системе. Однако для нелокальных потенциалов это правило необязательно выполняется, так как оно основано на использовании коммутатора $[H, z]$, где $z = \sum_{j=1}^N z_j$. Аналогично обстоит дело с перенесением на случай нелокального потенциала других правил сумм (для величин $S_A^{(k)}$ с $k \geq 1$), выведенных для локальных потенциалов.

С учетом интенсивного развития методов, использующих нелокальные гамильтонианы, ясно, что исследование свойств сил осцилляторов и их сумм для систем, описываемых нелокальными потенциалами, представляет не только теоретический, но и вполне конкретный практический интерес.

Настоящая статья посвящена сопоставлению различных представлений сил осцилляторов для локального и нелокального потенциала, а также формул, выражающих суммы сил осцилляторов для этих потенциалов. Результаты применяются к силам осцилляторов переходов в атомах щелочных металлов, вычисляемых для нелокального потенциала Саймонса [5–11].

§ 1. Различные представления силы осциллятора

Сила осциллятора дипольного перехода $A \rightarrow B$ для N -электронной системы может быть представлена различными формулами [3, 4]. В случае, когда система описывается локальным потенциалом, имеем

$$f_{AB; z} (I) = 2\omega_{BA} |\langle A | z | B \rangle|^2, \quad (6)$$

$$f_{AB; z} (II) = 2\omega_{BA}^{-1} |\langle A | v_z | B \rangle|^2, \quad (7)$$

$$f_{AB; z} (III) = 2\omega_{BA}^{-3} |\langle A | w_z | B \rangle|^2. \quad (8)$$

Здесь $v_z = -i \sum_{j=1}^N \frac{\partial}{\partial z_j}$ и $w_z = - \sum_{j=1}^N \frac{\partial U}{\partial z_j}$, электрический вектор света предполагается параллельным оси z . Формулы (6)–(8) полностью эквивалентны, если расчеты производятся с точными собственными функциями локального оператора энергии $H = T + U$, удовлетворяющими уравнениям

$$H\Psi_A = E_A\Psi_A, \quad H\Psi_B = E_B\Psi_B. \quad (9)$$

Эквивалентность формул (6)–(8) можно доказать с помощью справедливого для точных собственных функций Ψ_A и Ψ_B соотношения

$$\omega_{BA} \langle B | L | A \rangle = \langle B | [H, L] | A \rangle. \quad (10)$$

¹ В литературе приводятся обычно силы осцилляторов, получаемые усреднением по поляризациям света: $f_{AB} = \frac{1}{3} (f_{AB; x} + f_{AB; y} + f_{AB; z})$.

Первая из формул (6)–(8) представляет силу осциллятора в форме «дипольного момента», вторая — в форме «скорости», а третья — в форме «ускорения». Отметим еще «смешанное» представление силы осциллятора, занимающее промежуточное положение между формами «дипольного момента» и «скорости». С помощью (10) можно для локальных потенциалов показать, что (6) и (7) эквивалентны следующему представлению силы осциллятора:

$$f_{AB; z}(\text{IV}) = i(\langle A | v_z | B \rangle \langle B | z | A \rangle - \langle A | z | B \rangle \langle B | v_z | A \rangle) \quad (11)$$

или

$$f_{AB; z}(\text{V}) = \text{sign}(\omega_{BA}) \sqrt{f_{AB; z}(\text{I}) f_{AB; z}(\text{II})}. \quad (12)$$

«Смешанное» представление силы осциллятора обладает двумя свойствами, полезными при использовании приближенных собственных функций. Во-первых, формула (11) обеспечивает выполнение правила суммы (5) для любой полной системы ортонормированных волновых функций (независимо от локального или нелокального характера потенциала). Во-вторых, формулы (11) и (12) инвариантны относительно одинакового искажения масштабов координат в функциях Ψ_A и Ψ_B (это следует из того, что z и v_z являются однородными операторами степеней $+1$ и -1 соответственно). При этом коэффициенты искажения масштаба вдоль координатных осей x, y, z могут быть разными.

В случае многоэлектронных систем собственные функции соответствующих локальных гамильтонианов $H = T + U$ из-за сложной структуры потенциальной энергии U удается найти только приближенно. Для приближенных собственных функций результаты расчета зависят от выбора формы представления силы осциллятора. Этот вопрос исследовался рядом авторов [12–14], которые пришли к выводу, что близость значений сил осцилляторов, вычисленных по формулам (6)–(8), служит некоторым критерием точности приближенных собственных функций, и сделали рекомендации для конкретного выбора формы представления силы осциллятора. Так, в работе [5] для приближенных собственных функций, рассчитанных вариационным методом из условия стационарности средней энергии, рекомендуется формула (7), а для функций, ведущих себя асимптотически правильно на больших расстояниях, формула (6).

Пусть теперь оператор потенциальной энергии нелокален и описывается формулой (1), а Ψ_A и Ψ_B — точные собственные функции нелокального гамильтониана $H = T + V$. Формулы (6), (7), (8) и (11) теперь уже не эквивалентны. Исходя из формулы (6) и преобразуя ее с помощью (10) положив $L = z$, получим

$$f_{AB; z}(\text{I}) = 2\omega_{BA} |\langle A | z | B \rangle|^2 = 2\omega_{BA}^{-1} |\langle A | \tilde{v}_z | B \rangle|^2. \quad (13)$$

Здесь введено обозначение $\tilde{v}_z = i[H, z] = v_z + i[\mathcal{H}, z]$. В данном случае $f_{AB; z}(\text{I}) \neq f_{AB; z}(\text{II})$, так как \tilde{v}_z содержит коммутатор $[\mathcal{H}, z]$. Аналогично, если исходить из формулы (7) и положить в (10) $L = v_z$, то получим

$$f_{AB; z}(\text{II}) = 2\omega_{BA}^{-1} |\langle A | v_z | B \rangle|^2 = 2\omega_{BA}^{-3} |\langle A | \tilde{w}_z | B \rangle|^2, \quad (14)$$

$\tilde{w}_z = i[H, v_z] = w_z + i[\mathcal{H}, v_z]$. Правая часть равенства (14) отличается от $f_{AB; z}(\text{III})$ (8) наличием в \tilde{w}_z коммутатора $[\mathcal{H}, v_z]$. Отметим еще два удобных для расчетов сил осцилляторов соотношения

$$f_{AB; z}(\text{I}) = f_{AB; z}(\text{IV}) + \langle A | z | B \rangle \langle B | [\mathcal{H}, z] | A \rangle - \langle A | [\mathcal{H}, z] | B \rangle \langle B | z | A \rangle, \quad (15)$$

$$f_{AB; z}(\text{II}) = f_{AB; z}(\text{IV}) + \langle A | [\mathcal{H}, z] | B \rangle \langle B | z | A \rangle - \langle A | z | B \rangle \langle B | [\mathcal{H}, z] | A \rangle - 2\omega_{BA}^{-1} \langle A | [\mathcal{H}, z] | B \rangle \langle B | [\mathcal{H}, z] | A \rangle. \quad (16)$$

В заключение этого параграфа рассмотрим некоторые суммы сил осцилляторов для нелокального потенциала. Как уже упоминалось, правило суммы Томаса—Рейхе—Куна остается в силе, если использовать представление f (IV) (11) для силы осцилляторов

$$S_{A; z}^{(0)}(\text{IV}) = N. \quad (17)$$

Однако в других представлениях сил осцилляторов их сумма может в случае нелокального потенциала не равняться числу электронов N . Так, из (15) получаем сумму сил осцилляторов в представлении f (I) (6)

$$S_{A; z}^{(0)}(I) = N + \langle A | [z, [\mathcal{K}, z]] | A \rangle. \quad (18)$$

Аналогично, из (16) следует

$$S_{A; z}^{(0)}(II) = N - \langle A | [z, [\mathcal{K}, z]] | A \rangle - 2 \sum_B \omega_{BA}^{-1} \langle A | [\mathcal{K}, z] | B \rangle \langle B | [\mathcal{K}, z] | A \rangle. \quad (19)$$

Среди сумм $S_{A; z}^{(k)}$ с $k \neq 0$ легко вычисляется сумма с $k=1$, если использовать представление силы осциллятора в форме «скорости». Для нелокального потенциала эта сумма равна

$$S_{A; z}^{(1)}(II) = 2 \langle A | \tilde{v}_z^2 | A \rangle. \quad (20)$$

Отметим, что приведенные здесь формулы (13)—(20), справедливые для нелокального потенциала, являются естественным обобщением аналогичных формул для локального потенциала и переходят в них, когда $V=U$, т. е. при $\mathcal{K}=0$.

§ 2. Случай потенциала Саймонса

Модельный потенциал Саймонса [5-11] нашел в последние годы широкое применение в расчетах различных атомных свойств [15, 16-23]. Он представляет собой обобщение известного локального потенциала Кратцера—Фюэса [24-26]. Согласно Саймонсу, движение валентного электрона в атоме описывается нелокальным потенциалом

$$V(r) = -\frac{Z_0}{r} + \mathcal{K}, \quad (21)$$

где Z_0 — заряд остова, а \mathcal{K} — интегральный оператор с ядром

$$k(r, r') = \frac{\delta(r-r')}{(rr')^2} \sum_{l, m} B_l Y_{lm}(\theta, \varphi) Y_{lm}^*(\theta', \varphi'). \quad (22)$$

Из (21) и (22) видно, что в потенциале Саймонса электрон с орбитальным моментом l испытывает кулоновское взаимодействие с атомным остовом, и, кроме того, действие добавочного потенциала B_l/r^2 . При произвольных вещественных параметрах B_l уравнение Шредингера с потенциалом (21) допускает простое аналитическое решение (подразумевается, что величины B_l не принимают слишком больших по модулю отрицательных значений: иначе возможно «падение» электрона на ядро; в практических расчетах реальных атомов это условие выполняется). Если все B_l одинаковы, то потенциал Саймонса переходит в локальный потенциал Кратцера—Фюэса [24-26]

$$V(r) |_{B_l=B} = -\frac{Z_0}{r} + \frac{B}{r^2}. \quad (23)$$

Состояния валентного электрона в модели Саймонса классифицируются по орбитальному квантовому числу l , магнитному квантовому числу m и по радиальному квантовому числу n_r . Последнее определяет число узлов у радиальной части волновой функции и принимает для каждого заданного l значения $n_r=0, 1, 2, \dots$

Так как параметры B_l можно подбирать так, чтобы потенциал (21) правильно описывал энергии ионизации рассматриваемых состояний валентного электрона, то метод Саймонса обладает достаточной гибкостью. Оказывается даже, что условие совпадения теоретического и экспериментального значений энергии E оставляет некоторую свободу в выборе параметров B_l (связанную с тем, что при модельном описании состояний валентных электронов можно произвольно выбирать радиальное квантовое число n_r для электрона с заданным l и с заданной экспериментальной энергией по-

низации). В соответствии с этим в серии работ Саймонса были предложены различные «рецепты» определения величины B_l . В работах [5-8] считается, что для всякого фиксированного l низшее состояние валентного электрона описывается безузловой радиальной волновой функцией, а в работах [9-11] развивается подход, основанный на таком выборе радиального квантового числа n_r , при котором модуль параметра B_l для состояния с заданными l и E становится минимально возможным (более подробно о выборе параметров B_l см. [11]). Существенно, однако, что в ряде своих работ Саймонс предлагает использовать значения B_l , которые не являются постоянными для системы уровней с данным l , а изменяются при переходе от одного уровня к другому. Хотя такой подход и повышает гибкость «подгонки» параметров, он не вполне удовлетворителен с теоретической точки зрения, так как приводит к нарушению условия ортогональности собственных функций оператора энергии с одинаковыми m и l . По этой причине мы здесь будем считать, что параметры B_l в (22) не зависят от энергии. Для их конкретного расчета мы приняли рецепт работы [5] — условие, чтобы для низшего уровня энергии валентного электрона с каждым заданным l было $n_r=0$. Рассчитанные с учетом этого условия значения параметров B_l для s -, p - и d -состояний щелочных металлов приведены в табл. 1.

Таблица 1

Параметры потенциала Саймонса для s -, p - и d - состояний атомов щелочных металлов

Атом	B_0	B_1	B_2
Li	0.46745	-0.06009	-0.00342
Na	0.51018	0.18269	-0.02559
K	0.68201	0.37896	-0.35487
Rb	0.72610	0.47625	0.55598
Cs	0.81240	0.59260	-1.01912

Мы вычислили для потенциала Саймонса силы осцилляторов ряда переходов в атомах щелочных металлов, пользуясь представлением «дипольного момента» f (I), «смешанным» представлением f (V) и представлением «скорости» f (II). Результаты расчетов приведены в табл. 2 вместе с имеющимися экспериментальными данными. Из этой таблицы видно, что расчеты с точными собственными функциями для потенциала Саймонса сильно зависят от формы представления силы осциллятора. При этом наилучшее согласие с опытом дает либо представление «дипольного момента» (интенсивные переходы в атоме лития), либо «смешанное» представление (интенсивные переходы в атомах натрия, калия, рубидия и цезия). Представление «скорости», как правило, плохо согласуется с опытом (за исключением нескольких слабых линий).

Из анализа формул (11) и (12) следует, что для нелокального потенциала результаты вычисления силы осциллятора в двух вариантах «смешанного» представления — IV и V — совпадают по абсолютной величине, но могут различаться знаком. Такое различие в знаке мы обнаружили для переходов $2s \rightarrow 4p$ (Li) и $6p \rightarrow 6d$, $6p \rightarrow 7d$ (Cs). В то же время из (12) ясно, что форма V гарантирует правильный знак силы осциллятора; именно поэтому в табл. 2 смешанное представление силы осциллятора дано для случая f (V).

Согласно теории, изложенной в § 1, «смешанное» представление сил осцилляторов гарантирует выполнение правила суммы: $S_{A; z}^{(0)}(IV) = N - 1$. В то же время в табл. 2 для переходов $4p \rightarrow 3d$ (K) и $5p \rightarrow 4d$ (Rb) значения f (V) превосходят единицу. Объяснение легко найти, если учесть, что в сумму сил осцилляторов вносят значительные отрицательные вклады переходы $4p \rightarrow 4s$ (в K) и $5p \rightarrow 5s$ (в Rb).

Таблица 2

Силы осцилляторов ряда переходов в атомах щелочных металлов, вычисленные с применением потенциала Саймонса

Атом	Переход	n	$f(I)$	$f(V)$	$f(II)$	$f_{\text{эксп.}}^{[27-30]}$
Li	$2s \rightarrow np$	2	0.6131	0.9966	1.6201	0.753
		3	0.0003	0.0026	0.0221	0.0055
		4	0.0000	0.0004	0.0042	0.0048
	$2p \rightarrow nd$	3	0.6667	0.6544	0.6424	0.667
		4	0.1267	0.1239	0.1213	0.125
		5	0.0474	0.0463	0.0453	0.047
Na	$3p \rightarrow np$	3	0.7515	0.9632	1.2346	0.982
		4	0.0137	0.0228	0.0381	0.0142
		5	0.0023	0.0045	0.0086	0.0022
	$3p \rightarrow nd$	3	0.7632	0.8229	0.8872	0.82
		4	0.0967	0.1065	0.1173	0.106
		5	0.0316	0.0351	0.0391	0.0331
K	$4s \rightarrow np$	4	0.7736	0.9756	1.2303	1.027
		5	0.0084	0.0149	0.0263	0.0091
		6	0.0010	0.0023	0.0052	0.0009
	$4p \rightarrow nd$	3	0.7346	1.0205	1.4177	0.90
		4	0.0308	0.0523	0.0889	0.00037
		5	0.0069	0.0129	0.0241	0.0028
Rb	$5s \rightarrow np$	5	0.8071	0.9704	1.1668	1.01
		6	0.0118	0.0180	0.0275	
		7	0.0017	0.0031	0.0055	
	$5p \rightarrow nd$	4	0.6390	1.0955	1.8781	
		5	0.0054	0.0183	0.0620	
		6	0.0004	0.0026	0.0145	
Cs	$6s \rightarrow np$	6	0.8281	0.9721	1.1411	1.09
		7	0.0114	0.0166	0.0245	
		8	0.0016	0.0027	0.0046	
	$6p \rightarrow nd$	5	0.3038	1.1381	4.2625	
		6	0.0252	0.0161	0.0103	
		7	0.0091	0.0037	0.0015	

Обратимся теперь к сумме сил осцилляторов для модельного потенциала Саймонса. Из (18) с учетом (21) и (22) получаем для переходов из состояния $n_r l m$

$$S_{n_r l m; z}^{(0)}(I) = 1 + 2 \left[\frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+1)(2l+3)} B_{l+1} - \frac{2l(l+1) - 2m^2 - 1}{(2l-1)(2l+3)} B_l + \frac{l^2 - m^2}{(2l-1)(2l+1)} B_{l-1} \right]. \quad (24)$$

Отсюда для усредненных сил осцилляторов вытекает правило суммы

$$S_{n_r l}^{(0)}(I) = 1 + \frac{2}{3} \left[\frac{l+1}{2l+1} B_{l+1} - B_l + \frac{l}{2l+1} B_{l-1} \right]. \quad (25)$$

Нетрудно вычислить также так называемые частные суммы сил осцилляторов, соответствующие переходам $l \rightarrow l+1$ и $l \rightarrow l-1$. В случае нелокального потенциала Саймонса для таких сумм имеем

$$S_{n_r l}^{(0) l+1}(I) = \frac{l+1}{3(2l+1)} [2l+3 + 2(B_{l+1} - B_l)], \quad (26)$$

$$S_{n_r l}^{(0) l-1}(I) = -\frac{l}{3(2l+1)} [2l-1 + 2(B_l - B_{l-1})]. \quad (27)$$

Если $B_{l-1} = B_l = B_{l+1}$, то правые части формул (24)–(27) вообще не зависят от параметров Саймонса и выполняются правила сумм, хорошо известные для локальных потенциалов (см., например, § 61 монографии [3]).

Таблица 3
Сумма сил осцилляторов для атома Na,
вычисленная с применением потенциала Саймонса

n	l	l'	Численное суммирование			Точное значение
			$S^{(0)}(I)$	$S^{(0)}(IV)$	$S^{(0)}(II)$	$S_{nl}^{(0)l'}(I)$
3	0		0.7694	0.9943	1.2891	0.7816
4	0		0.7721	0.9892	1.2415	0.7816
5	0		0.7696	0.9839	1.2204	0.7816
3	1	2	0.9292	1.0066	1.0906	1.0485
3	1	0	-0.0527	-0.1260	-0.2191	-0.0383
3	1		0.8765	0.8806	0.8715	0.9802
4	1	2	0.8917	0.9710	1.0462	1.0185
4	1	0	-0.0562	-0.1294	-0.2140	-0.0383
4	1		0.8355	0.8416	0.8322	0.9802

В табл. 3 для атома натрия приведены рассчитанные с потенциалом Саймонса суммы $S^{(0)}$ сил осцилляторов 11 переходов $nl \rightarrow n'l'$, где $n = 3$ или 4 и $l = 0$ или 1. Расчет на ЭВМ показал, что дальнейшее увеличение числа слагаемых n' в суммах сил осцилляторов мало влияет на результат. Поэтому численно рассчитанные суммы 11 сил осцилляторов довольно близки к полному вкладу дискретного спектра. Остающееся расхождение между прямо вычисленной суммой и теоретическим ее значением обусловлено главным образом сплошным спектром. Из таблицы видно, что для переходов $s-p$ вклад сплошного спектра в сумму сил осцилляторов составляет лишь около 1%, но для $p-d$ -переходов он достигает уже 10%. [Эти выводы основаны на сопоставлении теоретических значений сумм $S_{nl}^{(0)l'}(I)$ с результатами прямого суммирования сил осцилляторов в форме $f(I)$. К аналогичному выводу приводит рассмотрение суммы сил осцилляторов в форме $f(IV)$, точное теоретическое значение которой равно единице.]

§ 3. Выводы

1. Результаты настоящей работы показывают, что для нелокальных потенциалов величины сил осцилляторов существенно зависят от выбора формы их представления: формы $f(I)$, $f(II)$, $f(III)$ и $f(IV)$ неэквивалентны даже при использовании точных собственных функций оператора энергии.

2. Суммы сил осцилляторов для нелокальных потенциалов также зависят от формы представления силы осциллятора и необязательно удовлетворяют известным правилам сумм. Исключение составляет «смешанное» представление силы осциллятора $f(IV)$, гарантирующее выполнение правила суммы Томаса—Рейхе—Куна.

3. Численные расчеты сил осцилляторов для щелочных металлов с использованием потенциала Саймонса показали, что наилучшее согласие с опытом для интенсивных переходов дает «смешанное» представление силы осциллятора (Na, K, Rb, Cs), и лишь иногда (Li) — «дипольное» представление.

4. В расчетах обычной и мнимочастотной динамических поляризуемостей атомов с использованием потенциала Саймонса наиболее целесообразен выбор «смешанного» представления силы осциллятора, обеспечивающий удовлетворительную аппроксимацию сил осцилляторов индивидуальных переходов и гарантирующий точную асимптотику поляризуемости при высоких частотах.

5. В расчетах интенсивностей оптических переходов, обычных и многочастотных поляризуемостей, а также других оптических свойств атомно-молекулярных систем в методе нелокальных модельных потенциалов необходимо исследование вопроса оптимального выбора формы представления силы осциллятора для каждого конкретного модельного потенциала.

Литература

- [1] М. И. Петрашень, И. В. Абаренков, А. А. Березин, Р. А. Эварестов. В сб.: Проблемы теоретической физики, 208. Изд. ЛГУ, Л., 1974.
- [2] I. V. Abarenkov, I. Heine. *Phil. Mag.*, **12**, 529, 1965.
- [3] Г. Бете, Э. Солпитер. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. ГИФМЛ, М., 1960.
- [4] J. O. Hirschfelder, W. V. Brown, S. T. Epstein. *Adv. Quant. Chem.*, **1**, 256, 1964.
- [5] G. Simons. *J. Chem. Phys.*, **55**, 756, 1971.
- [6] G. Simons. *Chem. Phys. Lett.*, **12**, 404, 1971.
- [7] G. Simons. *Chem. Phys. Lett.*, **18**, 315, 1973.
- [8] G. Simons, A. N. Bloch. *Phys. Rev.*, **B7**, 2754, 1973.
- [9] G. Simons. *J. Chem. Phys.*, **60**, 645, 1974.
- [10] I. Martin, G. Simons. *J. Chem. Phys.*, **62**, 4799, 1975.
- [11] I. Martin, G. Simons. *Mol. Phys.*, **32**, 1017, 1976.
- [12] S. Chandrasekhar. *Astrophys. J.*, **102**, 223, 1945.
- [13] М. Г. Веселов. *Вестн. ЛГУ*, № 8, 181, 1953.
- [14] D. R. Bates, R. T. S. Darling, S. C. Hawe, A. L. Stewart. *Proc. Phys. Soc. (London)*, **67**, 633, 1954.
- [15] Л. П. Рапопорт, Б. А. Зон, Н. Л. Мананов. Теория многофотонных процессов в атомах. Атомиздат, М., 1978.
- [16] S. A. Adelman, A. Szabo. *J. Chem. Phys.*, **58**, 687, 1973.
- [17] И. В. Авилова, Л. И. Подлубный. *Опт. и спектр.*, **33**, 1036, 1979.
- [18] А. Г. Петрашень, Т. К. Ребане. *Вестн. ЛГУ*, № 10, 22, 1977.
- [19] А. Г. Петрашень, Т. К. Ребане. *Опт. и спектр.*, **44**, 851, 1978.
- [20] И. В. Авилова, Л. И. Подлубный. *Опт. и спектр.*, **44**, 875, 1978.
- [21] М. Н. Адамов, А. И. Разгонов, А. В. Тулуб. *Вестн. ЛГУ*, № 10, 17, 1978.
- [22] П. Ф. Груздев, А. И. Шерстюк. *Опт. и спектр.*, **40**, 617, 1976.
- [23] G. Lamm, A. Szabo, S. A. Adelman. *Phys. Rev.*, **A17**, 238, 1978.
- [24] A. Kratzer. *Zs. Phys.*, **3**, 289, 1920.
- [25] E. Fues. *Ann. Phys.*, **20**, 367, 1929.
- [26] С. Э. Фриш. Оптические спектры атомов. ГИФМЛ, М.—Л., 1963.
- [27] W. L. Wiese, M. W. Smith, B. M. Glennon. *Atomic transition probabilities*, vol. 1, NBS, 1966.
- [28] W. L. Wiese, M. W. Smith, B. M. Miles. *Atomic transition probabilities*, vol. 2, NBS, 1969.
- [29] J. K. Link. *J. Opt. Soc. Am.*, **56**, 1195, 1966.
- [30] J. D. Feichtner, J. H. Gallagher, M. Mizushima. *Phys. Rev.*, **164**, 44, 1967.

Поступило в Редакцию 16 ноября 1978 г.