

УДК 539.184.5

РАДИАЦИОННЫЕ И ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ
РИДБЕРГОВСКИХ СОСТОЯНИЙ АТОМОВ. II

В. А. Давыдкин и Б. А. Зон

Используя аналитические выражения для дипольных матричных элементов, полученных в первой части работы, рассчитаны скалярная и тензорная поляризуемости s -, p -, d -состояний щелочных атомов, начиная с основного до состояний с главным квантовым числом $n=100$. Получено удовлетворительное согласие с экспериментальными данными.

Высоковозбужденные состояния атомов исследовались в последнее время в большом числе теоретических и экспериментальных работ [1, 2]. В работе [3] нами были получены аналитические выражения и таблицы для вычисления вероятностей радиационных переходов между высоковозбужденными состояниями атомов на основе квазиклассического приближения в методе квантового дефекта (ВКБ—МКД-приближение). В данной статье полученные выражения используются для расчета поляризуемостей ридберговских состояний щелочных атомов. В работе, где это особо не оговорено, используется атомная система единиц.

Квадратичный эффект Штарка для состояний $|nLJM\rangle$, где J — полный момент, учитывающий тонкое расщепление уровней, M — его проекция на направление электрического поля F , определяется выражением [4]

$$\Delta E_{nLJM} = -\frac{1}{2} \left[\alpha_0 + \alpha_2 \frac{3M^2 - J(J+1)}{J(2J-1)} \right] F^2, \quad (1)$$

где α_0 — скалярная поляризуемость, определяющая сдвиг центра тяжести расщепленного уровня, α_2 — тензорная поляризуемость, определяющая относительное расщепление магнитных подуровней.

Предполагая LS -связь, после отделения угловых частей можно представить скалярную и тензорную поляризуемости в виде

$$\begin{aligned} \alpha_0(n, L, J) &= -\frac{2}{3} \sum_{J'L'} (2J'+1) \left\{ \begin{matrix} L & J & \frac{1}{2} \\ J' & L' & 1 \end{matrix} \right\} L_{>} D_n(LJ; L'J'), \\ \alpha_2(n, L, J) &= -2 \sqrt{\frac{10J(2J-1)(2J+1)}{3(J+1)(2J+3)}} \sum_{J'L'} (-1)^{J+J'} (2J'+1) L_{>} \times \\ &\times \left\{ \begin{matrix} L & J & \frac{1}{2} \\ J' & L' & 1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} J & J' & 1 \\ 1 & 2 & J \end{matrix} \right\} D_n(LJ; L'J'), \quad L_{>} = \max(L, L'), \end{aligned} \quad (2)$$

$$D_n(LJ, L'J') = \sum_{n'} \frac{|\langle nL | r | n'L' \rangle|^2}{E_{nLJ} - E_{n'L'J'}}, \quad (3)$$

где $\left\{ \begin{matrix} \dots \\ \dots \end{matrix} \right\}$ — $6J$ -символ.

При расчете составного матричного элемента (3) для высоковозбужденных состояний основная трудность состоит в вычислении радиального интеграла от быстро осциллирующих функций. Для этих вычислений мы использовали

аналитические выражения, полученные в первой части этой работы в ВКБ—МКБ-приближении [3].

В сумме, определяющей величину D_n , учитывались переходы, в которых n' изменяется от $n-3$ до $n+3$, если состояния из указанного интервала свободны.

Значения энергий уровней, определяемых соотношением

$$E_{nLJ} = -\frac{Z^2}{2\nu^2}, \quad \nu = n - \mu_{LJ}, \quad (4)$$

взяты из таблиц [5]. При расчете α_0 и α_2 для атомов К, Rb, Cs учитывалась тонкая структура уровней, поэтому в формуле (4) квантовый дефект μ зависит также и от полного момента J . В атомах Li и Na учет тонкой структуры практически не изменяет значений α_0 и α_2 . Энергии для больших n экстраполировались по значениям квантового дефекта, который для высоковозбужденных состояний ($n \geq 10$) практически не зависит от n .

Из величин α_0 и α_2 выделим масштабный множитель

$$\alpha_{0,2}(nLJ) = \nu^7 c_{0,2}(nLJ).$$

Значения коэффициентов $c_{0,2}$ для s -, p -, d -состояний щелочных атомов с главным квантовым числом $n \leq 100$ приведены в табл. 1—5. Для атома Li d -состояния обладают близким к нулю квантовым дефектом, поэтому для этих состояний

Таблица 1

Атом Li

n	$c_0(n, S)$	$c_0(n, P)$	$c_2(n, P)$	n	$c_0(n, S)$	$c_0(n, P)$	$c_2(n, P)$
2	6.223	1.206	-0.021	16	3.034	21.30	-1.442
3	5.231	15.67	-1.236	18	2.973	21.31	-1.438
4	4.530	18.48	-1.411	20	2.924	21.31	-1.432
5	4.102	19.74	-1.476	30	2.777	21.29	-1.422
6	3.820	20.23	-1.484	40	2.704	21.26	-1.415
7	3.611	20.71	-1.506	50	2.660	21.24	-1.410
8	3.468	20.79	-1.490	60	2.630	21.22	-1.406
9	3.420	21.80	-1.477	70	2.610	21.20	-1.402
10	3.362	21.09	-1.458	80	2.594	21.29	-1.399
12	3.219	21.22	-1.454	90	2.582	21.18	-1.397
14	3.113	21.27	-1.448	100	2.572	21.18	-1.395

Таблица 2

Атом Na

n	$c_0(nS)$	$c_0(nP)$	$c_2(nP)$	$c_0(nD)$	$c_2(nD)$	n	$c_0(nS)$	$c_0(nP)$	$c_2(nP)$	$c_0(nD)$	$c_2(nD)$
3	5.460	2.048	-0.4780	3.191	-1.797	18	0.6160	-5.242	-0.5007	73.81	-16.48
4	3.456	-1.666	-0.041	44.64	-10.33	20	0.5597	-5.310	-0.5129	74.14	-16.55
5	2.533	-2.844	-0.1243	55.75	-12.75	30	0.3963	-5.501	-0.5476	74.91	-16.71
6	2.006	-3.509	-0.2233	60.12	-13.60	40	0.3174	-5.590	-0.5641	75.16	-16.77
7	1.665	-3.927	-0.2873	62.31	-14.08	50	0.2709	-5.641	-0.5737	75.27	-16.79
8	1.423	-4.216	-0.3323	66.42	-14.94	60	0.2403	-5.674	-0.5800	75.32	-16.80
9	1.245	-4.446	-0.3674	68.33	-15.32	70	0.2196	-5.697	-0.5845	75.34	-16.81
10	1.104	-4.612	-0.3938	69.72	-15.61	80	0.2024	-5.714	-0.5878	75.36	-16.81
12	0.9110	-4.866	-0.4361	71.54	-16.00	90	0.1899	-5.727	-0.5903	75.37	-16.81
14	0.7816	-5.034	-0.4757	72.63	-16.23	100	0.1799	-5.738	-0.5923	75.38	-16.81
16	0.6875	-5.153	-0.4852	73.33	-16.38						

Таблица 3

Атом К

n	$c_0 (nS_{1/2})$	$c_0 (nP_{1/2})$	$c_0 (nP_{3/2})$	$c_2 (nP_{3/2})$	$c_0 (nD_{3/2})$	$c_0 (nD_{5/2})$	$c_2 (nD_{3/2})$	$c_2 (nD_{5/2})$
3					0.9098	0.8997	-0.3297	-0.4575
4	5.343	2.546	2.654	-0.3984	3.384	3.818	-0.8173	-1.150
5	3.655	1.870	1.906	-0.2751	3.717	3.700	-0.7238	-1.014
6	2.812	1.702	1.742	-0.2169	3.530	3.512	-0.6397	-0.8931
7	2.320	1.574	1.616	-0.1756	3.378	3.364	-0.5798	-0.8084
8	1.993	1.462	1.505	-0.1435	3.246	3.321	-0.5332	-0.7410
9	1.765	1.368	1.412	-0.1177	3.211	3.197	-0.5224	-0.7253
10	1.604	1.267	1.312	-0.0974	3.176	3.162	-0.5132	-0.7120
12	1.346	1.092	1.137	-0.0654	3.114	3.099	-0.4995	-0.6922
14	1.197	0.9620	1.007	-0.0385	3.058	3.043	-0.4878	-0.6752
16	1.091	0.866	0.9123	-0.0190	3.011	2.996	-0.4779	-0.6610
18	1.012	0.7946	0.8402	-0.0043	2.971	2.956	-0.4696	-0.6491
20	0.9499	0.7378	0.7834	0.0073	2.938	2.922	-0.4626	-0.6390
30	0.7744	0.5727	0.6186	0.0408	2.826	2.811	-0.4398	-0.6063
40	0.6915	0.4931	0.5392	0.0568	2.765	2.750	-0.4273	-0.5885
50	0.6433	0.4464	0.4924	0.0663	2.727	2.711	-0.4196	-0.5774
60	0.6118	0.4156	0.4616	0.0725	2.700	2.685	-0.4143	-0.5698
70	0.5895	0.3937	0.4398	0.0786	2.681	2.666	-0.4104	-0.5643
80	0.5730	0.3775	0.4236	0.0801	2.667	2.651	-0.4075	-0.5601
90	0.5602	0.3649	0.4110	0.0826	2.655	2.640	-0.4052	-0.5568
100	0.5500	0.3549	0.4010	0.0846	2.646	2.631	-0.4034	-0.5542

Таблица 4

Атом Rb

n	$c_0 (nS_{1/2})$	$c_0 (nP_{1/2})$	$c_0 (nP_{3/2})$	$c_2 (nP_{3/2})$	$c_0 (nD_{3/2})$	$c_0 (nD_{5/2})$	$c_2 (nD_{3/2})$	$c_2 (nD_{5/2})$
4					0.2950	0.2620	0.0132	0.0660
5	5.099	3.006	3.095	-0.5081	2.362	2.317	-0.2096	-0.2284
6	3.415	2.944	3.095	-0.4653	2.080	2.029	-0.033	0.0396
7	2.567	2.977	3.158	-0.4363	1.832	1.777	0.090	0.2253
8	2.072	2.952	3.158	-0.4096	1.633	1.575	0.1768	0.3557
9	1.749	2.904	3.113	-0.3865	1.470	1.410	0.2401	0.4508
10	1.521	2.850	3.068	-0.3675	1.339	1.277	0.2878	0.5221
12	1.223	2.748	2.977	-0.3380	1.141	1.076	0.3550	0.6230
14	1.027	2.674	2.909	-0.3188	1.022	0.9276	0.3906	0.6925
16	0.8987	2.581	2.840	-0.3033	0.9490	0.8517	0.4076	0.7212
18	0.8049	2.509	2.780	-0.2905	0.8909	0.7930	0.4214	0.7419
20	0.7412	2.441	2.703	-0.2727	0.8470	0.7489	0.4302	0.7548
30	0.5519	2.274	2.538	-0.2379	0.7034	0.6046	0.4627	0.8022
40	0.4637	2.194	2.449	-0.2165	0.6308	0.5318	0.4785	0.8250
50	0.4132	2.147	2.358	-0.2001	0.5871	0.4880	0.4878	0.8385
60	0.3804	2.116	2.279	-0.1963	0.5580	0.4589	0.4939	0.8472
70	0.3575	2.094	2.219	-0.1897	0.5372	0.4380	0.4983	0.8535
80	0.3405	2.078	2.158	-0.1844	0.5216	0.4224	0.5015	0.8581
90	0.3274	2.065	2.097	-0.1810	0.5094	0.4105	0.5040	0.8617
100	0.3170	2.055	2.055	-0.1793	0.4997	0.4005	0.5060	0.8646

имеет место линейный эффект Штарка. Из табл. 1—5 видно, что с ростом возбуждения состояния зависимость $\alpha_0, 2$ от главного квантового числа выходит на асимптотическую с постоянным коэффициентом $c_0, 2$. Аналогичный результат получен в эксперименте [6] по измерению скалярной поляризуемости высоко-возбужденных p -состояний цезия ($n=42, 46, 51, 55, 60$). Но качественное согласие наших результатов с экспериментом не сопровождается в данном случае количественным согласием. Это может быть связано, с одной стороны, с неточ-

Таблица 5

Атом Cs

n	$c_0(nS_{1/2})$	$c_0(nP_{1/2})$	$c_0(nP_{3/2})$	$c_2(nP_{3/2})$	$c_0(nD_{3/2})$	$c_0(nD_{5/2})$	$c_2(nD_{3/2})$	$c_2(nD_{5/2})$
5								
6	4.991	4.324	4.765	-0.6543	-1.106	-1.254	0.7716	1.348
7	3.425	6.157	7.211	-0.8359	-0.5587	-0.9347	1.267	2.480
8	2.611	7.157	8.655	-0.9275	-1.630	-2.167	1.821	3.585
9	2.131	7.684	9.463	-0.9707	-2.311	-2.954	2.152	4.263
10	1.815	7.967	9.933	-0.9961	-2.764	-3.472	2.359	4.686
12	1.365	8.251	10.43	-1.024	-3.086	-3.844	2.498	4.979
14	1.113	8.322	10.75	-1.030	-3.527	-4.343	2.681	5.356
16	0.9465	8.409	11.00	-1.041	-3.807	-4.631	2.798	5.555
18	0.8297	8.431	11.14	-1.050	-3.990	-4.822	2.862	5.601
20	0.7332	8.452	11.22	-1.059	-4.101	-4.943	2.906	5.702
30	0.3358	8.601	11.36	-1.061	-4.153	-5.001	3.001	5.753
40	0.2421	8.673	11.30	-1.046	-4.251	-5.276	3.130	5.908
50	0.1891	8.735	11.26	-1.037	-4.346	-5.374	3.255	5.498
60	0.1551	8.786	11.23	-1.031	-4.439	-5.429	3.366	5.969
70	0.1314	8.829	11.21	-1.027	-4.520	-5.464	3.469	5.982
80	0.1140	8.860	11.20	-1.024	-4.597	-5.488	3.562	5.991
90	0.1006	8.883	11.19	-1.022	-4.668	-5.506	3.646	5.997
100	0.0900	8.895	11.18	-1.020	-4.733	-5.520	3.720	6.002
					-4.784	-5.531	3.781	6.005

ностью при экстраполяции энергии по квантовому дефекту, а с другой стороны — с погрешностью эксперимента [6], где определяется поляризуемость не определенного подуровня тонкой структуры, а некоторая усредненная поляризуемость.

В остальных случаях сравнение полученных значений α_0 и α_2 с экспериментальными данными и значениями, полученными другими теоретическими методами, показывают удовлетворительную точность ВКБ—МКД-приближения даже для низлежащих состояний (табл. 6, 7).

Таблица 6

Скалярная поляризуемость α_0 [ат. ед.] основных состояний щелочных атомов

Атомы состояния	α_0 настоящая работа	$\alpha_0^{\text{теор}} [^\circ]$	$\alpha_0^{\text{эксп}} [^\circ]$	Атомы состояния	α_0 настоящая работа	$\alpha_0^{\text{теор}} [^\circ]$	$\alpha_0^{\text{эксп}} [^\circ]$
Li 2s	169.1	163.99	164 ± 3.4	Rb 5s	317.1	327.98	319.2 ± 6
Na 3s	164.9	151.17	159.3 ± 3.4	Cs 6s	397.9	405.3	402.6 ± 8
K 4s	291.3	292.21	292.9 ± 6				

Из анализа проведенных вычислений следует, что основной вклад в поляризуемость дают переходы, в которых изменение эффективного главного квантового числа $|\Delta = \nu' - \nu| < 1$. Это связано с быстрым затуханием матричных элементов с ростом $|\Delta|$, а также с малостью энергетического знаменателя для таких переходов.

Для всех рассмотренных атомов основной вклад в $\alpha_0(nS)$ ($\geq 95\%$) дают два перехода с $n' = n, n-1$. При вычислении $\alpha_{0,2}(nP)$ атомов Li и Cs вклад $\sim 95\%$ дают три перехода: $np \rightarrow ns, (n+1)s; np \rightarrow nd$ (Li), $(n-1)d$ (Cs). И в атомах Na, K, Rb указанным $p \rightarrow s$ переходам соответствуют члены, на порядок превышающие все остальные. Однако их суммарный вклад из-за разных знаков оказывается того же порядка, что и для переходов с $n' = n-1, n+2$.

Особо следует подчеркнуть, что с возрастанием главного квантового числа исследуемого уровня относительный вклад в $\alpha_{0,2}$ переходов с $|\Delta| < 1$ увеличивается. Это объясняется тем, что с ростом n все более компенсируются вклады переходов в вышележащие ($\Delta > 1$) и нижележащие ($-\Delta > 1$) состояния.

Таблица 7

Полярность, МГц/ (кВ/см ²) ²	Na			Rb				Cs			
	<i>n</i>	эксперимент [°]	настоящая работа	<i>n</i>	<i>J</i>	эксперимент [°]	настоящая работа	<i>n</i>	<i>J</i>	эксперимент [°]	настоящая работа
$\alpha_0(nS)$	5	5.2±0.3	5.413	9	$\frac{1}{2}$	102±9	103.7	10	$\frac{1}{2}$	123±6	118.4
	6	23.6±0.4	23.43	10	$\frac{1}{2}$	280±25	272	11	$\frac{1}{2}$	322±16	300
	7	76.4±1.2	76.15					12	$\frac{1}{2}$	720±45	677.4
	8	206±3	203.7					13	$\frac{1}{2}$	1650±170	1393
$\alpha_0(nD)$	4	156.1±1.3	178.1	7	$\frac{3}{2}$	84±6	86.12	9	$\frac{3}{2}$	-360±30	-346.2
	5	1033±27	1064	8	$\frac{3}{2}$	211±18	237.6	9	$\frac{5}{2}$	-509±25	-439.1
	6	4045±90	4120					10	$\frac{3}{2}$	-1150±170	-1049
								10	$\frac{5}{2}$	-1340±130	-1317
								11	$\frac{5}{2}$	-3790±350	-3379
								11	$\frac{5}{2}$	4010±400	4258
$\alpha_2(nD)$	4	-38.5±0.7	-41.17	7	$\frac{3}{2}$	4.95±0.25	0.09	11	$\frac{5}{2}$	19±1.10 ³	19.56·10 ³
	5	-252±15	-241.5	7	$\frac{5}{2}$	11.90±0.6	10.61	13	$\frac{5}{2}$	37±2.10 ³	37.53·10 ³
	6	-995±45	-932.5	8	$\frac{3}{2}$	27.0±1.4	25.73	14	$\frac{5}{2}$	70±4.10 ³	69.93·10 ³
				8	$\frac{5}{2}$	56.9±3.0	51.85	15	$\frac{5}{2}$	120±6.10 ³	124.4·10 ³
				9	$\frac{5}{2}$	180.3±9.0	174.2	16	$\frac{5}{2}$	199±10.10 ³	213.3·10 ³
								17	$\frac{5}{2}$	323±16.10 ³	345.2·10 ³
								18	$\frac{5}{2}$		

Л и т е р а т у р а

- [1] Laser Spectroscopy IV. Ed. H. Walter, K. Rothe, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1979.
- [2] Б. М. Смирнов. Усп. физ. наук, вып. 9, 1980.
- [3] В. А. Давыдкин, Б. А. Зон. Опт. и спектр., 51, 25, 1981.
- [4] Л. П. Рапопорт, Б. А. Зон, Н. Л. Мананков. Теория многофотонных процессов в атомах. Атомиздат, М., 1978.
- [5] С. Е. Мооре. Atomic Energy Levels, Nat. Bur. Standards, Washington, 1, 1949.
- [6] A. van Raan, G. Baum, W. Raith. J. Phys. B, 9, L349, 1976.
- [7] R. T. Hawkins, W. T. Hill, F. V. Kowalski, A. L. Schawlow, S. Svanberg. Phys. Rev. A, 15, 967, 1977.
- [8] K. Fredriksson, S. Svanberg. Z. Phys. A, 281, 189, 1977.

Поступило в Редакцию 5 ноября 1980 г.