Литература

[1] Островский Ю. И., Бутусов М. М., Островская Г. В. Голографическая интерферометрия. М., 1977.
[2] Зельдович Б. Я., Лернер П. Б. — Квант. электрон., 1981, т. 8, с. 1886.
[3] Зельдович Б. Я., Шкунов В. В., Яковлева Т. В. — Квант. электрон., 1983, т. 10, с. 1581.
[4] Зельдович Б. Я., Мамаев А. В., Хайкин А. Ю., Шкунов В. В., Яковлева Т. В. Материалы XIV Всесоюз. школы по голографии. Л., 1984.
[5] Кольер Р., Беркхарт К., Лин Л. Оптическая голография. М., 1973.
[6] Березинская А. М., Стаселько Д. И., Чураев А. Л. — ЖТФ, 1983, т. 53, № 10, с. 1995.

Поступило в Редакцию 9 октября 1984 г.

УДК 539.184.01

Опт. и спектр., т. 59, в. 3, 1985

ВОДОРОДОПОДОБНЫЙ АТОМ В ПОЛЕ ВЫСОКОЧАСТОТНОГО ЛИНЕЙНО ПОЛЯРИЗОВАННОГО ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Гавриленко В. П., Окс Е. А., Радчик А. В.

В связи с расширением диапазона длин волн УФ лазеров [1] исследование поведения атомов в поле высокочастотного электромагнитного излучения (ВЭИ) представляет теоретический и практический интерес. Как известно [2, 3], в качестве решений уравнения Шредингера для атома в периодическом (по времени) поле удобно выделить волновые функции (ВФ) квазиэнергетических состояний. Задача о нахождении таких состояний водородоподобного атома в поле ВЭИ впервые рассматривалась Ритусом [2]. В [2] найдены квазиэнергии (КЭ) атомных уровней с $n \leqslant 2$ (n — главное квантовое число), для которых, как отмечено в [2], оператор возмущения U диагонален по сферическим ВФ. В [4, 5] высказано (но не доказано) утверждение, что при фиксированном $n > 2$ оператор U смешивает состояния с l и $l \pm 2$ (l — орбитальное квантовое число). В [5] исследование КЭ при $n > 2$ базируется на приближенной аналогии рассматриваемой задачи с нахождением энергий иона H_2^+. При этом в [5] на основании значений энергий H_2^+ [6] для $n > 2$ находятся «поправки» к формулам для КЭ из [2], которые связываются с перемешиванием состояний с l и $l \pm 2$. С другой стороны, в более поздней работе [7], где использована зависимость энергии иона H_2^+ от расстояния между ядрами R из [8], получен результат для КЭ при $R \to 0$, совпадающий с результатом [2] для любого n, что противоречит [5]. Таким образом, отсутствует ясность в вопросе о правомерности распространения формул для КЭ [2] на случай $n > 2$. Неясно также, действительно ли возмущение перемешивает состояния с l и $l \pm 2$ при фиксированном n. Ответ на эти вопросы могло бы дать непосредственное вычисление матричных элементов возмущения между состояниями с l, $l \pm 2$ при фиксированном n. Как показано в настоящей работе, такие матричные элементы равны нулю. Это доказывает, что возмущение не смешивает состояния с l и $l \pm 2$ при фиксированном $n > 2$ и что формулы из [2] в действительности верны при любом n. Диагональность возмущения по сферическим ВФ позволяет легко определить расщепление любой спектральной линии водородоподобного атома в поле ВЭИ, что является основным результатом настоящей работы.

Уравнение Шредингера для водородоподобного атома в поле с векторным потенциалом $\mathbf{A}(t) = \mathbf{A}_0 \sin \omega t$ ($\mathbf{A}_0 = (0, 0, -cE_0\omega^{-1})$) имеет вид (здесь и далее используются атомные единицы $\hbar = m = e = 1$)

$$i\Psi'_t = [H_0 + V(t)]\,\Psi, \quad H_0 = 2^{-1}\mathbf{p}^2 - Zr^{-1} + (2c)^{-2} A_0^2, \quad V(t) = -c^{-1}\mathbf{A}_0\mathbf{p} \sin \omega t - (2c)^{-2} A_0^2 \cos 2\omega t, \tag{1}$$

где Z — заряд ядра. Слагаемое $(2c)^{-2} A_0^2$ представляет собой среднюю колебательную энергию свободного электрона в волне.

Находим решение (1) в виде

$$\Psi = \exp\left[-i\alpha(t)\right]\Phi,\quad \alpha(t) = (\omega c)^{-1}\mathbf{A}_0\mathbf{p}\cos\omega t - (8\omega c^2)^{-1}A_0^2\sin 2\omega t. \tag{2}$$

Подставляя (2) в (1), получим уравнение

$$\begin{gathered} i\Phi_t' = H_1\Phi, \\ H_1 \equiv \exp\left[i\alpha(t)\right]H_0\exp\left[-i\alpha(t)\right] = H_0 + i\left[\alpha,\ H_0\right] + 2^{-1}i^2\left[\alpha,\ \left[\alpha,\ H_0\right]\right]\ldots + = \\ = \bar{H}_1 + \tilde{H}_1. \end{gathered} \tag{3}$$

В (3) $\bar{H}_1$ — стационарная (усредненная по периоду $2\pi\,\omega^{-1}$), а $\tilde{H}_1$ — осциллирующая составляющие гамильтониана H_1. В рассматриваемом высокочастотном случае основной вклад в решение (3) вносит составляющая $\bar{H}_1$. В соответствии с (3) $\bar{H}_1$ можно представить в виде

$$\begin{gathered} \bar{H}_1 = H_0 + \gamma V_1 + \gamma^2 V_2 + \ldots, \\ \gamma \equiv (2\omega^2)^{-2}E_0^2,\ \ V_1 = Z(1 - 3\cos^2\theta)\,r^{-3},\ \ V_2 = 3Z\left(-3 + 30\cos^2\theta - 35\cos^4\theta\right)(4r^5)^{-1} \\ (r\cos\theta = z). \end{gathered} \tag{4}$$

Полагая $\gamma \ll 1$, найдем по теории возмущений собственные значения и ВФ гамильтониана $\bar{H}_1$. Важно подчеркнуть, что поскольку невозмущенная система вырождена, то линейные по γ поправки к ВФ возникнут не только от γV_1, но и от $\gamma^2 V_2$ (например, [9]). Нетрудно видеть, что радиальная часть матричного элемента $(V_1)^{nlm}_{nl'm}$ $(l' = l - 2)$ сводится к интегралу вида $J = \int\limits_0^\infty z^r e^{-z} Q^r_{k+s}(z) \times Q^p_k(z)\,dz$ $(s > 0)$, где $Q^m_n(z)$ — полиномы Лагерра. Согласно [10], $J = 0$ и таким образом $(V_1)^{nlm}_{nl'm} = 0$ $(l' = l - 2)$. Отсюда следует, что сферические ВФ φ_{nlm} являются правильными собственными функциями нулевого приближения усеченного гамильтониана $H_0 + \gamma V_1$, поэтому в соответствии с [9] собственные значения $F_{n\nu}$ и ВФ $\chi_{n\nu}$ гамильтониана $\bar{H}_1$ с точностью до членов $\sim\gamma$ равны

$$\begin{gathered} F_{n\nu} = E_n^{(0)} + \gamma\langle n\nu\,|\,V_1\,|\,n\nu\rangle,\ \ \chi_{n\nu} = \varphi_{n\nu} + \gamma\sum_j \frac{\langle j\,|\,V_1\,|\,n\nu\rangle}{E_n^{(0)} - E_j^{(0)}}\varphi_j + \gamma\sum_{\mu\neq\nu}\times \\ \times\left\{\sum_j \frac{\langle n\mu\,|\,V_1\,|\,j\rangle\langle j\,|\,V_1\,|\,n\nu\rangle\,\varphi_{n\mu}}{(E_n^{(0)} - E_j^{(0)})\left(\langle n\nu\,|\,V_1\,|\,n\nu\rangle - \langle n\mu\,|\,V_1\,|\,n\mu\rangle\right)} + \frac{\langle n\mu\,|\,V_2\,|\,n\nu\rangle\,\varphi_{n\mu}}{\langle n\nu\,|\,V_1\,|\,n\nu\rangle - \langle n\mu\,|\,V_1\,|\,n\mu\rangle}\right\}, \end{gathered} \tag{5}$$

где $E_n^{(0)} = -2^{-1}Z^2n^{-2} + (2\omega)^{-2}E_0^2$, $\nu \equiv (l, m)$, $\mu \equiv (l'', m'')$, $j \equiv (n'l'm')$, $n' \neq n$. Подставляя V_1 из (4) в (5), при $l \neq 0$ получаем

$$F_{nlm} = -\frac{Z^2}{2n^2} + \frac{E_0^2}{4\omega^2} + \frac{Z^4E_0^2}{w^4}\cdot\frac{3m^2 - l(l+1)}{n^3(2l+3)(l+1)(2l+1)\,l\,(2l-1)}. \tag{6}$$

Для нахождения F_{n00} вместо V_1 из (4) используем выражение $V_1 = Z\left[1 - 3\cos^2\theta + \varepsilon\left(4\cos^2\theta - 1\right)\right]r^{\varepsilon-3}$ $(|\varepsilon| \ll 1)$, которое соответствует квазикулоновскому потенциалу ядра вида $-Zr^{\varepsilon-1}$. Это позволяет устранить неопределенность, которая возникает при вычислении диагональных матричных элементов оператора V_1 из (4) по ВФ φ_{n00}.[1] В результате для $l = 0$ находим

$$F_{n00} = -(2n^2)^{-1}Z^2 + (2\omega)^{-2}E_0^2 + (3n^3\omega^4)^{-1}Z^4E_0^2. \tag{7}$$

Таким образом, формулы, полученные в [2] при $n \leqslant 2$, на самом деле справедливы для любого n.[2]

---

[1] Отметим, что аналогичная неопределенность возникает и при вычислении матричных элементов $(V_2)^{nlm}_{n'l'm}$ в случае $l + l' \leqslant 2$. В этом случае в качестве V_2 следует использовать выражение $V_2 = 3Z\left[-3 + 30\cos^2\theta - 35\cos^4\theta + \varepsilon\left(4 - 46\cos^2\theta + 3^{-1}176\cos^4\theta\right)\right] \times (4r^{5-\varepsilon})^{-1}$.

[2] Для справедливости полученных результатов нужно потребовать, чтобы характерная величина расщепления уровня n, определяемая формулами (6), (7), превышала сдвиг подуровней $\Delta\varepsilon_{nlm}$, обусловленный потенциалом $\tilde{H}_1$. Ограничиваясь в $\tilde{H}_1$ слагаемым, содержащим γ в наинизшей степени $(\backsim\gamma^{1/2}\omega^{-1})$, в высокочастотном пределе $\omega \gg |E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}|$ получаем соотношение [11]

$$\Delta\varepsilon_{nlm} = -ZE_0^2(2\omega^6)^{-1}\sum_{n'\neq n}\left|(r^{-2}\cos\theta)^{nlm}_{n'l'm}\right|^2\left(E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}\right),$$

с помощью которого определяется нижняя граница применимости по ω.

Выражения (6), (7) определяют расщепление водородоподобных линий в поле ВЭИ. Интенсивности расщепленных компонент определяются (в нулевом приближении по γ) хорошо известными выражениями [12] для матричных элементов $|(\mathbf{r})^{nlm}_{n'l'm'}|^2$ в сферических координатах. Учет в (5) членов $\sim\gamma$, а также учет возмущения $\tilde{H}_1$ приведет к появлению «запрещенных» компонент (с интенсивностями $\sim\gamma^2$).

Литература

[1] Рокка Дж. Дж., Коллинз Г. Дж. — Автометрия, 1984, № 1, с. 3.
[2] Ритус В. И. — ЖЭТФ, 1966, т. 51, с. 1544.
[3] Зельдович Я. Б. — ЖЭТФ, 1966, т. 51, с. 1492.
[4] O'Connell R. F. — Phys. Rev. A, 1975, v. 12, p. 1132.
[5] Савукинас А. Ю. — Литов. физ. сб., 1977, т. 17, с. 729.
[6] Bates D. R., Ledsham K., Stewart A. L. — Phil. Trans. Roy. Soc., 1953, v. 246, p. 215.
[7] Вайтекунас П. П., Савукинас А. Ю. — Опт. и спектр., 1983, т. 54, в. 1, с. 31.
[8] Abramov D. I., Slavyanov S. Yu. — J. Phys. B, 1978, v. 11, p. 2229.
[9] Шолин Г. В. — Опт. и спектр., 1969, т. 26, в. 3, с. 489.
[10] Фок В. А. Начала квантовой механики. М., 1976, ч. II, гл. V, § 4.
[11] Собельман И. И. Введение в теорию атомных спектров. М., 1977, § 27.
[12] Бете Г., Солпитер Э. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. М., 1960, § 63.

Поступило в Редакцию 22 ноября 1984 г.

УДК 539.184.22+539.186.3 *Опт. и спектр., т. 59, в. 3, 1985*

ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ ФУНКЦИИ $B^2\Sigma_{1/2}(r)$ И $C^2\Pi_{1/2}(r)$ КВАЗИМОЛЕКУЛ РУБИДИЙ—ИНЕРТНЫЙ ГАЗ

Кантор П. Я., Шабанова Л. Н.

Известно, что одним из источников информации о потенциалах взаимодействия атомов являются экспериментальные данные о профиле крыльев спектральных линий, обусловленных переходами в квазимолекуле, образованной сталкивающимися атомами.

В настоящей работе на основании измерений профиля коротковолнового крыла линии поглощения 780.0 нм и длинноволнового крыла линии поглощения 421.6 нм RbI в присутствии инертных газов [1, 2] при использовании квазистатической теории уширения спектральных линий, развитой в [3], и имеющихся в литературе данных о потенциальной функции $X^2\Sigma_{1/2}(r)$ основного состояния квазимолекулы Rb X (X — атом инертного газа) восстановлены потенциальные функции $B^2\Sigma_{1/2}(r)$ и $C^2\Pi_{1/2}(r)$. При восстановлении разностного потенциала $\Delta V(r)$ в области экстремума использовалась параболическая аппроксимация

$$\Delta V(r) = \varepsilon_m + \frac{1}{2}\Delta V''(r_m)(r - r_m)^2 \tag{1}$$

и полученные в [3] выражения для профиля сателлита

$$I(\Delta\omega) = 8\pi N_p \frac{g_\Omega}{g} \frac{r_m^2 \exp[-V_g(r_m)/kI]}{|\Delta V''(r_m)/\hbar|^{2/3}} (18\pi)^{1/2} (\mu/kT)^{1/6} L(z_c), \tag{2}$$

$$I(\Delta\omega_{ex}) \simeq 0.65 I(\Delta\omega_s), \tag{3}$$

где $L(z_c)$ — функция, затабулированная в [3],

$$z_c = \left|\frac{\mu\hbar}{kT\Delta V''(r_m)}\right|^{1/3} (\Delta\omega - \Delta\omega_{ex}) \operatorname{sgn}[\Delta V''(r_m)], \quad \Delta\omega_{ex} = \Delta V(r_m)/\hbar,$$

$\Delta\omega_s$ — положение пика сателлита относительно центра линии.