

539.186

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ РАДИАЦИОННЫХ ВРЕМЕН ЖИЗНИ ПО ВОЗБУЖДЕННЫМ СОСТОЯНИЯМ АТОМОВ И ИОНОВ

Н. Н. Безуглов, Е. Н. Борисов, Я. Ф. Веролайнен

(Ленинградский государственный университет)

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	3
1. Эмпирические распределения радиационных времен жизни по возбужденным состояниям атомов и ионов	4
2. Формулы для вычисления радиационных времен жизни τ_k	5
3. Одноканальная теория для определения радиационных времен жизни τ_k	10
3.1. Обозначения и допущения. 3.2. Главные члены разложения A_k по энергии ϵ . 3.3. Низколежащие возбужденные состояния. 3.4. Критерии выполнения правила Бете. 3.5. Поправки к квазиклассическим формулам. 3.6. Квантование радиационной ширины s -состояний.	
4. Экстраполяционные схемы для нахождения τ_k высоковозбужденных состояний атомов и ионов	20
4.1. Одноканальное приближение. 4.2. Степенные серийные закономерности.	
5. Рекомендуемые значения радиационных времен жизни возбужденных состояний атомов I A, II и VIII групп.	26
Заключение	27
Список литературы	28

Введение. К настоящему времени в литературе накоплен обширный численный материал по радиационным временам жизни τ_k возбужденных состояний атомов и ионов, полученный как экспериментальными, так и расчетными методами. По мере появления информации о τ_k предпринимались шаги по ее осмыслению с помощью различных эмпирических закономерностей. Были выявлены зависимости τ_k от главного n и эффективного n^* квантовых чисел [1—3], от энергетического зазора $\Delta\epsilon$ между уровнями одной спектральной серии [4], от эффективного заряда атомного остова (z^*) [5]. Для водородоподобных состояний предложен ряд аналитических соотношений при описании распределения τ_k как функции n .

Интерес к серийным закономерностям вызван тем, что они позволяют из набора значений τ_k , полученных разными методами, выявлять наиболее достоверные, а зачастую и предсказывать τ_k для неисследованных состояний [6]. Сейчас значительно выросли требования к степени полноты и точности атомных констант, в том числе и радиационных. Это обусловлено необходимостью решения новых фундаментальных и прикладных проблем атомной физики и спектроскопии, физики плазмы и квантовой электроники, плазмохимии и астрофизики в широком диапазоне условий. В связи с этим актуальной остается задача по созданию фонда экспертно оцененных констант (времен жизни), которые можно рекомендо-

довать к использованию. В обзоре проведена систематизация имеющихся в литературе данных по τ_k атомов I, II и VIII групп, сопоставлены разные теоретические (формульные) методы расчета τ_k , развита оригинальная квазиклассическая теория по определению τ_k . Все это позволяет сравнить результаты разных авторов, провести их критический анализ в плане выявления «промахов», найти методику поиска наиболее достоверных значений, и, наконец, составить рекомендованные значения времен жизни атомов I, II и VIII групп Периодической системы элементов. В разделах 2 и 3 обзора, посвященных приложениям теории радиационных процессов, в основном использована атомная система единиц (а. е.).

1. Эмпирические распределения радиационных времен жизни по возбужденным состояниям атомов и ионов. По-видимому первая серийная закономерность была установлена еще в 1928 г. А. Купером при исследовании сил осцилляторов $f(n, l \rightarrow n', l')$ атома водорода: $f(n, l \rightarrow n', l+1) \sim (n')^{-3}$. Позднее Бете и Солпитер [7] для времен жизни τ_k уровней водорода обнаружили их пропорциональность n^3 при фиксированном значении орбитального квантового числа l .

Н. П. Пенкин и Л. Н. Шабанова [8] в главных сериях атомов II группы для ридберговских состояний также наблюдали зависимость $A_{ki} \sim (n^*)^{-3}$, где A_{ki} — вероятность радиационного перехода с уровня k на уровень i . В 1975 г. практически одновременно и независимо о степенном поведении τ от n^* для различных серий возбужденных состояний атомов неона, ртути и натрия было сообщено в [1—3]. В дальнейшем степенные зависимости, эмпирический вид которых дается соотношением

$$\tau_k = \tau_{0,l} (n^*)^{\alpha_l}, \quad (1.1)$$

наблюдались для большого числа серий атомов и ионов; здесь $\tau_{0,l}$ и α_l — константы для данной серии уровней с фиксированным числом l ; символ k включает в себя набор всех квантовых чисел уровня серии, однако часть из них может опускаться, например $k = \{n, l, m\}$ или $k = \{n, l\}$ или $k = n$. Еще один эмпирический закон, предложенный в [4]

$$\tau_k = B (\Delta E_k)^{-\beta_l}, \quad (1.2)$$

связывает радиационное время жизни с разностью энергии $\Delta E_k = \varepsilon_{k+1} - \varepsilon_k$ рядом лежащих состояний серии. Зависимости (1.1), (1.2) удобно представлять графически в логарифмическом масштабе, где соответствующие им линии являются прямыми. Несколько примеров таких графиков приведены на рис. 1 и 2.

Ранее указывалось на практическую значимость соотношения (1.1). Поэтому в последнее время для ряда серий атомов методом наименьших квадратов были определены параметры $\tau_{0,l}$ и α_l . Обычно величина α_l оказывается близкой к трем, однако часто наблюдается отличие α_l от трех как в меньшую, так и в большую сторону. Например, для серий, представленных на рис. 1, α_l меняется от 2,8 (Cs) до 4,3 (Ne $np[3/2]_2$). Даже для разных серий одного атома α_l может колебаться от 3 до 4,3 (Ne $ns'[1/2]_0$ и $np[3/2]_2$) (см. рис. 1). Использование серийных закономерностей (1.1), (1.2) для анализа времен жизни, обсуждение области их применения и, соответственно, их возможностей в плане экстраполяции τ_k на высоковозбужденные состояния даны в разделе 4.

2. Формулы для вычисления радиационных времен жизни τ_k . Основная трудность теоретического осмысления экспериментальных результатов по временам жизни связана с тем, что вероятность $A_k = \tau_k^{-1}$ радиационного распада возбужденного уровня k обладает сложной структурой.

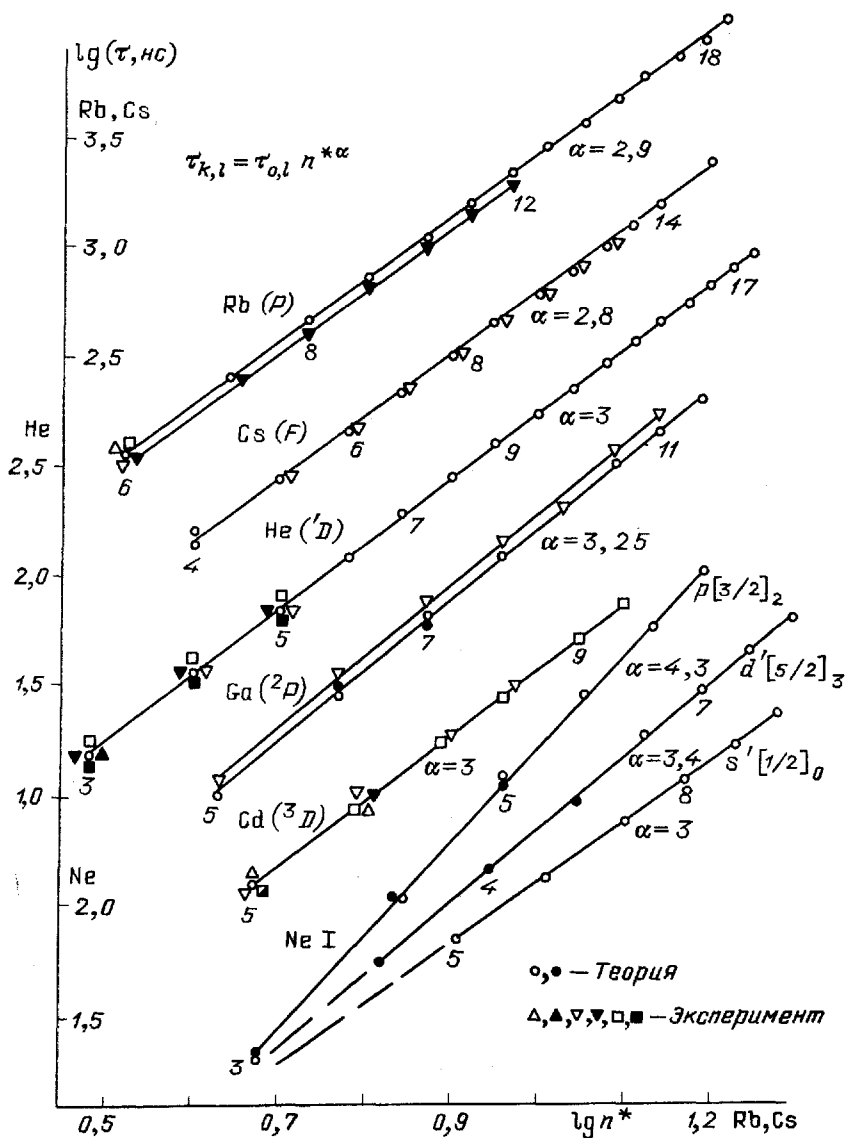


Рис. 1. Степенные зависимости (1.1) радиационных времен жизни (τ) от эффективного главного квантового числа (n^*) для ряда серий возбужденных состояний. Величина показателя степени (α_i) изменяется между значениями 2,7 и 4,3

Радиационная ширина складывается из индивидуальных вероятностей $A_{k\bar{k}}$ излучения фотона на частотах $\omega_{k\bar{k}} = (\epsilon_k - \epsilon_{\bar{k}})/\hbar$ при оптических переходах $k \rightarrow \bar{k}$:

$$\tau_k^{-1} \equiv A_k = \sum_{\bar{k}} A_{k\bar{k}}, \quad A_{k\bar{k}} = 2\omega_{k\bar{k}}^2 l^2 (mc^3)^{-1} f_{k\bar{k}}. \quad (2.1)$$

Для сил осцилляторов $f_{k\bar{k}}$ имеются довольно развитые представления относительно зависимости от квантовых чисел состояний k и \bar{k} [9—15], тем не менее важным элементом, характерным для многих теоретических работ [13—21] по исследованию τ_k , остается получение в том или ином приближении аналитических выражений для сил осцилляторов. Так, автор [20] приводит весьма точную аппроксимацию $f_{k\bar{k}}$ для водородоподобных и щелочных атомов, используя метод Бэйтса и Дамгарда (см., например, [22]). В работе [21] дается приближенный способ расчета произведения $\langle \omega_{k\bar{k}}^2 f_{k\bar{k}} \rangle$, включающий в себя суммирование (2.1) по компонентам мультиплетной структуры начального k и конечного \bar{k} электронных

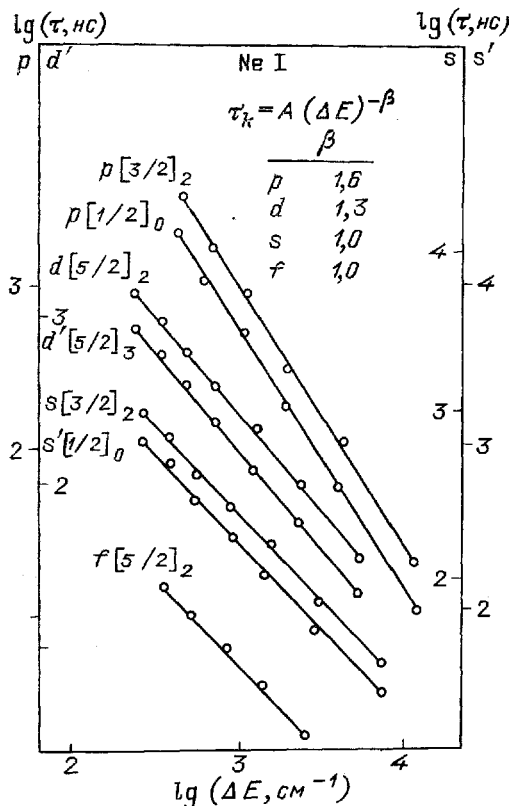


Рис. 2. Степенные зависимости (1.2) радиационных времен жизни (τ) от энергетического расстояния (ΔE) для некоторых серий возбужденных состояний атома неона

термов. В [16] силы осцилляторов для атома водорода оцениваются по квазиклассическим формулам квантовой механики [23]. Авторы [14, 15] подробно исследуют входящие в $f_{k\bar{k}}$ интегралы перекрытия радиальных волновых функций, исходя как из асимптотических пределов для $f_{k\bar{k}}$, так и из обобщенных правил соответствия [15].

При аналитическом описании A_k следующим шагом является выполнение суммирования в (2.1) по нижележащим состояниям \bar{k} . Здесь возможно несколько путей. Например, в [14—16] суммирование по главному квантовому числу \bar{n} уровней атома водорода заменяется на интеграл по \bar{n} , что правомерно для ридберговских состояний ($n \gg 1$). Результирующее выражение для A_k , записанное в универсальных обозначениях, имеет вид (а.е)

$$A_{n,l} = \frac{z^4 \alpha}{n^3} \frac{G(n,l)}{L^2}, \quad \alpha = \frac{4}{\sqrt{3} \pi c^3}. \quad (2.2)$$

Здесь z — заряд атомного остатка, c — скорость света ($c = 137$ а.е.). Функция $G(n, l)$ согласно [14, 16] оказывается константой, равной $G_{[14]} = 1$ [14], $G_{[16]} = \pi/2\sqrt{3}$ [16]. Параметр L равен $l + 0,5$ по [16] и $L = l$ в [14]. В [11] в формулу для $A_{n,l}$ работы [14] предлагается ввести «академическую поправку» $l \rightarrow l + 0,5$. Эта так называемая поправка Лангера возникает в квазиклассике из-за сингулярности центростремительного

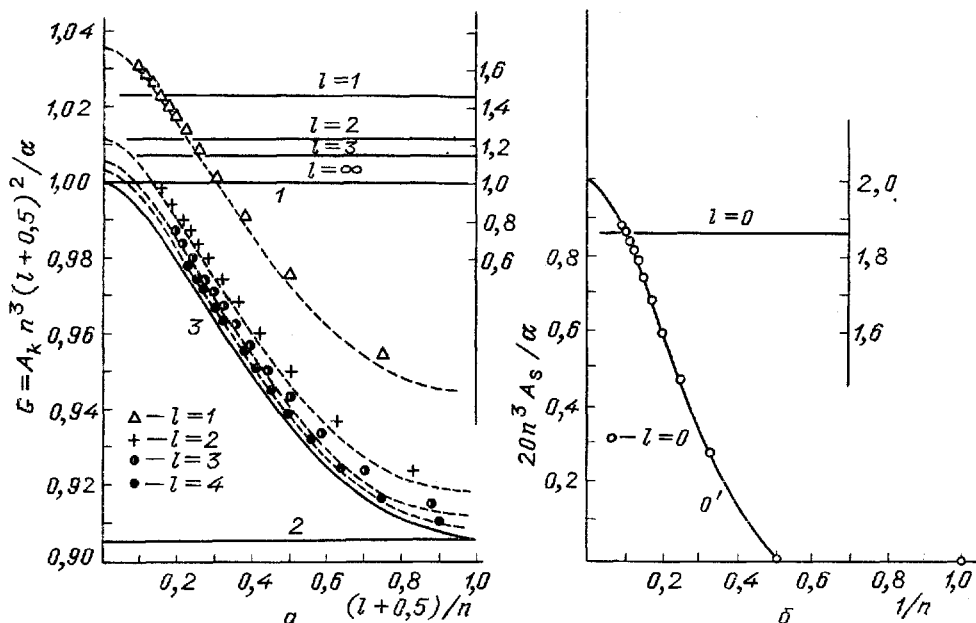


Рис. 3. Сравнение результатов расчета вероятности $A_{n,l}$ радиационного распада по формуле (2.2) (сплошные линии на рис. а) с квантовомеханическим расчетом [24] (символы Δ , $+$, \circ , \bullet) для атома водорода. Сплошные кривые 1–3 на рис. а дают графики функций $G(n, l)$ из работ [13, 14], [5, 16, 17], [18] соответственно; кривая 0' описывает функцию $20G_s$ (см. (3.32)). Штриховые кривые построены согласно соотношению (3.26) с учетом поправок на сингулярность кулоновского потенциала. Правые оси ординат относятся к прямым $l=0, 1, 2, 3$, построенным согласно формулам работы [15]

отталкивательного потенциала при нулевом радиусе [23]. О точности представления (2.2) с $L_{[14]} \Rightarrow L_{[11]} = l + 0,5$ можно судить по кривым рис. 3а ($l > 0$).

Предположение о кубической зависимости времени жизни от главного квантового числа впервые было высказано в [7] без указания характера поведения τ_k от орбитального числа l . Детализация этой зависимости в форме (2.2) при $L = l$ предложена в [13–14]. Но если соотношение (2.2) с $G(n, l) = 1$ в [14] выведено аналитически, то в [13] зависимость $A_{n,l} \sim L^{-2}$ подобрана эмпирически. В работе [15], обобщающей результаты целого ряда исследований (см. [10]) по излучательным процессам с участием водородоподобных атомов, получены формулы для вероятностей $A_n^{(l \rightarrow l')}$ радиационных переходов на нижележащие уровни с фиксированным значением орбитального квантового числа. В обозначениях (2.2)

$$A_n^{(l \rightarrow l-1)} = \frac{z^4 \alpha}{n^3} \frac{G^{(l \rightarrow l-1)}}{l(l+1/2)}, \quad A_n^{(l \rightarrow l+1)} = \frac{z^4 \alpha}{n^3} \frac{G^{(l \rightarrow l+1)}}{(l+1/2)(l+1)}, \quad (2.3)$$

$$G^{(l \rightarrow l \mp 1)} = \left(1 \pm \frac{\pi \sqrt{3}}{6}\right), \quad A_{n,l} = A_n^{(l \rightarrow l-1)} + A_n^{(l \rightarrow l+1)}. \quad (2.4)$$

Согласно (2.3), (2.4) полная вероятность $A_{n,l}$ имеет вид (2.2) с $L_{[15]}^2 = l(l+1)$; $G_{[15]} = 1 + \{\pi/[4\sqrt{3}(l+0,5)]\}$. Правые оси ординат рис. 3 относятся к прямым ($l = 0, 1, 2, 3$), которые описывают соотношения (2.3), (2.4).

В условиях равновесного распределения населенностей атомов представляет интерес вероятность радиационного распада $\langle A_n \rangle$, усредненная по всему блоку $l < n$ вырожденных состояний $|n, l\rangle$ с энергией ε_n :

$$\langle \tau_n \rangle^{-1} \equiv \langle A_n \rangle = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) A_{n,l} \cdot n^{-2}, \quad \varepsilon_n = -\frac{z^2}{2n^2}.$$

В пределе ридберговских состояний $\langle A_n \rangle$ сводится к следующей асимптотике [13—15]:

$$\langle A_n \rangle = 8z^4 (\sqrt{3}\pi c^3)^{-1} \ln(1,414n) n^{-5}, \quad (2.5)$$

которая исправляет широко используемую ранее эмпирическую закономерность Бете [7] $\langle A_n \rangle \sim n^{-4,5}$.

В работе [17] применена техника непосредственного суммирования (2.1) по \tilde{k} для установления нижней оценки вероятности $A_{n^*,l}$ радиационного распада состояния n^*, l . С этой целью автор [17] обращается к правилам сумм [22, 23], которые позволяют выразить (2.1) по всему энергетическому спектру \tilde{k} электронов (дискретному плюс непрерывному) через волновую функцию $|k\rangle$ исходного излучающего состояния k . В случае движения одного электрона в центрально-симметричном силовом поле с потенциалом $U(r)$ происходят переходы с изменением орбитального квантового числа электрона на единицу: $\tilde{l} \rightarrow l \pm 1$. Однако по правилу Бете ([7], см. также в [15]) переходы вниз в состояния с $\tilde{l} = l - 1$ осуществляются с подавляющей вероятностью, так что $A_{n^*,l} \approx A_{n^*,l}^{(\tilde{l} \rightarrow l-1)}$. Критерии применимости правила Бете при индивидуальных оптических переходах $(l, n \rightarrow \tilde{l}, \tilde{n})$ сформулированы в [14, 15]. Они сводятся к требованию большого зазора между энергией состояний (l, n) и (\tilde{l}, \tilde{n}) . Как видно из соотношений (2.3), (2.4), согласно которым $A_n^{(\tilde{l} \rightarrow l-1)} / A_n^{(\tilde{l} \rightarrow l+1)} \approx 21$, в суммарной вероятности $A_{n,l}$ преобладающими оказываются переходы в состояния с $\tilde{l} = l - 1$. В квазиклассической модели излучения фотона переходы вверх (в том числе и в континуум) при $\tilde{l} = l - 1$ маловероятны (обращенное правило Бете). Поэтому сумму для

$$A_{n^*}^{(\tilde{l} \rightarrow l-1)} = \sum_{\tilde{n} < n} A_{n^*,l,\tilde{n}^*,l-1}$$

можно распространить на все состояния \tilde{n} :

$$A_{n^*}^{(\tilde{l} \rightarrow l-1)} \approx A_{n^*,\infty}^{(\tilde{l} \rightarrow l-1)} \equiv \sum_{\tilde{n} < n} + \sum_{\tilde{n} > n}.$$

Силы осцилляторов (2.1) для переходов вверх меняют свой знак [25], так что вторая сумма в $A_{n^*,\infty}^{(\tilde{l} \rightarrow l-1)}$ меньше нуля, и выполняется цепочка оценок:

$$A_{n^*,l} > A_{n^*}^{(\tilde{l} \rightarrow l-1)} > A_{n^*,\infty}^{(\tilde{l} \rightarrow l-1)} = \frac{2}{3c^3} \langle n^*l | F(r) | n^*l \rangle, \quad (2.6)$$

$$F(r) = F_1(r) - F_2(r) \equiv \frac{l+1}{l+0,5} \frac{l}{r} \frac{dU}{dr} - \frac{2l}{2l+1} \cdot \frac{1}{2} \hat{\Delta} U(r), \quad (2.7)$$

где $|n^*l\rangle$ — волновая функция излучающего состояния n^*, l ; $\hat{\Delta}$ — лапласиан. Вывод последнего равенства в (2.6) для вероятности $A_{n^*,\infty}^{(\tilde{l} \rightarrow l-1)}$ ос-

нован на возможности записи матричного элемента $\langle n^*l | r | n^*l \rangle$ в трех различных формах [22], а также на свойстве полноты набора волновых функций $|n^*l\rangle$ относительно радиальной координаты r . В случае атома водорода $U(r) = -r^{-1}$, $F(r) = F_1(r) = (l+1) \cdot l / (l+0,5) r^{-3}$; радиальный интеграл в (2.6) известен [22], так что $A_{n,\infty}^{(l \rightarrow l-1)}$ сводится к виду (2.2), где $L_{[17]} = l + 0,5$, $G_{[17]} = \pi / (2\sqrt{3})$. Из рис. 3, а видно, что кривая 2, соответствующая $A_{n,\infty}^{(l \rightarrow l-1)}$ (2.6), действительно ограничивает вероятности радиационных переходов снизу.

Неравенство (2.6) указывает (хотя и косвенным образом) на существование связи между вероятностью A_{n^*l} радиационного распада и волновой функцией $|n^*l\rangle$ излучающего состояния. Более полно эта связь выявляется в работах [5, 18, 19], где в квазиклассическом пределе полная вероятность радиационных процессов определяется через траекторию $r_{\text{кл}}(t)$ классического движения электрона. При анализе времен жизни авторы [5] основываются на выражении для скорости затухания момента количества $L(t)$ электрона при торможении излучением [26]:

$$\frac{\Delta L}{\Delta t} = -\frac{2}{3c^3} \left\langle r^{-1} \frac{dU}{dr} \right\rangle_{\text{кл}} L; \quad (2.8)$$

здесь символ $\langle \rho \rangle_{\text{кл}}$ обозначает усреднение функции $\rho(r)$ по траектории $r_{\text{кл}}$:

$$\langle \rho \rangle_{\text{кл}} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \rho(r_{\text{кл}}(t)) dt \equiv T^{-1} \int_0^T \rho(r_{\text{кл}}(t)) dt. \quad (2.9)$$

Отметим, что в (2.8) характерный масштаб Δt времени изменения параметров орбиты электрона значительно превосходит период радиального движения T_r . При радиационном переходе абсолютная величина L орбитального момента L изменяется в основном на минус единицу (см. выше правило Бете при обсуждении (2.6)). Тогда время $\tau = \Delta t$ перехода можно найти из (2.8), положив $\Delta |L| = -1$:

$$\tau^{-1} = A_{n^*l}^{(L)} = \frac{1}{\Delta t} = \frac{2}{3c^3} \left\langle \frac{L}{r} \frac{dU}{dr} \right\rangle_{\text{кл}}; \quad L = l + 0,5. \quad (2.10)$$

При квазиклассическом рассмотрении электрону с орбитальным квантовым числом l сопоставляется момент количества движения L , равный $(l + 0,5)$ [23]. Для кулонова поля $\langle r^{-3} \rangle_{\text{кл}} = z^3 n^{-3} L^{-3}$ [22], и выражение (2.10) сводится к представлению (2.2) при $L = (l + 0,5)$; $G_{[15]} = \pi / (2\sqrt{3})$. Отметим также идентичность (с точностью до множителя) формулы (2.10) и формулы (2.6) с $F(r) \equiv F_1(r)$ (2.7). Отсюда следует, что функция F_1 (2.7) ответственна за скорость затухания орбитального момента электрона.

Последовательное квазиклассическое описание радиационных процессов затухания дано в работах [18, 19, 27]. За основу принят формализм Фейнмана [28], в рамках которого квантовая система N заряженных частиц, подверженная самодействию в результате электромагнитных флуктуаций (нулевых колебаний) физического вакуума, трактуется как Гамильтонова система. Динамика последней описывается с помощью принципа наименьшего действия для комплексного гамильтониана. Соответственно, полная энергия $E_k = \epsilon_k - (i\hbar A_k/2)$ атомной системы приобретает чисто мнимую добавку, обусловленную высвечиванием света возбужденными состояниями. В [18] с помощью многомерных правил квантования устанавливается однозначная связь между набором k классических

траекторий движения и энергетическим спектром E_k . В результате естественная ширина A_k , будучи мнимой частью полной энергии E_k , выступает совместно с положением энергии ε_k в качестве характеристики только излучающего состояния k . Подчеркнем, что в данном подходе отсутствуют индивидуальные переходы между возбужденными уровнями, и при определении $\tau_k = A_k^{-1}$ отпадает необходимость знать волновые функции всех нижележащих состояний. С формальной точки зрения энергия E_k является диагональным матричным элементом комплексного гамильтониана, что обеспечивает высокую точность квазиклассической схемы расчета. Изложению квазиклассической теории радиационного времени жизни и ее применений посвящен третий раздел настоящего обзора. Здесь остановимся на результатах, касающихся расчета A_{nl} для кулонова поля: A_{nl} имеет представление типа (2.2), где функция $G(n, l) \equiv G_H(L/n)$ задается соотношением (3.18). На рис. 3, а приведены значения $G_H(p)$ (сплошная кривая 3) в зависимости от параметра $p = (l + 0,5)/n$; $l > 0$. Причины небольшого отклонения квазиклассического расчета (кривая 3, на рис. 3, а) от квантовомеханического (точки на рис. 3, а) обсуждаются ниже. Случай s-серии требует специального рассмотрения (раздел 3.6) и представлен на рис. 3, б. Видно, что квазиклассическая формула (3.30), (3.32), также относящаяся к виду (2.2), хорошо описывает (сплошная кривая) результаты квантовомеханического расчета [24] (кружки) A_k для s-состояний атома водорода.

3. Одноканальная теория для определения радиационных времен жизни τ_k . Исследование серийных закономерностей связано с поиском аналитических свойств времен жизни как функций от положения энергии уровня внутри серии. Решение возникающих здесь задач удобно проводить по аналогии с теорией квантового дефекта [12], поскольку в силу природы эффективного квантового числа n^* :

$$E_k = \varepsilon_k - \frac{iA_k}{2} = -\frac{z^2}{2n_c^{*2}}, \quad n_c^* = n - \mu(E_k), \quad (3.1)$$

факт комплексности полной энергии E_k уровня k означает появление небольшой мнимой добавки у квантового дефекта μ :

$$i \operatorname{Im} \mu(\varepsilon_k) = n^{*3} z^{-2} \left(1 + z^2 n^{*-3} \frac{\partial \mu}{\partial \varepsilon_k} \right) \cdot \frac{iA_k}{2}. \quad (3.2)$$

Соотношение (3.2) получается при рассмотрении определения (3.1) в качестве уравнения относительно мнимой части E_k .

3.1. Обозначения и допущения. Описания серийных закономерностей будем проводить в рамках формализма квантования [18] радиационной ширины A_k . При анализе реальных атомных систем ограничимся одноканальным (одноэлектронным) приближением (ОП). Излучение фотонов осуществляется без изменения состояния атомного остова в результате переходов одного внешнего (оптического) электрона. Движение последнего за счет взаимодействия с электроном остова происходит в некотором эффективном центральном потенциале $U(\mathbf{r})$ с кулоновской асимптотикой $U(\mathbf{r}) \simeq -z/r$; $r \rightarrow \infty$. Индивидуальный член серии k характеризуется тройкой $k = \{m, l, n_r\}$ квантовых чисел: азимутальным, орбитальным и радиальным соответственно. Параметры классической орбиты \mathbf{r}_t электрона: энергия ε , орбитальный момент \mathbf{L} ,

период радиального движения T_r , поворот орбиты на угол $\Delta\theta_r$ за период T_r — однозначно задаются для возбужденного состояния k потенциалом $U(r)$ и правилами многомерного квантования Эйнштейна — Бриллюэна — Келлера (ЭБК) [29—31]:

$$|L| = l + 0,5, \quad l > 0, \quad L = 0, \quad l = 0, \quad U_{\text{eff}}(r) = U(r) + \frac{L^2}{2r^2}, \quad (3.3)$$

$$S_r = 2 \int_0^{T_r} (2\varepsilon - 2U_{\text{eff}}(r))^{1/2} dr, \quad S_r(\varepsilon, L) = 2\pi \left(n_r + \frac{1}{2} \right), \quad (3.4)$$

$$n^* = n_r + l + 1 - \mu \equiv n - \mu, \quad \Delta\theta_r = -\frac{\partial S_r}{\partial L}, \quad T_r = \frac{\partial S_r}{\partial \varepsilon}; \quad (3.5)$$

здесь S_r — действие для одномерного радиального движения электрона с потенциалом U_{eff} (3.3); центробежный параметр $L = |L|$ в квазиклассическом пределе равен $l + 0,5$ (поправка Лангера [23]). Ниже нам потребуется несколько представлений для периода T_r , удобных при анализе его поведения внутри серии:

$$T_r = 2\pi \frac{\Delta n_r}{\Delta \varepsilon} = 2\pi n^{*3} z^{-2} \left(1 + z^2 n^{*-3} \frac{\partial \mu}{\partial \varepsilon} \right), \quad \varepsilon = -\frac{z^2}{2n^{*2}}. \quad (3.6)$$

Первое равенство следует из (3.5) и правила квантования Бора — Зоммерфельда (3.4) $\Delta S_r = 2\pi \Delta n_r$; второе получается из первого при замене Δn_r на $\Delta n^* + \Delta \mu$ и учете соотношения $\partial \varepsilon / \partial n^* = z^2 n^{*-3}$ (см. (3.6)).

В условиях применимости одноканального приближения общее соотношение между A_k и классическими траекториями движения принимает вид [19]

$$A_k = I (A_k^{(\text{кл})} - A_k^{(\text{кв})}), \quad A_k^{(\text{кв})} = \frac{e^2}{3m^2 c^3} \frac{1}{T_r} \int_0^{T_r} \hat{\Delta} U(r_t) dt, \quad (3.7)$$

$$A_k^{(\text{кл})} = \frac{2e}{\hbar} \frac{1}{T_r} \int_0^{T_r} \frac{dr_t}{dt} A(t) dt, \quad A(t) = \frac{e}{3\pi c^3 m} P \int_{-\infty}^{\infty} \nabla U(r_{\bar{t}}) \frac{d\bar{t}}{\bar{t} - t}; \quad (3.8)$$

здесь A имеет смысл векторного потенциала самодействия. Множитель I учитывает фермиевскую статистику электронов атома и зависит от типа связи орбитальных и спиновых моментов электронов в конфигурациях, между которыми осуществляется переход оптического электрона [22]. В случае щелочных атомов и подобных им ионов $I = 1$. Отметим периодичность (период T_r) подынтегральной функции в (3.8) по переменной t , что сводит среднее по промежутку T при $T \rightarrow \infty$ к среднему по T_r . Второе слагаемое $A_k^{(\text{кв})}$ в (3.7) имеет квантовомеханическую природу; благодаря ему вероятность радиационного распада основного и метастабильных состояний атомной системы обращается в нуль.

Соотношение (3.7) позволяет прокомментировать формально полученный ранее факт возникновения мнимой части у квантового дефекта (3.2). Если сравнить (3.2) с (3.6), то

$$\text{Im } \mu = \frac{T_r}{2} \frac{A_k}{2\pi}. \quad (3.9)$$

В соответствии с (3.8) оказывается, что $\text{Im } \mu = \text{Im } \Delta S(r_{T_r}) / (2\pi)$. Таким образом, мнимая часть квантового дефекта совпадает с точностью до

2л с комплексным изменением фазы, которая набегает за период T_r в волновой функции в результате взаимодействия возбужденного состояния k с нулевым состоянием квантового электромагнитного поля. Эта ситуация согласуется с ролью μ в квантовой механике, когда квантовый дефект вбирает в себя дополнительный по сравнению с кулоновским набег фазы за счет взаимодействия оптического электрона с электронами остова [12, 23].

Укажем на важное свойство квазиклассической формулы (3.7): она хорошо описывает радиационные времена жизни для потенциалов без особенностей даже в области малых квантовых чисел. Действительно, в этом случае траектории \mathbf{r}_t располагаются в окрестности минимума потенциала $U(\mathbf{r})$, где $U(\mathbf{r})$ можно заменить квадратичной функцией. Полное действие $S_{\text{ат}} + J - J_{\text{кв}}$, определяющее динамику электронов, также становится квадратичным функционалом от \mathbf{r}_t , и поэтому (3.7) дает точный результат [28]. Так, например, для трехмерного осциллятора с потенциалом $U(r) = \omega^2 r^2/2$ из (3.7) следует соотношение

$$A_k = \frac{2\omega^3}{3c^3} [(2n_r + l + 1,5) - 1,5], \quad (3.10)$$

совпадающее с квантовомеханическим. Согласно (3.10) в основном состоянии ($l = n_r = 0$) квантовая добавка $A_k^{(\text{кв})}$ (член 1,5 в квадратных скобках) полностью компенсирует классическую часть $A_k^{(\text{кл})}$ радиационной ширины A_k .

3.2. Главные члены разложения A_k по энергии и ϵ . При разложении (3.7) в ряд по степеням ϵ удобно в подынтегральные выражения внести явную зависимость от энергии ϵ . С этой целью зададим полярную систему координат (θ, r) в плоскости движения электрона; временные переменные интегрирования (t, \tilde{t}) в (3.7), (3.8) заменим на радиальные:

$$t(r) = \int_{r_L}^r \frac{dr}{v_\epsilon(r)}, \quad \theta(r) = L \int_{r_L}^r \frac{dr}{r^2 v_\epsilon(r)}, \quad v_\epsilon(r) = (2\epsilon - 2U_{\text{eff}}(r))^{1/2}, \quad (3.11)$$

где v_ϵ — радиальная скорость движения, r_L (r_H) — левая (правая) точка поворота. Выявление аналитической структуры $A_k(\epsilon)$ осложняется следующим фактом. Стоящие в (3.7), (3.8) контуры интегрирования по переменным r (\tilde{r}) (Γ — от левой точки поворота до правой и обратно, $\tilde{\Gamma}$ — бесконечный набор Γ) вместе с $r_{L,H}$ зависят от ϵ . Чтобы избавиться от этой зависимости, превратим Γ ($\tilde{\Gamma}$) в циклы C (\tilde{C}) в плоскостях комплексных переменных (r, \tilde{r}) за счет проведения разреза, соединяющего точки ветвления r_L, r_H аналитической функции $v_\epsilon(r)$ (3.11). Циклы C в комплексных плоскостях можно деформировать в другие контуры Γ_c так, чтобы Γ_c и $\tilde{\Gamma}_c$ не имели общих точек и не были связаны с точками поворота. В отличие от Γ , когда $r_n \rightarrow \infty$ при $\epsilon \rightarrow 0$, положения Γ_c удается фиксировать. Обратим внимание на один момент: при размыкании контуров Γ и $\tilde{\Gamma}$ необходимо проходить через особенности главного значения функции $P(t(r) - t(\tilde{r}))^{-1}$ (3.8) в точках $r = \tilde{r}$, что приводит [32] к появлению дополнительного r -локального слагаемого $A_k^{(L)}$ в (3.7):

$$A_k = \tilde{I} (\text{Re } A_{\text{кс}}^{(\text{кв})} + A_k^{(L)} - A_k^{(\text{кв})}), \quad A_k^{(L)} = \frac{2}{3c^3} \frac{1}{T_r} \int_0^{T_r} \frac{dU(r)}{dr} \frac{L}{r} dt; \quad (3.12)$$

здесь $A_{\kappa c}^{(\kappa \pi)}$ дается двойным интегралом типа (3.8), который берется вдоль контуров Γ_c и $\tilde{\Gamma}_c$. Последние лежат в плоскостях комплексных переменных r, \tilde{r} соответственно и охватывают разрез слева. В конечных областях (r, \tilde{r}) все подынтегральные функции вслед за скоростью v_e (3.11) можно разложить в ряд по степеням ε , что вносит в A_k (3.12) слагаемые вида $\sum c_m \varepsilon^m$. Коэффициенты c_m зависят от деталей поведения потенциала вблизи атомного остова. Вследствии дальнегодействующего кулоновского «хвоста» — z/r двойное интегрирование по (r, \tilde{r}) на бесконечности приводит к возникновению в $A_{\kappa c}^{(\kappa \pi)}$ (3.12) специфического логарифмического по ε члена, который определяется только углом поворота $\Delta\theta_r$. Опуская детали доказательства, укажем главные члены разложения A_k по степеням $\varepsilon \sim (n^*)^{-2}$:

$$\tau_k^{-1} = A_k = \alpha z^2 \frac{2I}{T_r} \frac{G}{L^2}, \quad G = C_0 - \frac{D_1}{5} \frac{L^2}{n^{*2}} \frac{\ln(n^{*2}/L^2)}{1-p^2} + \frac{C_1 L^2}{n^{*2}} + O(p^4), \quad (3.13)$$

$$p = \frac{L}{n^*}, \quad D_1 = \cos(\Delta\theta_r) \left(-\frac{9\sqrt{3}}{8\pi} \right) \sin^2 \frac{\Delta\theta_r}{2}, \quad \text{Im } \mu = \alpha z^2 \frac{I}{2L^2} G. \quad (3.14)$$

Отметим, что соотношение (3.13) согласуется с представлением (2.2) для вероятности радиационного распада возбужденных состояний атома водорода. Параметр p (3.14) контролирует правомерность продолжения разложения (3.13) с высоковозбужденных состояний данной серии уровней на низколежащие, определяя критическое значение n_{cr}^* согласно равенству $p^4(n_{cr}^*) = G(n_{cr}^*)$; при $n^* > n_{cr}^*$ пренебрежение слагаемыми $O(p^4)$ в (3.13) допустимо. В дальнейшем (см. раздел 4) на основе соотношения (3.13) будет построена экстраполяционная схема, которая позволит в условиях ОП по нескольким низколежащим состояниям фиксированной l -серии получать τ_k всех членов серии вплоть до континуума. Параметр C_0 при этом для медленного теплового l -электрона определит сечение фоторекомбинации на соответствующем ионном остатке.

В случае водородоподобных атомов и ионов результат (3.13) удастся существенно уточнить (см. в [19]):

$$G_H = 1 + \frac{1}{5} \frac{p^2 \ln p^2}{1-p^2} \left(1 + \frac{39}{56} p^2 \right) + 0,122 p^2 + O(p^4), \quad p = \frac{L}{n}. \quad (3.15)$$

Для кеплеровских орбит угол поворота $\Delta\theta_r = 2\pi$ [29], и согласно (3.14) $D_1 = 1$ для всех серий. Отметим, что структура логарифмического члена в (3.13) записана в соответствии с (3.15). Обратим также внимание на совпадение в (3.14) с точностью до множителя функции G и μ (3.9). Другими словами, представление (3.13) определяет поведение мнимой части квантового дефекта для малых ε .

3.3. Низколежащие возбужденные состояния. Существует еще одно (нефизическое) значение $p_0 \sim 1$, когда величина $G(p_0)$ имеет простой вид. Если в (3.4) формально положить $n_r = -0,5$, то $S_r = 0$. Энергия электрона $\varepsilon(n_r = -0,5) \equiv \varepsilon_0$ совпадает с минимумом эффективного потенциала $U_{\text{eff}}(r_0) = \min U_{\text{eff}}$, а сам электрон, попав на дно потенциальной ямы U_{eff} , находится на круговой орбите радиуса r_0 и движется вокруг силового центра с частотой обращения $\nu_{\theta}^{(0)} = L/(2\pi r_0^2)$. Левая и правая точки поворота сливаются друг с другом, разрез аналитической функции (3.11) исчезает, поэтому вероятность $A_{\kappa c}^{(\kappa \pi)}$ (3.12) обраща-

ется в нуль. Переписав (3.12) в соответствии с определением (2.9)

$$\frac{A_k}{I} = \frac{2}{3c^3} \left\langle \frac{L}{r} \frac{dU}{dr} \right\rangle_{\text{кл}} - \frac{1}{3c^3} \langle \hat{\Delta} U(r) \rangle_{\text{кл}} + A_{\text{кс}}^{(\text{кл})} \quad (3.16)$$

и положив $\langle r \rangle_{\text{кл}} = r(r_0)$ на круговой орбите $r = r_0$, получим

$$G(\epsilon_0) = \frac{\pi}{4\sqrt{3}} \frac{L^2}{1 + [z^2/(L - \mu_0)^3] \partial \mu / \partial \epsilon_0} \frac{1}{(L - \mu_0)^3} \left[(2L + 1) \left(\frac{\Delta \theta_r^{(0)}}{2\pi} \right)^2 - 1 \right]. \quad (3.17)$$

При выводе (3.17) использована связь $\omega_r = U_{\text{эф}}'(r_0) = U_0' - 3L^2 r_0^{-4}$ между частотой $\nu_r = \omega_r/2\pi$ радиального движения и второй производной потенциала U_0'' на дне ямы; отсюда же вытекает соотношение $\hat{\Delta} U(r_0) = \omega_r^2 - \omega_\theta^2$. Энергия ϵ_0 лежит ниже энергии первого уровня серии $\epsilon(n_r = 0)$, и значения функций в ϵ_0 (индекс «0» в (3.17)) находятся путем аналитического продолжения сверху. Для кулонова поля $\mu = 0$, $p(n_r = -0,5) = 1$, т. е. $G_H(p = 1) = \pi/2\sqrt{3}$. Отметим, что разложение G_H (3.15) можно продолжить до значения $p = 1$ за счет подходящего выбора коэффициента C_1 в (3.13). Например, функция G_H , полученная в результате подобной «сшивки» верха (3.13) и низа (3.17) l -серии атома водорода,

$$G_H(p) = 1 + 0,2p^2 (\ln p^2) (1 - p^2)^{-1} + 0,110p^2, \quad (3.18)$$

описывает G_H для $0 \leq p \leq 1$ с точностью до десятой доли процента.

Приведенный пример обращения $A_{\text{кс}}^{(\text{кл})}$ (3.16) в ноль моделирует обшую ситуацию, когда вектор $A(t)$ в (3.8) становится простой r -локальной функцией: требуется медленность радиального движения по сравнению с угловым: $v_\theta > v_r$, или $\Delta \theta_r > 2\pi$. В этом случае траектория $\mathbf{r}_{\text{кл}}(t)$ представляет из себя спираль с относительно «замороженным» и почти гармоническим круговым движением частоты $\omega_\theta = L/r^2$. Гармоническая временная функция $\exp(i\omega_\theta t)$ при действии на нее интегрального оператора из (3.8) умножается на $i\pi$ [32], так что $\mathbf{v}A(t) = |\mathbf{v}| \cdot \pi dU/dr$. С учетом $|\mathbf{v}| \approx v_\theta = L/r$ оказывается, что вероятность A_k (3.7) сводится к (3.16) при $A_{\text{кс}}^{(\text{кл})} = 0$.

3.4. Критерии выполнимости правила Бете.
Из полученных выше трех эквивалентных формулировок

$$A_k^{(\text{кл})} \approx A_k^{(L)} \equiv \frac{2}{3c^3} \left\langle \frac{L}{r} \frac{dU}{dr} \right\rangle_{\text{кл}}, \quad A_{\text{кс}}^{(\text{кл})} \approx 0, \quad \beta \equiv \frac{\Delta \theta_r}{2\pi} > 1 \quad (3.19)$$

можно извлечь интересные физические следствия. Сравнение (3.16) с (2.6) указывает на их идентичность (с точностью до несущественных множителей ~ 1) при условии выполнения (3.19) и замены квантовомеханических средних на классические (2.9): $\langle k | F | k \rangle \sim \langle F \rangle_{\text{кл}}$ [23]. Другими словами, (3.19) следует рассматривать в качестве критерия правомерности правил Бете применительно к суммарным вероятностям радиационных переходов. Условиям (3.19) можно придать более наглядное толкование, если обратиться к результатам работы [16]: в квазиклассическом пределе при подавляющей вероятности переходов вниз с изменением l на (-1) (правило Бете) излучение света регулируется принципом Франка — Кондона. Испущенный фотон частоты ω_ϕ уносит с собой разностную энергию $\Delta U_{\text{эф}}$ между начальным и конечным значениями $U_{\text{эф}}$ в точке перехода r : $\omega_\phi(r) = U_{\text{эф}}^{(l)} - U_{\text{эф}}^{(l-1)} = l/r^2 = \omega_\theta$ (см. (3.3)), т. е. в случае выпол-

нимости правила Бете круговая частота движения электрона совпадает с частотой излученного кванта света. Преобладание кругового движения над радиальным реализуется в окрестности левой точки поворота $r_{\text{л}}$, где ω_0 принимает максимальное значение и где происходит основной набег угла $\Delta\theta_r$. Поэтому выполнимость (3.19) контролируется степенью «размазанности» Δr носителей подынтегральных функций в классическом среднем $\langle \dots \rangle_{\text{кл}}$ около $r_{\text{л}}$. Если $\Delta r \ll r_{\text{л}}$, то наиболее вероятно высвечивание фотонов около $r_{\text{л}}$ на больших частотах. Основной вклад в сумму A_k (2.4) ($k = \{l, n_r\}$) дают переходы в несколько n_0 -первых (~ 1) членов серии ($l-1$). В обратном случае ($\Delta r \gg r_{\text{л}}$) вероятность испускания вместе с частотой фотонов сравнительно равномерно распределяются по r , ω : $n_0 \gg 1$. Малость параметра β (3.19) (правило Бете не работает) коррелирует с равноправным представительством в (2.1) почти всех членов ряда

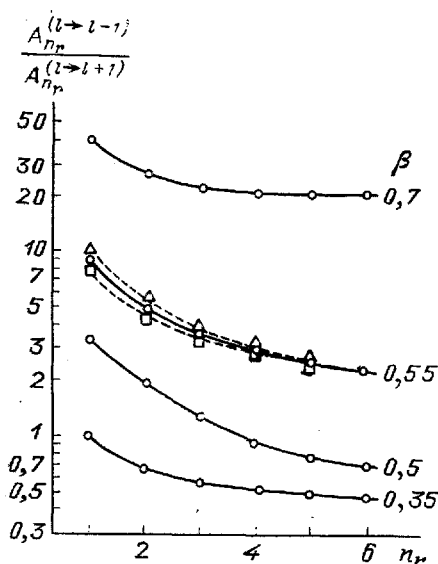


Рис. 4. Отношение полных вероятностей $A_{n_r}^{(l \rightarrow l \pm 1)}$ радиационных переходов с фиксированным изменением орбитального квантового числа l на плюс ($l \rightarrow l+1$) или минус ($l \rightarrow l-1$) единицу для потенциала U_α (3.20). По оси абсцисс отложено радиальное квантовое число n_r для возбужденного состояния l -серии; значение параметра β , определяющего поворот $\Delta\theta_r$ орбиты электрона ($\Delta\theta_r = 2\pi\beta$), нанесено рядом с кривыми. Сплошные линии: $l=3$, штриховые: $l=4$ (верхняя) и $l=1$ (нижняя)

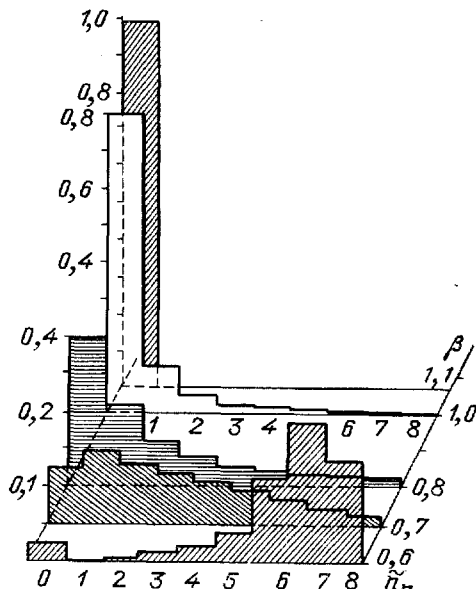


Рис. 5. Спектр испускания фотонов девятым уровнем ($n_r=8$) p -серии для потенциала U_α (3.20) при разных значениях параметра β . По оси ординат отложены относительные вероятности

$$A_{n_r}^{(l \rightarrow l-1)} / A_{n_r}^{(l \rightarrow l-1)}$$

радиационных переходов при фиксированном верхнем уровне ($n_r=8$, $l=1$). Площадь под кривыми нормирована на единицу

A_k . На рис. 4, 5 представлена иллюстрация этого вывода на примере квантовомеханического расчета полных вероятностей радиационных переходов $A_k^{(l \rightarrow l \pm 1)}$ при движении электрона в силовом поле с модельным потенциалом

$$U_\alpha(r) = -\frac{1}{r} + \frac{\alpha}{2r^2}, \quad U_{\text{eff}} = -\frac{1}{r} + \frac{L_{\text{eff}}^2}{2r^2}, \quad L_{\text{eff}} = (L^2 + \alpha)^{1/2}, \quad \beta = L(L^2 + \alpha)^{-1/2}. \quad (3.20)$$

Функция U_α отличается от кулоновской слагаемым типа центробежной добавки в (3.3). Величина L_{eff} (3.20) имеет смысл эффективного центробежного параметра для радиального движения; угол поворота орбиты $\Delta\theta_r$ оказывается равным $2\pi L/L_{\text{eff}}$, независимым от энергии электрона. Точки рис. 4 дают параметр ветвления $W_k = A_k^{(l \rightarrow l-1)}/A_k^{(l \rightarrow l+1)}$ ($k = n_r$) для первых уровней f-серий ($l = 3$) и нескольких значений α . Кривые рис. 5 определяют относительный вклад парциальных вероятностей переходов $A_{n_r \rightarrow \tilde{n}_r}^{(1 \rightarrow 0)}/A_{n_r}^{(1 \rightarrow 0)}$ для 9-го уровня ($n_r = 8$) p-серии при разных β (3.20). Видно, что в соответствии с (3.19) по мере уменьшения β правило Бете перестает выполняться (см. рис. 4), причем одновременно наблюдается уширение спектра испускаемого атомом света (см. рис. 5).

Отметим, что изменение номера серии слабо сказывается на характере поведения и положении относительно оси ординат кривых рис. 4. Последнее находит объяснение при обращении к физическому смыслу представления (3.19) для вероятности $A_k^{(kl)}$. Ранее указывалось, что $(-A_k^{(L)})$ (2.10) дает скорость изменения классического момента количества движения электрона за счет сил реакции излучением. Если $A_k^{(L)}$ (3.19) больше нуля, то по мере движения электрона происходит уменьшение l ; предпочтительны переходы с $l \rightarrow l - 1$, и $W_k \gg 1$. В обратной ситуации при $A_k^{(L)} < 0$ высвечивание фотона в рамках классического приближения приводит к увеличению l , соответственно $W_k \lesssim 1$. Скорость $A_k^{(L)}$ (3.19) для потенциала U_α (3.20) описывается простым соотношением типа (3.13), где $G^{(L)}$ состоит из двух слагаемых:

$$G^{(L)} = C_0^{(L)} + \frac{C_1^{(L)}}{n^{*2}}, \quad C_0^{(L)} = \frac{\pi}{2\sqrt{3}} \beta^3 [1 + 1,5(\beta^2 - 1)], \quad (3.21)$$

$$C_1^{(L)} = -\frac{\pi}{3\sqrt{3}} \beta^3 (\beta^2 - 1), \quad n^* = n_r + L_{\text{eff}} + 0,5. \quad (3.22)$$

Очевидно, что для ридберговских состояний коэффициент C_0 определяет эффективность радиационных процессов. Из (3.21) видно, что при $\beta = \beta_0 = 1/\sqrt{3} = 0,57$ скорость изменения L меняет знак. При $\beta > \beta_0$ скорость $(-A_k^{(L)}) < 0$, т. е. здесь $W_k \gg 1$. При $\beta < \beta_0$ скорость $(-A_k^{(L)}) > 0$ и $W_k \sim 1$. Из рис. 4 видно, что значение β_0 параметра β действительно является критическим для выполнения правила Бете (кривые с $\beta = 0,5$ и $0,35$).

Отметим, что структура спектра свечения рис. 5 хорошо согласуется с результатами работ [14, 15]. При преобладании переходов вниз с большим изменением энергии ($\beta > 0,7$) предпочтителен канал высвечивания с уменьшением l (см. рис. 4). Если в свечении в основном представлены «мягкие» фотоны, то есть предпочтительны переходы между близлежащими уровнями (кривая с $\beta = 0,6$ на рис. 5), то правило Бете перестает выполняться (см. рис. 4).

3.5. Поправки к квазиклассическим формулам. Сингулярность кулоновского потенциала $U = -z/r$ в начале координат приводит к возникновению особенностей у подынтегральных функций $\Delta U(r)$ и ∇A в представлениях (3.7), (3.8). В этой ситуации квазиклассические средние могут отличаться от квантовомеханических, поэтому необходимо вводить поправки в классическую схему квантования Бора — Зоммерфельда. Здесь мы воспользуемся приемом, восход...

щим к Лангеру, который за счет переопределения эффективного квантового числа состояния существенно улучшил точность квазиклассических формул.

При исследовании аналитических свойств нелокального векторного потенциала $A(t)$ (3.8) полезным техническим приемом, как и ранее, является смещение контура интегрирования по \tilde{t} в комплексную область (см. пункт 3.2). Оказывается, что A распадается на два слагаемых $A(t) = \text{Re } A_c + A_s(r)$, соответствующих двум первым членам формулы (3.12):

$$A_k = 2\text{Re} \langle vA_c \rangle_{\text{кл}} + 2 \langle vA_s \rangle_{\text{кл}} - (3c^3)^{-1} \langle \hat{\Delta}U \rangle_{\text{кл}}, \quad vA_s = L \frac{dU}{dr} \frac{1}{3c^2 r}. \quad (3.23)$$

Главную особенность $A(t)$ вбирает r — локальный потенциал $A_s(t)$: слагаемое $A_c(t)$ так же, как и $A(t)$, нелокально, однако оно конечно в комплексной области r около точки $r = 0$. Поэтому квазиклассическое среднее $\langle vA_c \rangle_{\text{кл}}$ хорошо описывает среднее квантовомеханическое. Напротив, функция $f_s = vA_s(r)$ (3.23) обладает r^{-3} расходямостью, так что $\langle f_s \rangle_{\text{кл}}$ и $\langle f_s \rangle_{\text{кв}} = \langle k | f_s | k \rangle$ дают немного различающиеся результаты [23, 33]:

$$\langle r^{-3} \rangle_{\text{кл}} = 2\pi z (T_r L^3)^{-1}, \quad \langle r^{-3} \rangle_{\text{кв}} = 2\pi z (T_r L^3)^{-1} L^2 (L^2 - 0,25)^{-1}, \\ T_r = 2\pi n^3 z^{-2}. \quad (3.24)$$

Для учета этого факта в (3.23) следует заменить $\langle \dots \rangle_{\text{кл}}$ на $\langle \dots \rangle_{\text{кв}}$:

$$A_k = 2 \left\langle vA - \frac{\tilde{L}}{3c^3 r} \frac{dU}{dr} \right\rangle_{\text{кл}} \Big|_{\tilde{L} \rightarrow L} + \frac{2\tilde{L}}{3c^3} \left\langle \frac{1}{3r} \frac{dU}{dr} \right\rangle_{\text{кв}} - \frac{1}{3c^3} \langle \hat{\Delta}U \rangle_{\text{кв}}. \quad (3.25)$$

Первое усреднение в (3.25) производится с ограниченной функцией $(vA - vA_s)$, и его можно выполнять по квазиклассической схеме. Обозначение \tilde{L} указывает на происхождение L в (3.23) от кеплеровой орбиты электрона $r_{\tilde{t}}$ по переменной \tilde{t} . В регулярном случае $\tilde{L} = L$. Подчеркнем, что в выражении (3.35) осуществлено корректирование на сингулярность только внешнего квазиклассического среднего по \tilde{t} в (3.8); внутреннее усреднение по \tilde{t} пока никак не затрагивается, хотя $\nabla U(\tilde{t})$ расходуется в $\tilde{r} = 0$. Это затруднение снимается за счет переопределения момента $L \rightarrow L_c$ единой орбиты $r_{t,\tilde{t}}$ в (3.8) таким образом, чтобы среднее $\langle vA \rangle_{\text{кл}}|_{L_c}$ совпало с квантовомеханическим при моделировании vA его r -локальной сингулярной частью $vA_s \sim r^{-3}$. Сравнивая $\langle r^{-3} \rangle_{\text{кл}}$ (где $L \rightarrow L_c$) и $\langle r^{-3} \rangle_{\text{кв}}$ из (3.24), получим $L_c = [1 - (0,25/L^2)]^{1/3} L$. Замена $\tilde{L} \rightarrow L_c$ необходима для уточнения приближения ВКБ по «внутренней» переменной \tilde{t} в A (3.8). Отметим, что стандартная поправка Лангера $l \rightarrow L = l + 0,5$ [23] учитывает особенность r^{-2} центробежного потенциала и находится из требования равенства двух средних $\langle F \rangle_{\text{кв}}$ и $\langle F \rangle_{\text{кл}}$ для произвольной гладкой функции $F(r)$ [33]. В связи с этим квазиклассическое среднее в (3.25) по «внешней» переменной t должно браться при стандартном L , что отражено в первом слагаемом (3.25). Таким образом,

$$A_{ln}^{(H)} = \frac{\tilde{L}}{L} A_k^{(\text{кл})} - \frac{2}{3c^3} L \left\langle \frac{z}{r^3} \right\rangle_{\text{кл}} + \frac{2}{3c^3} \tilde{L} \left\langle \frac{z}{r^3} \right\rangle_{\text{кв}}, \quad \tilde{L} = L \left(1 - \frac{1}{4L^2}\right)^{1/3}, \quad (3.26)$$

где $A_k^{(\text{кл})}$ совпадает с полученными ранее выражениями (3.13), (3.18) для кулонова поля. Множитель \tilde{L}/L перед $A_k^{(\text{кл})}$ переопределяет $L \rightarrow \tilde{L}$ для «внутренней» переменной интегрирования \tilde{t} из двойного интеграла (3.8)

в $A_k^{(кл)}$ (3.26). Из рис. 3, а видно, в какой степени (штриховые кривые) поправки (3.26) на сингулярность кулоновского потенциала улучшают точность квазиклассической формулы (3.13), (3.18).

3.6. Квантование радиационной ширины s-состояний. В кулоновом поле s-электрон проходит через начало координат, где потенциал, а за ним и скорость электрона обращаются в бесконечность. В окрестности ядра применимость нерелятивистского приближения нарушается, и, как следствие, двойной интеграл (3.8) расходится из-за сильной сингулярности ускорения $|\dot{v}| = z/r^2$ в кулоновском центре. Однако вне остова $A_k^{(кл)}$ (3.8) имеет смысл, определяя в основном зависимость вероятности A_k от энергии электрона. Для s-состояний поэтому естественно из $A_s(\varepsilon)$ выделить расходимости в виде не определенных теорией параметров и найти эти параметры, используя априорную информацию (см. ниже). В целях осуществления регуляризации A_s прямолинейную траекторию $r_e^{(s)}(t)$ s-электрона необходимо заменить на близкую к ней кривую $r_\rho(t)$. Последняя должна удовлетворять требованию $r_\rho(t) \rightarrow r_e^{(s)}(t)$ при $\rho \rightarrow 0$ (ρ — параметр регуляризации) и не пересекать точку $r = 0$. В качестве $r_\rho(t)$ будем брать орбиты $r_{\rho, \varepsilon}(t)$ измененного кулоновского потенциала $U_k(r) \rightarrow U_\rho^{(i)}$ для фиксированного класса (i) функций $U_\rho^{(i)}$; например, возможны $U_\rho^{(1)} = -(z/r) + (\rho^2/2r^2)$, $U_\rho^{(2)} = -[zr/(r^2 + \rho^2)]$ и так далее. Еще один тип регуляризации реализуется за счет придания кеплеровской орбите малого момента количества движения L , здесь $\rho = |L|$.

Указанные примеры обладают важной особенностью. Для $r_{\rho, \varepsilon}(t)$ выполняются кеплеровские правила подобия при изменении масштаба $r \rightarrow r_\delta = \delta r$ пространственной координаты с одновременным переопределением параметра регуляции ρ :

$$t \rightarrow t_\delta = \delta^{3/2} t, \quad v \rightarrow v_\delta = \delta^{-1/2} v, \quad \varepsilon \rightarrow \varepsilon_\delta = \delta^{-1} \varepsilon; \quad \rho \rightarrow \rho_\delta = \delta^{1/2} \rho. \quad (2.27)$$

Соотношения (3.27) позволяют по орбите $r_{\rho_\delta, \varepsilon_\delta}$ потенциала $U_{\rho_\delta}^{(i)}$ найти как решение $r_{\rho, \varepsilon}(t) = \delta^{-1} r_{\rho_\delta, \varepsilon_\delta}(t_\delta)$ уравнения Ньютона для потенциала $U_\rho^{(i)}$, так и основные динамические характеристики его траекторий. Из (3.27) и уравнений Ньютона вытекает допустимый класс функций $U_\rho^{(i)}(r)$, регуляризирующих кулоновский потенциал и сохраняющий законы Кеплера (3.27):

$$U_\rho^{(i)}(\delta r) = \delta^{-1} U_{\delta^{1/2} \rho}^{(i)}(r), \quad U_\rho^{(i)}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} -\frac{z}{r}, \quad U_\rho^{(i)}(r) \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} -\frac{z}{r}. \quad (3.28)$$

Отметим, что согласно интегральному представлению (3.8), где $-\nabla U = (d^2/dt^2) r(t)$, для нахождения $A_s^{(кл)}(\varepsilon, \rho)$ достаточно знать лишь траектории $r_\rho(t)$. Для выбранного типа орбит $|r_\rho| > 0$, поэтому квантовая часть $A_s^{(кв)}$ (3.7) тождественно равна нулю в силу равенства $\hat{A}U_k(r) = 4\pi z \delta^{(3)}(r)$, так что $A_s(\varepsilon) \equiv A_s^{(кл)}(\varepsilon)$ ($\delta^{(3)}$ — трехмерная δ -функция Дирака).

Использование правил подобия (3.27) в формуле (3.8) приводит к соотношению $A_s^{(кл)}(\varepsilon, \rho) = \delta^{2,5} A_s^{(кл)}(\delta^{-1} \varepsilon, \delta^{1/2} \rho)$. Это позволяет за счет выбора масштабного множителя $\delta = \rho^{-1/2}$ сократить число переменных,

от которых зависит A_s :

$$A_s(\varepsilon_n) \stackrel{=}{=} \rho^{-5} A_s^{(кл)}(\rho^2 \varepsilon_n, 1). \quad (3.29)$$

Видно, что проблема нахождения времени жизни s -состояний сводится к анализу зависимости $A_s^{(кл)}$ (3.29) от энергии ридберговского электрона ($\rho^2 \varepsilon_n \rightarrow 0$) для фиксированного потенциала $U_{\rho=1}^{(i)}(r)$, имеющего кулоновское убывание (3.28) на бесконечности. Полученное выше разложение (3.13) полностью задает структуру сингулярных членов для s -электронов. Замена $\varepsilon_n \rightarrow \rho^2 \varepsilon_n$ в (3.29) соответствует преобразованию $n \rightarrow n/\rho$ в (3.13), поэтому для атома водорода

$$A_s(\varepsilon_n) \stackrel{=}{=} \frac{\alpha z^4}{n^3} G_s, \quad G_s \stackrel{=}{=} \left(\frac{C_0}{\rho^2} + \frac{C_1}{n^2} + \frac{1}{5} \frac{\ln \rho^2}{n^2} - \frac{1}{5} \frac{\ln n^2}{n^2} + O\left(\frac{\rho^2}{n^4}\right) \right). \quad (3.30)$$

Значения констант C_0 , C_1 зависят от конкретного вида функции $U_{\rho=1}^{(i)}$. Видно, что расходящимися оказались два параметра $C_0 = C_0/\rho^2$, $C_1 = C_1 + (\ln \rho^2)/5$. Несингулярные члены вероятности $A_s(\varepsilon_n)$ разумно задавать с помощью соответствующих (3.30) членов функции G_H/L^2 (3.15) при значении $|L| = 0,5$:

$$-\frac{1}{5} \frac{\ln n^2}{n^2} + O\left(\frac{\rho^2}{n^4}\right) \rightarrow \frac{4}{5} \frac{p^2 \ln p^2}{1-p^2} \left(1 + \frac{39}{56} p^2\right) + O(p^4); \quad p = \frac{1}{2n}. \quad (3.31)$$

На возможность описания радиального движения s -электронов в квазиклассике с помощью эффективного потенциала $U_{eff} = U + (L^2/2r^2)$ с $L = 0,5$ уже указывалась ранее (поправка Лангера). В случае несингулярных потенциалов это объясняет совпадение $A_{L=0,5}(\varepsilon_n)$ и $A_s(\varepsilon_n)$, что легко продемонстрировать на примере трехмерного осциллятора (3.10), если переписать сомножитель в квадратных скобках в виде $2n_r + L - 0,5$. Включение в (3.30) регулярных членов (3.31) при $L = 0,5$ моделирует ситуацию регулярных силовых полей; сингулярность кулонова потенциала отражена в (3.30) наличием первых трех слагаемых с неопределенными в рамках нерелятивистского приближения константами $C_{0,1}$.

Для отыскания их значений воспользуемся фактом метастабильности $2s$ -состояния атома водорода ($A_s(n=2) = 0$), что позволяет применять принцип минимума $\partial A_s / \partial \rho (n=2) = 0$ для мнимой части A_s полной энергии E_s (3.1).

Предпочтительность выбора состояния с $n = 2$ по сравнению с основным обусловлено его большей приближенностью к ридберговским уровням. Приравнявая производную по ρ от функции G_s (3.30) при $n = 2$ к нулю, получим $C_0 = C_0/\rho^2 = 1/5n^2 = 0,05$. Другое неизвестное C_1 в (3.30) задается условием $A_s(n=2) = 0$, так что

$$G_s(p) = \frac{1}{20} \left[1 + 16p^2 (\ln p^2) (1 - p^2)^{-1} \times \right. \\ \left. \times \left(1 + \frac{39}{56} p^2 \right) + 33,4p^2 \right]; \quad p = \frac{1}{2n}. \quad (3.32)$$

Параметр p для $n \geq 2$ мал, и отбрасывание члена $O(p^4)$ оправдано. На рис. 3, 6 сделано сопоставление квазиклассической функции $20G_s$ (3.32) (сплошная кривая) с ее значениями $(20/\alpha)n^3 A_s$ (кружки), полученными по результатам квантовомеханического расчета радиационной ширины A_s для s -состояний атома водорода ($Z = 1$).

4. Экстраполяционные схемы для нахождения τ_k высоковозбужденных состояний атомов и ионов. Ридберговские состояния атомов, ионов и молекул привлекают все больший интерес исследователей в связи с развитием лазерной спектроскопии, а также благодаря таким практическим приложениям, как разделение изотопов, термоядерный синтез, детектирование инфракрасного и микроволнового излучения. Однако в силу целого ряда причин [6, 34] существующие теоретические и экспериментальные методы исследования атомных систем не в состоянии дать надежные сведения о характеристиках высоковозбужденных состояний. В частности, почти полностью отсутствуют данные по временам жизни ридберговских уровней атомов и ионов. Лишь для атома гелия и атомов щелочных металлов известны в настоящее время значения τ_k для состояний с главным квантовым числом до 20 [35, 36]. В связи с этим в научной литературе [6, 37—40] предложено использовать различные экстраполяционные схемы для оценок времен жизни состояний с большим n . Подбирается некоторый тип аналитической зависимости $\tau_k = f_c(n^*)$ для описания экспериментально (или теоретически) полученных значений τ_k внутри фиксируемой серии уровней. По нижним состояниям определяются подгоночные параметры C , входящие в f_c , после чего $f_c(n^*)$ экстраполируется на неисследованные вышележащие состояния серии.

Практически все упомянутые схемы являются эмпирическими, поскольку зависимости $\tau(n^*)$ в них подбираются формальным образом без строгого обоснования аналитической структуры f_c . Только в простейшем одноканальном приближении (ОП) выявлен функциональный вид (см. раздел 3.2). В других случаях при выборе f_c приходится допускать пропуск. В результате как в условиях ОП [39], так и в приближениях, использующих многоканальную теорию квантового дефекта для расчета τ_k [37, 40], был «потерян» логарифмический по энергии член $\sim (\ln n^{*2})/n^{*2}$ (см. (3.13)), который играет существенную роль для относительно слабоизлучающих состояний. Здесь мы продемонстрируем действие двух экстраполяционных схем. Первая из них [27] строго обоснована, требует выполнения ОП, позволяет получать времена жизни ридберговских состояний вплоть до континуума (раздел 4.1). Вторая [6, 38] дополняет первую в условиях нарушения ОП, является эмпирической (см. раздел 4.2) и основана на проработке большого объема данных по τ_k .

4.1. Одноканальное приближение. В этом случае сериальные закономерности описываются соотношением (3.13), которое представим в виде (см. (3.6))

$$\tau_k^{-1} = \frac{\alpha z^4}{n^{*3}} \left[\frac{C_0}{(l+0,5)^2} + \frac{(\ln p^2) \bar{D}_1}{n^{*2}(1-p^2)^5} + \frac{C_1}{n^{*2}} \right]; \quad p = \frac{l+0,5}{n^*}, \quad |p| < 1. \quad (4.1)$$

Коэффициент α (2.2) равен $1,18 \cdot 10^{10} \text{ с}^{-1}$, параметры $\bar{C}_{0,1} = \bar{I} \cdot C_{0,1}$, $\bar{D}_1 = \bar{I} \cdot D_1$. В (4.1) отброшены слагаемые $O(p^4)$; опущен также множитель $(1 + \partial\mu/\partial n^*)^{-1}$, который в условиях ОП (см. ниже) не существует. Значение p контролирует в разложении (3.13) допустить пренебрежения слагаемыми $O(p^4)$. Применимость (4.1) определяется исключительно правомочностью ОП для данного квантового состояния k . Согласно представлениям, развитым в [18, 19], вероятность A_k является индивидуальной характеристикой возбужденного уровня. Величина τ_k поэтому не чувствует межконфигурационного взаимодействия, которое может возмущать положения нижележащих (или вышележащих) состояний. Прак-

тическим критерием восполнимости ОП и тем самым (4.1) служит плавная зависимость квантового дефекта μ (3.5) от положения энергии ε вдоль серии [41].

Согласно (3.13) время жизни τ_k пропорционально периоду T_r (3.6). Двум соседним уровням серии отвечает единичное изменение радиального квантового числа ($\Delta n_r = 1$). Период T_r оказывается равным $2\pi/\Delta\varepsilon_k$, где $\Delta\varepsilon_k$ — энергетическое расстояние между состоянием k и ближайшим верхним, поэтому $\tau_k \sim \Delta\varepsilon_k^{-1}$. Корреляцию между сериальными зависимостями τ_k и $\Delta\varepsilon_k$ [6] можно проследить на экспериментальном материале (см. рис. 1, 2 и раздел 4.2). Заметим, что при выполнении ОП последнее равенство для T_r в (3.6) предсказывает в основном кубические зависимости T_r и τ_k от n^* .

В разложение (4.1) входят три свободных параметра: $\bar{C}_{0,1}$ и \bar{D}_1 . Их значения находятся методом наименьших квадратов, исходя из значений τ для нескольких состояний, что позволяет по (4.1) восстанавливать радиационные времена жизни всех вышележащих уровней серии. О возможностях подобной экстраполяции можно судить по кривым рис. 6. Точки построены согласно расчету τ_k возбужденных состояний атомов щелочных металлов [36], для которых выполняется критерий ОП. Первоначально экстраполяции (кружки 1) производилась по четырем первым уровням серии. На примере D-серий видна важность контроля (по параметру p) правомерности отбрасывания слагаемого $O(p^4)$ в (3.13) для нижних состояний. Значения $p = (l + 0,5)/n^*$ указаны около первых уровней. Отклонения экстраполированных значений τ_k от истинных существенно уменьшается, если экстраполяцию проводить без первых нижних состояний с $p > 0,87$ (кружки 2). На рисунке также представлены экспериментальные данные [36] (крестики, первые четыре уровня). Видно, что допущенная погрешность определения τ_k (7p-уровень Na) сильно скаывается на точности предсказываемых значений времен жизни (крестики с порядковым номером больше четырех).

Коэффициенты \bar{C}_0 и $\bar{D}_1 = \bar{I}D_1$ в (4.1) содержат полезную физическую информацию, касающуюся процесса рассеяния медленных тепловых электронов на соответствующем ионном остатке. Параметр D_1 (3.14) позволяет оценить классический угол рассеяния θ_r ($\varepsilon_k \rightarrow 0$), а значение \bar{C}_0 можно связать с парциальным сечением радиационной рекомбинации $\sigma_p^{(l)}$. Возникающая здесь ситуация типична для теории квантового дефекта, когда по спектроскопическим данным определяется ряд важных свойств состояний континуума [12]. Действительно, произведение $A_k T_r$, переписанное в виде

$$W^{(l)} = A_k T_r = 2\pi\alpha z^2 [\bar{C}_0 (l + 0,5)^{-2} + O(p^2)], \quad p^2 = -2(l + 0,5)^2 \varepsilon_l z^{-2}, \quad (4.2)$$

дает вероятность $W^{(l)}$ высвечивания фотона ридберговским l -электроном ($\varepsilon_l < 0$) за период T_r . Вероятность $W^{(l)}$, продолженная с помощью (4.2) в область положительных энергий $\varepsilon_l = v^2/2$, соответствует столкновению l -электрона с остовом и определяет [23] сечение $\sigma_p^{(l)} = [\pi(2l + 1)/v^2] W^{(l)}$ его радиационных потерь. Таким образом,

$$\sigma_p^{(l)} = \alpha z^2 \cdot 4\pi^2 \bar{C}_0 [v^2 (l + 0,5)]^{-1}; \quad v < z (l + 0,5)^{-1}. \quad (4.3)$$

Ограничение (4.3) на скорость электрона следует из требования (4.2) $|p| < 1$. Соотношения (4.2), (4.3) вытекают также из интерпретации (3.9)

произведения $A_k T_r = 4\pi \text{Im } \mu$ как мнимой части квантового дефекта. Согласно Ситону [12] дефект μ , продолженный за предел ионизации, пропорционален фазе рассеяния медленного теплового электрона: $\delta_l = \pi\mu$. Полная вероятность $W_r^{(l)}$ неупругих процессов (в нашем случае радиационных) для l -волны выражается через собственные значения S_l -матрицы

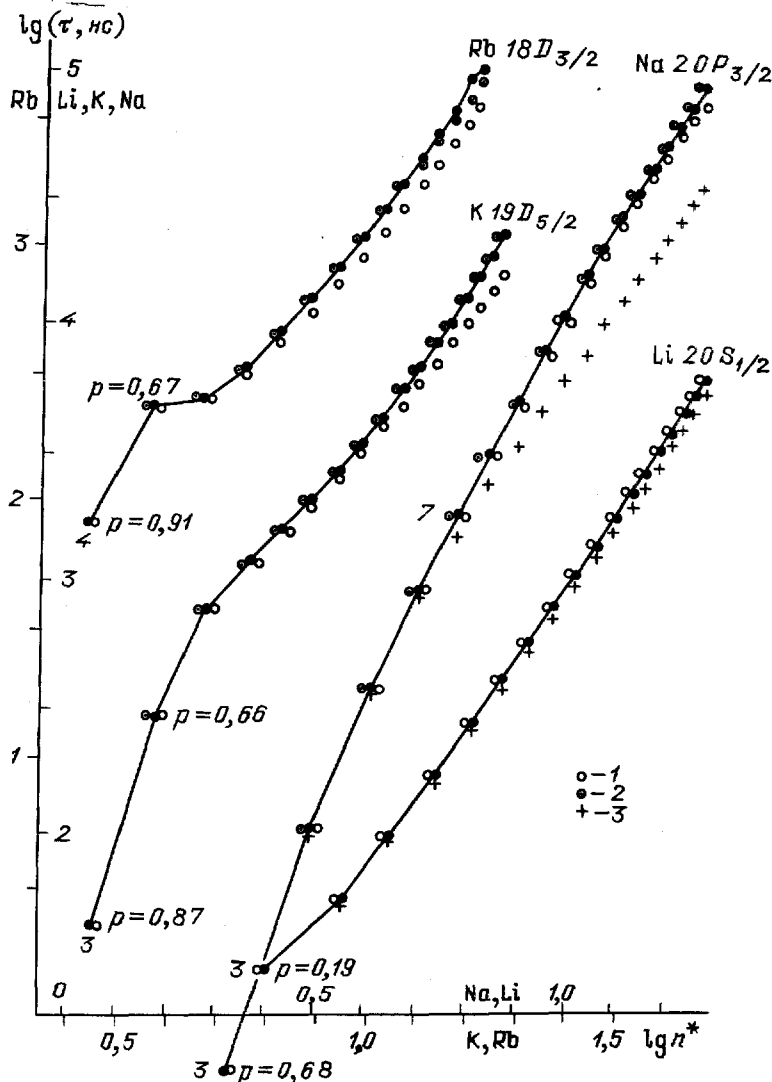


Рис. 6. Экстраполяция радиационных времен жизни τ_k с нижних уровней серий на высоковозбужденные состояния для щелочных атомов. Экстраполяция осуществляется с помощью соотношения (4.1). Сплошные кривые — значения τ_k из [36]; кружки (1) — в качестве исходных значений τ_k отобраны первые четыре для состояний с радиальным квантовым числом $n_r = 0-3$; кружки (2) и крестики (эксперимент) — в качестве исходных для экстраполяции отобраны состояния с $n_r = 1-4$

рассеяния [23]: $W_r^{(l)} = 1 - |S_l|^2$, где $S_l = \exp(2i\delta_l^{(n)})$ задается полной фазой рассеяния. Очевидно, $|S_l|^2 = \exp(-4\pi \text{Im } \delta_l)$, и $W_r^{(l)} = 1 - \exp(-A_k T_r) \simeq A_k T_r$, что совпадает с (4.2).

Тройка чисел $\tilde{C}_{0,1}$, \tilde{D}_1 в разложении (4.1) вбирает в себя полную информацию о радиационных константах всех уровней фиксируемой серии. Для первых четырех серий атомов щелочных металлов и атома гелия значения коэффициентов $\tilde{C}_{0,1}$; \tilde{D}_1 , полученных на основании данных [35, 36], приведены в табл. I. Весь расчетный материал по τ из [35, 36] описывается (4.1) с точностью не хуже 5%. Напомним, что для атома водорода $\tilde{C}_0 \equiv 1$ (см. (3.13), (3.15)), кроме s-состояний, для которых

Таблица I. Значения коэффициентов \tilde{C}_0 , \tilde{D}_1 , \tilde{C}_1 из формулы (4.1) для атомов щелочных металлов и атома гелия. Приведенная в скобках погрешность относится к последней цифре числа

а)

Атом	Серия:	s	p	d	f
Li	\tilde{C}_0	0,0251 (1)	0,069 (1)	1,12 (1)	1,0088 (4)
	\tilde{D}_1	0,34 (5)	0,81 (2)	1,1 (5)	0,94 (1)
	\tilde{C}_1	-0,11 (3)	0,1 (1)	0,05 (9)	0,094 (3)
Na	\tilde{C}_0	0,01561 (2)	0,0144 (2)	0,567 (1)	1,0380 (2)
	\tilde{D}_1	-0,19 (2)	0,10 (2)	0,66 (4)	1,00 (1)
	\tilde{C}_1	-0,28 (1)	0,217 (5)	0,39 (1)	0,087 (1)
K	\tilde{C}_0	0,0174 (2)	0,051 (1)	0,18 (2)	1,290 (2)
	\tilde{D}_1	0,1 (1)	0,48 (5)	0,19 (9)	1,1 (1)
	\tilde{C}_1	-0,17 (5)	0,19 (1)	-0,1 (4)	-0,23 (2)
Rb	\tilde{C}_0	0,0171 (1)	0,075 (2)	0,51 (4)	1,491 (4)
	\tilde{D}_1	-0,12 (3)	0,9 (1)	1,3 (3)	1,1 (2)
	\tilde{C}_1	-0,29 (2)	0,28 (3)	-0,6 (1)	-0,26 (4)
Cs	\tilde{C}_0	0,0175 (1)	0,061 (1)	0,822 (3)	1,6 (1)
	\tilde{D}_1	-0,11 (3)	0,86 (5)	0,1 (1)	-2 (2)
	\tilde{C}_1	-0,31 (2)	0,28 (2)	-0,80 (3)	-1,0 (6)

б)

Атом гелия	\tilde{C}_0	\tilde{D}_1	\tilde{C}_1
$1S$	0,02344 (2)	0,96 (2)	0,21 (1)
$1P$	3,224 (2)	0,8 (2)	-0,58 (4)
$1D$	0,976 (2)	0,90 (7)	0,17 (2)
$1F$	1,009 (1)	0,88 (5)	0,07 (1)
$3S$	0,0271 (2)	0,8 (1)	0,13 (7)
$3P$	0,153 (4)	0,9 (4)	-0,1 (2)
$3D$	1,183 (1)	1,07 (3)	-0,001 (7)
$3F$	1,017 (5)	1,1 (2)	0,12 (4)

$\tilde{C}_0 = 0,0125$ (см. (3.13), (3.32)). Обращает на себя внимание факт существенного уменьшения, «свечения» ридберговского l -электрона при появлении в ближайших к нему подболочках остова электронов с тем же орбитальным квантовым числом l .

Пример щелочных атомов указывает на широкую область применения формулы (3.13). Это связано с тем, что для s-, p-, d-состояний параметр p оказывается малым даже для первых уровней. Орбиталям же с большим моментом ($l > 3$) обычно соответствуют водородоподобные состояния, для которых согласно (3.15), (3.18) слагаемые $O(p^4)$ не существенны.

4.2. Степенные сериальные закономерности (СЗ). Они относятся к эмпирическим схемам и базируются на возможности описания обширного экспериментально-расчетного материала по τ_k с помощью соотношений (1.1), (1.2) [38, 42]. Зависимость (1.1) можно использовать для оценок времен жизни ридберговских состояний, экстраполи-

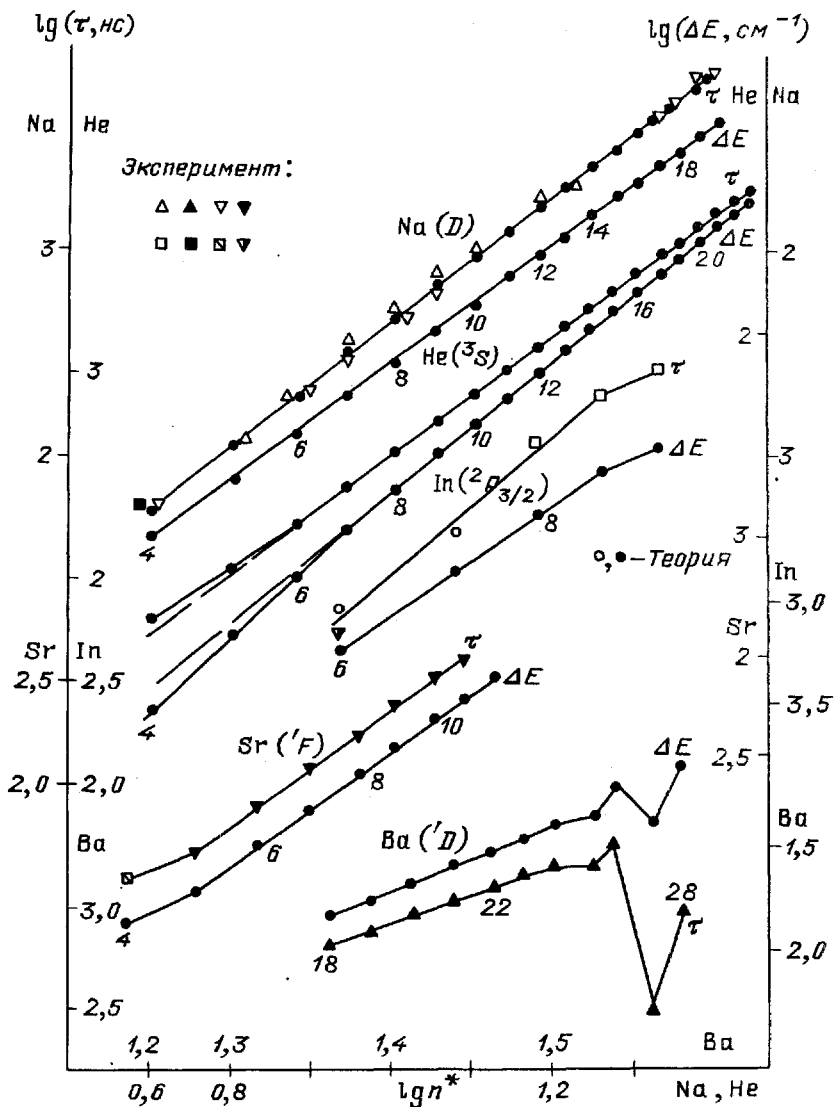


Рис. 7. Сериальное поведение радиационных времен жизни (τ) и энергетических расстояний (ΔE) от эффективного главного квантового числа (n^*) для ряда атомов. В каждой серии наблюдается соответствие формы графиков зависимостей $\Delta E(n^*)$ и $\tau(n^*)$

руя ее на неисследованные состояния. Для достоверности оценки необходимо знать: 1) константы $\tau_{0,1}$ и α_1 с возможно большей точностью, 2) область изменения n^* , на которой экстраполяция правомерна. Самые нижние состояния часто не укладываются на СЗ (см. график для HeI на рис. 7), поэтому требуется информация о τ_k для нескольких нижних

состояний серии, где значения $\tau_{0,l}$ и α_l определяются методом наименьших квадратов. Верхнюю энергетическую границу для СЗ мы предлагаем находить из анализа спектроскопических данных. Выше указывалось (раздел 4.1) на наличие корреляции между поведением τ_k и поведением $\Delta\epsilon_k$ от n^* , где $\Delta\epsilon_k$ — энергетический зазор между двумя близлежащими

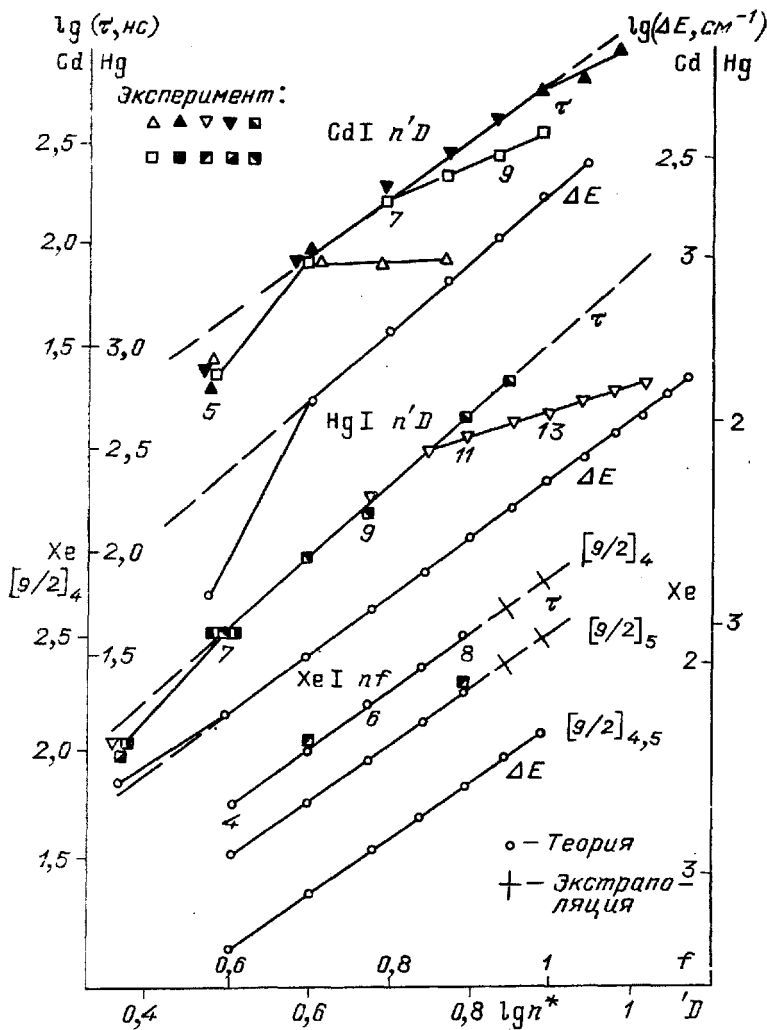


Рис. 8. То же, что и для рис. 7. Видно увеличение систематической ошибки в некоторых экспериментальных результатах по кадмию и ртути по мере увеличения n^*

уровнями серии: k и $(k+1)$. При обработке большого числа серий возбужденных состояний атомов I, II, III и VIII групп выявлено существование родственной (1.1) зависимости [6]

$$\Delta\epsilon_k = E_0 (n^*)^{-\beta} \quad (4.4)$$

с характерными константами E_0 и β вдоль каждой серии состояний. В силу формул (3.13), (3.6) $\tau_k \sim G\Delta\epsilon_k^{-1}$, т. е. СЗ (4.4), (1.1) должны согласовываться друг с другом. Несколько типичных примеров такого соответствия приведены на рис. 7, 8. Графики функций (1.1) и (4.4) в логарифмическом

масштабе являются прямыми линиями, что и наблюдается на рис. 7 для n^2D -серии Na. Для n^3S -серии HeI соответствие зависимостей $\lg \tau$ и $\lg \Delta \epsilon$ от n^* видно для всех значений, хотя они выходят на степенные функции, начиная с $n = 7$. Для $n^2P_{3/2}$ серии In и n^1D_2 серии BaI имеется локальное возмущение верхних состояний с $n = 10$ и $n = 25$ соответственно. Но и в этом случае прослеживается корреляция кривых для τ_k и $\nabla \epsilon_k$. Таким образом, форма графика $\Delta \epsilon_k$ определяет область возможной экстраполяции СЗ (1.1).

Сформулируем метод оценки радиационных времен жизни ридберговских состояний. По наиболее надежным значениям τ_k нижних уровней строится график $\lg \tau_k$ от $\lg n^*$; рядом наносится график $\lg \Delta \epsilon_k$ от $\lg n^*$. Разность энергий двух соседних состояний $\Delta \epsilon_k$ приписывается верхнему состоянию. Из сравнения графиков определяется область существования СЗ (1.1) (прямолинейные участки). Точки этого участка по методу наименьших квадратов определяют константы $\tau_{0,1}$ и α_l (1.1). График $\lg \Delta \epsilon_k$ от $\lg n^*$ задает область значений n^* , на которые правомерна экстраполяция СЗ (1.1).

Указанная процедура использовалась для оценки τ_k ридберговских состояний атома гелия ($n = 9-22$) в [43]. Были получены значения времен жизни 40 состояний серий n^1P , n^1D , n^3D . Сравнение наших оценок с позднее появившимися расчетами [35] показало, что точность оценки оказалась не хуже 10%. Метод может быть рекомендован для средних ридберговских состояний ($n < 20$).

Отметим, что для невозмущенных одноэлектронных термов времена жизни укладываются на зависимость (3.13):

$$\tau_k = n^{*3} \tau_3(n^*), \quad \tau_3^{-1} \equiv \alpha z^4 I G L^2 \left(1 + z^2 n^{*-3} \frac{\partial \mu}{\partial \epsilon} \right). \quad (4.5)$$

По мере увеличения n^* множитель τ_3 выходит на константу. Отклонение (4.5) от кубического закона связано с изменениями τ_3 только в начале серии. Нарушение кубической зависимости для ридберговских состояний может быть вызвано энергетически протяженным возмущением со стороны автоионизационных состояний и континуума. В этом случае степенная зависимость (1.1) «подправляет» кубическую в смысле лучшей аппроксимации функции $\tau_k(n^*)$. Пример альтернативного описания (см. табл. I, б) с помощью (1.1) для атома гелия содержится в [35].

5. Рекомендуемые значения радиационных времен жизни возбужденных состояний атомов IA, II и VIII групп. Одной из важных задач атомной спектроскопии является создание банка стандартных значений радиационных времен жизни. Деятельность в этом направлении была начата обзором [38]. Позднее появились таблицы рекомендуемых значений τ_k [39] резонансных и метастабильных уровней ряда атомов. Здесь мы продолжаем работу по сбору экспертно оцененной информации о τ_k для всех атомов периодической системы.

В [38] приведены значения τ_k атомов I группы. Последующие публикации [36] подтвердили достоверность данных [38], в том числе и предсказанных на основе анализа распределений радиационных времен жизни по сериям (см. раздел 4.2). Полученные в [36, 37] значения τ_k для щелочных атомов и атома гелия хорошо укладываются на одноэлектронные зависимости (4.1). Исключение составляют первые уровни D -серий Na, Li, Cs, для которых параметр p близок к единице (см. рис. 7). Значе-

ния коэффициентов $\bar{C}_{0,1}$; \bar{D}_1 из (4.1) приведены в табл. 1. Напомним, что \bar{C}_0 определяет парциальное сечение фоторекомбинации (4.3).

В табл. II представлены рекомендуемые значения радиационных времен жизни в виде констант степенных зависимостей (1.1). Мы остановились на подобной форме описания данных по τ_k , так как она, во-первых, пригодна для быстрого получения оценок τ_k неисследованных состояний,

Таблица II. Значение констант $\tau_{0,1}$ (нс) и α_1 из формулы (1.1) для атомов II и VIII групп. Последний столбец дает область применимости степенной зависимости (1.1)

Атом	Серия	$\tau_{0,1}$, нс	α_1	n	Атом	Серия	$\tau_{0,1}$, нс	α_1	n
MgI	n^1s	4,22 (3)	2,62 (2)	4—15	ArI	$np' [3/2]_2$	1,38 (1)	4,0 (1)	4—8
CaI	n^1s	0,54 (1)	3,11 (4)	7—14		$nd [1/2]_0$	0,450 (5)	3,4 (1)	5—10
SrI	n^1F	0,430 (8)	2,91 (2)	5—11		$nd [7/2]_4$	0,590 (6)	3,30 (9)	6—9
ZnI	n^1P	0,213 (7)	3,55 (5)	5—9		$nd [7/2]_3$	0,430 (3)	3,50 (8)	5—9
	n^3s	0,667 (12)	3,40 (6)	6—11		$nd [3/2]_1$	0,140 (1)	3,40 (9)	5—9
	n^3D_J	0,315 (9)	2,80 (5)	4—13		$nd [5/2]_2$	0,550 (6)	3,30 (9)	3—9
CaI	n^3D_J	0,266 (5)	3,00 (5)	5—10		$nd [5/2]_3$	0,590 (7)	3,30 (8)	5—9
HgI	n^1D	0,409 (4)	3,40 (5)	8—20		$nd' [5/2]_3$	0,490 (4)	3,40 (7)	3—10
NeI	$ns [3/2]_2$	1,53 (1)	3	5—12		$nd' [3/2]_2$	0,330 (5)	3,60 (6)	5—10
	$ns [3/2]_1$	0,340 (7)	3	6—10		$nd' [3/2]_1$	0,180 (1)	3,30 (9)	7—10
	$ns' [1/2]_0$	1,64 (2)	3	5—10		nf	1,08 (2)	3,0 (1)	4—8
	$np [1/2]_1$	1,50 (3)	4,10 (9)	4—8		$ns' [1/2]_1$	0,520 (9)	2,90 (9)	5—9
	$np [5/2]_2$	1,18 (2)	4,10 (8)	4—8		$np [1/2]_1$	3,47 (3)	2,90 (8)	6—8
	$np [3/2]_1$	1,07 (1)	4,10 (9)	4—9		$np [5/2]_3$	3,47 (3)	2,8 (1)	5—8
	$np [3/2]_2$	0,670 (8)	4,3 (1)	3—9		$np [5/2]_2$	4,58 (5)	2,90 (9)	5—8
	$np [1/2]_0$	0,510 (5)	4,4 (1)	3—9		$np [3/2]_1$	2,95 (3)	3,1 (1)	5—8
	$np' [3/2]_1$	0,860 (7)	4,30 (9)	3—6		$np [3/2]_2$	2,24 (3)	3,20 (8)	5—8
						$np [1/2]_0$	1,82 (2)	3,1 (2)	5—8

во-вторых, удобна при создании банка данных по радиационным временам жизни для ЭВМ. Константы $\tau_{0,1}$, α_1 для СЗ (1.1) рассчитаны по значениям $\tau_k^{(рек)}$ для каждого состояния серии, полученных статистической обработкой всех имеющихся в настоящее время литературных значений τ_k для данного состояния. Величины $\tau_k^{(рек)}$ брались в качестве средневзвешенных:

$$\tau_k^{(рек)} = m^{-1} \sum_{i=1}^m \tau_k^{(i)}, \quad (5.1)$$

по числу m учитываемых работ. Результаты измерений (расчетов) τ_k , если они отличались от полученного среднего более чем на 2σ (σ — стандартное среднеквадратичное отклонение), отбрасывались. Не учитывались значения τ_k , приведенные без погрешности, а также ранние результаты тех же авторов. Наконец дополнительным критерием исключения τ_k из (5.1) являлось их несоответствие зависимости (1.1), построенной по данным других работ и подтвержденной степенным ходом функции $\Delta \varepsilon_k(n^*)$ (см. (4.4)).

Заключение. Вопросы систематизации радиационных времен жизни τ_k , наряду с экспериментальными исследованиями, во многом связаны с развитием теоретических представлений о квантовых процессах радиационного затухания. Нелокальный гамильтонов формализм по описанию

динамики излучающих атомных систем и вытекающая из него процедура квантования радиационной ширины в дальнейшем могут оказаться адекватным техническим инструментом для расчета значений τ_k . В связи с этим перспективным представляется построение последовательной многоканальной теории по определению τ_k . Интересные результаты следует ожидать при рассмотрении квантовых сил трения излучением в нерегулярной части спектра сложных систем, когда межатомное взаимодействие приводит к хаотизации классических траекторий движения [30]. Здесь, возможно, найдет свое объяснение факт устойчиво наблюдаемых степенных закономерностей изменения времен жизни. Их использование для оценок времен жизни ридберговских состояний требует точных сведений о величинах τ_k нижних состояний. Это, в свою очередь, стимулирует постановку новых экспериментальных исследований современными методами.

Здесь уместно кратко обрисовать современное состояние проблемы определения наиболее достоверных значений радиационных времен жизни возбужденных состояний атомов. Как уже упоминалось выше, работа по созданию полных систематизированных таблиц рекомендованных значений была начата одним из авторов обзором [38], посвященным всем атомам I группы Периодической системы элементов. Позднее последовали публикации по гелию [43], атомам IIA группы: Be, Mg, Ca, Sr, Ba [44] и IIB группы: Zn, Cd, Hg [45]. В 1984 г. появились две работы Теодосиу по гелию [35] и по атомам щелочных металлов: Li, Na, K, Rb, Cs [36], в которых теоретически рассчитаны с большой точностью τ_k всех состояний (включая f) до $n = 18-21$. Сравнение значений [35, 36] с наиболее достоверными экспериментальными результатами позволяет рекомендовать их к использованию в качестве наиболее достоверных. В 1986 г. вышел справочник А. А. Радцига и Б. М. Смирнова [39], в котором приведены значения радиационных времен жизни резонансных, метастабильных и некоторых нижних состояний 73 атомов. В 1990 г. вышел обзор с таблицей рекомендованных значений τ_k для всех атомов инертных газов: He, Ne, Ar, Kr, Xe [50]. В печати находятся обзоры по τ_k атомов III группы: Sc, Y, La, Lu, V, Al, Ga, In, Tl, и атомов VIB группы: O, S, Se, Te. В ближайшее время выйдут в свет обзоры по τ_k атомов IV, V, VII групп, атомов группы железа и группы лантаноидов. С появлением последних обзоров будет завершено создание, в первом приближении, полных систематизированных таблиц радиационных времен жизни для всех атомов.

Авторы выражают признательность Ю. А. Толмачеву, А. И. Васильеву, Е. А. Соловьеву, В. П. Просихину, многочисленным дискуссиям с которыми позволили прояснить ряд моментов представленного в обзоре материала.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Груздев П. Ф., Афанасьева Н. В. // Опт. и спектр. 1975. Т. 38. С. 378.
- [2] Ошерович А. Л., Борисов Е. Н., Буриштейн М. Л., Веролайнен Я. Ф. // Опт. и спектр. 1975. Т. 39. С. 820.
- [3] Gallagher T. F., Edelstein S. A., Hill R. M. // Phys. Rev. Ser. A. 1975. V. 11. P. 1504.
- [4] Веролайнен Я. Ф. // Опт. и спектр. 1982. Т. 43. С. 342—346.
- [5] Афанасьева Н. И., Груздев П. Ф. // Ibidem. 1983. Т. 55. С. 416.
- [6] Веролайнен Я. Ф. // Ibidem. 1986. Т. 61. С. 900.
- [7] Бете Т., Солпитер Э. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами.— М.: Физматгиз, 1960.

8. Пенкин Н. П., Шабанова Л. Н. // Спектроскопия газоразрядной плазмы. — Л.: Наука, 1969.
9. Фано У., Купер Дж. Спектральные распределения сил осцилляторов в атомах. — М.: Наука, 1972.
10. Бейгман И. Л., Буржева Л. А., Зон Б. А., Крайнов В. П. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1984. Т. 48. С. 651.
- [11] Коган В. И., Кукушкин А. Б. // ЖЭТФ. 1984. Т. 87. С. 1164.
12. Seaton M. J. // Rep. Prog. Phys. 1983. V. 46. P. 167.
13. Omidvar K. // Phys. Rev. Ser. A. 1982. V. 26. P. 3053.
14. Гореславский С. П., Делоне Н. Б., Крайнов В. П. // ЖЭТФ. 1982. Т. 82. С. 1789.
15. Ганцев Р. А., Казакова Н. Ф., Крайнов В. П. // Химия плазмы. М.: Энергоатомиздат, 1985. Вып. 12. — С. 96.
16. Безуглов Н. Н. // Опт. и спектр. 1983. Т. 55. С. 793.
17. Chang E. S. // Phys. Rev. Ser. A. 1985. V. 31. P. 495.
18. Безуглов Н. Н. // Опт. и спектр. 1987. Т. 62. С. 937.
19. Безуглов Н. Н. // Ibidem. 1988. Т. 65. С. 772.
20. Ionescu-Pallas N. J. // Rev. Roum. Phys. 1966. V. 11. P. 643.
- [21] Богданович П. О., Жукаускас Г. Л., Мсикаускайте А. П., Тутлис В. И. // Лит. физ. сб. 1985. Т. 25, № 6. С. 43.
22. Собельман И. И. Введение в теорию атомных спектров. — М.: Наука, 1977.
23. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. — М.: Наука, 1974.
24. Lingard A., Nielson S. E. // Atom. Data and Nucl. Data Tables. 1977. V. 19. P. 534.
25. Крайнов В. П., Смирнов Б. М. Излучательные процессы в атомной физике. — М.: Высшая школа, 1983.
26. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. — Теория поля. — М.: Наука, 1976. — § 65, 75.
27. Безуглов Н. Н., Борисов Е. Н., Веролайнен Я. Ф. // Опт. и спектр. 1988. Т. 64. С. 1374.
28. Фейнман Р., Хибс А. Квантовая механика и интегралы по траекториям. — М.: Наука, 1968.
29. Арнольд В. И. Математические методы классической механики. — М.: Наука, 1974.
30. Percival I. C. // Adv. Chem. Phys. 1977. V. 36. P. 1.
- [31] Казанцев А. П., Покровский В. Л. // ЖЭТФ. 1983. Т. 83. С. 1917.
32. Лаврентьев М. А., Шабат Б. В. Методы теории функций комплексного переменного. — М.: Наука, 1965.
33. Федорюк М. В. Асимптотические методы для линейных обыкновенных дифференциальных уравнений. — М.: Наука, 1983.
34. Галлахер Т. Ф. // Ридберговские состояния атомов и молекул. — М., 1985. С. 210.
35. Theodosiou S. E. // Phys. Rev. Ser. A. 1984. V. 30. P. 2910.
36. Theodosiou S. E. // Ibidem. P. 2881.
37. Aymar M., Grafstrom P. et al. // J. Phys. Ser. B. 1982. V. 15. P. 877.
38. Веролайнен Я. Ф., Николаич А. Я. // УФН. 1982. Т. 137. С. 305.
39. Радциг А. А., Смирнов Б. М. // Параметры атомов и атомных ионов. — М., 1986.
40. Liu X. W., Wand Z. W. // Phys. Rev. Ser. A. 1989. V. 40. P. 1838.
- [41] Груздев П. Ф. // Спектры атомов и ионов в рентгеновской и ультрафиолетовой областях. — М., 1982. — С. 8.
42. Ошерович А. Л., Веролайнен Я. Ф., Привалов В. И., Пулькин С. А. // ДАН СССР. 1979. Т. 248. С. 614.
43. Веролайнен Я. Ф. Деп. в ВИНТИ. № 4919-84. 10.07.84.
44. Веролайнен Я. Ф., Борисов Е. Н., Пулькин С. А. // Деп. в ВИНТИ № 3068-В. 25.04.86.
45. Веролайнен Я. Ф., Борисов Е. Н. // Деп. в ВИНТИ. № 9048-В. 30.12.86.
46. Веролайнен Я. Ф., Плехоткин Г. А. // Деп. в ВИНТИ. № 4923-В. 24.07.89.
47. Веролайнен Я. Ф. // Деп. в ВИНТИ. № 238-В. 15.01.90.

Статья поступила 18.05.90 г.,
после переработки 14.06.90 г.