

УДК 537.563.3

## ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ ЩЕЛОЧНЫХ АТОМОВ

Д. А. Кондратьев<sup>1</sup>, И. Л. Бейгман, Л. А. Вайнштейн

*Выполнен расчет скалярной и тензорной частей статической поляризуемости щелочных атомов Na, K, Rb. Проведено сравнение полученных результатов с имеющимися теоретическими и экспериментальными данными.*

**ВВЕДЕНИЕ.** Статическая поляризуемость щелочных атомов представляет интерес для ряда приложений атомной физики и является предметом изучения в течение нескольких десятков лет. Подход к прямому расчету квадратичного Штарк-эффекта во втором порядке теории возмущений изложен в известной монографии Е. Кондона и Г. Шортли [1]. Техника неприводимых тензорных операторов позволяет в явном виде отразить свойства симметрии эффекта Штарка и разделить скалярную и тензорную части поляризуемости, определяющие сдвиг и расщепление атомного уровня в электрическом поле.

Наиболее точные измерения поляризуемостей основного состояния щелочных атомов были проведены в работе [2]. В работах [3–5] с высокой точностью был измерен штарковский сдвиг их D1 – линии  $n^2P_{1/2} \rightarrow n^2S_{1/2}$ . Несмотря на наличие высокоточных измерений электрических дипольных матричных элементов резонансных переходов, в атомах щелочных металлов экспериментальные данные для нерезонансных переходов отсутствуют.

За последние годы получили значительное развитие методы расчета атомной поляризуемости основного и возбужденных состояний с различными значениями углового момента. Однако в ряде случаев до сих пор имеются расхождения между теоретическими предсказаниями поляризуемости и данными экспериментальных исследований. Теоретический расчет поляризуемостей уровней тонкой структуры атомов щелочных

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (Государственный университет), 141704 Московская область, г. Долгопрудный.

металлов с одним валентным электроном достаточно прозрачен и был рассмотрен в ряде статей [6–8]. В работах [6, 7] использовалась функция Грина с учётом квантового дефекта.

В настоящей работе вычислены поляризуемости  $s, p, d$ -уровней атомов Na, K, Rb. В рамках второго порядка теории возмущений проведено непосредственное суммирование матричных элементов с интегрированием по непрерывному спектру. Также рассмотрено влияние поляризации атомного остатка на скалярную и тензорную части поляризуемости. Обнаружено заметное различие с результатами, приведенными в [7].

Работа состоит из двух частей. В первой части приводятся необходимые для расчета формулы. Вторая часть посвящена сравнению полученных результатов с имеющимися теоретическими и экспериментальными данными. При расчетах использовалась программа ATOM [9].

**ОБЩИЕ ФОРМУЛЫ.** Взаимодействие атома с однородным электрическим полем  $\vec{\epsilon}$  описывается гамильтонианом  $V = -\vec{d}\vec{\epsilon}$ , где  $\vec{d}$  – дипольный момент атома. Пусть ось  $z$  направлена вдоль поля  $\vec{\epsilon}$ . Во втором порядке теории возмущений поправка к энергии атома может быть записана в виде [10, 11]:

$$\Delta E_{\gamma JM} = \alpha_{\gamma JM} \epsilon^2 = -\frac{1}{2} \left( \alpha_{\gamma J}^S + \alpha_{\gamma J}^T \frac{3M^2 - J(J+1)}{J(2J-1)} \right) \epsilon^2,$$

где  $\alpha_{\gamma JM}$  – поляризуемость,  $\alpha_{\gamma J}^S, \alpha_{\gamma J}^T$  – её скалярная и тензорная части. Скалярная часть поляризуемости не зависит от магнитных квантовых чисел  $M$  и определяет сдвиг центра тяжести расщепленного уровня. Тензорная часть определяет относительное расщепление подуровней с различными  $M$  и для состояний с  $J = 0, 1/2$  равна нулю. Согласно теории возмущений

$$\alpha_{\gamma JM} = \sum_{\gamma' J' M'} \frac{\langle \gamma JM | d_z | \gamma' J' M' \rangle \langle \gamma' J' M' | d_z | \gamma JM \rangle}{E_{\gamma J} - E_{\gamma' J'}}.$$

Пользуясь теоремой Вигнера–Эккарта, имеем:

$$\alpha_{\gamma JM} = (-1)^{J-M} \sum_{\gamma' J'} (-1)^{J'-J} \times$$

$$\times \left( \sum_{M'} (-1)^{J'-M'} \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & 0 & M' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J' & 1 & J \\ -M' & 0 & M \end{pmatrix} \right) \frac{|\langle \gamma J | d | \gamma' J' \rangle|^2}{(E_{\gamma J} - E_{\gamma' J'})}.$$

Сумма по  $M'$  может быть преобразована [12]:

$$\alpha_{\gamma JM} = (-1)^{J-M} \sum_{\gamma' J' x} (-1)^{J+J'} [x]^2 \times$$

$$\times \begin{pmatrix} J & J & x \\ M & -M & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left\{ \begin{array}{ccc} 1 & 1 & x \\ J & J & J' \end{array} \right\} \frac{|\langle \gamma J \| d \| \gamma' J' \rangle|^2}{(E_{\gamma J} - E_{\gamma' J'})}.$$

Здесь используется обозначение  $[x_1 x_2 x_3 \dots] = (2x_1 + 1)^{1/2} \cdot (2x_2 + 1)^{1/2} \cdot (2x_3 + 1)^{1/2} \cdot \dots$

Сумма по  $x$  состоит из двух членов:  $x = 0$  дает скалярную часть поляризуемости,  $x = 2$  – тензорную. Получаем:

$$\alpha_{\gamma J}^S = -\frac{2}{3(2J+1)} \sum_{\gamma' J'} \frac{|\langle \gamma J \| d \| \gamma' J' \rangle|^2}{(E_{\gamma J} - E_{\gamma' J'})},$$

$$\alpha_{\gamma J}^T = \sum_{\gamma' J'} (-1)^{J+J'+1} \sqrt{\frac{40}{3}} \sqrt{\frac{J(2J-1)}{(2J+3)(J+1)(2J+1)}} \left\{ \begin{array}{ccc} 1 & 1 & 2 \\ J & J & J' \end{array} \right\} \frac{|\langle \gamma J \| d \| \gamma' J' \rangle|^2}{(E_{\gamma J} - E_{\gamma' J'})}.$$

Квадрат приведенного матричного элемента, входящего в эти выражения, может быть записан через приведенный одноэлектронный матричный элемент:

$$|\langle \gamma J \| \vec{d} \| \gamma' J' \rangle|^2 = [JJ'LL']^2 \left\{ \begin{array}{ccc} L & J & S \\ J' & L' & 1 \end{array} \right\}^2 \left\{ \begin{array}{ccc} l & L & L_c \\ L' & l' & 1 \end{array} \right\}^2 |\langle \gamma l \| d \| \gamma' l' \rangle|^2.$$

Полагая, что атомный остов находится в основном состоянии, т.е.  $L_c = 0$ , получим для щелочного атома:

$$|\langle \gamma J \| \vec{d} \| \gamma' J' \rangle|^2 = [JJ']^2 \left\{ \begin{array}{ccc} l & J & 1/2 \\ J' & l' & 1 \end{array} \right\}^2 |\langle \gamma l \| d \| \gamma' l' \rangle|^2.$$

Рассмотрим случай, когда  $\gamma' l'$  соответствует непрерывному спектру. Квадрат приведенного одноэлектронного матричного элемента выражается через силу осциллятора  $f$ :

$$|\langle \gamma l \| \vec{d} \| \gamma' l' \rangle|^2 = \frac{3\hbar^2 e^2}{2m} \frac{(2l+1)f(nl \rightarrow \epsilon, l')}{(E_J^{\text{ion}} + \epsilon)},$$

где  $E_J^{\text{ion}}$  – энергия ионизации,  $\epsilon$  и  $l'$  – энергия и момент импульса выбитого электрона в непрерывном спектре. Сила осциллятора для перехода в непрерывный спектр связана с сечением фотоионизации  $\sigma_{l \rightarrow l'}(\epsilon)$  соотношением [13]:

$$\frac{df(nl \rightarrow \epsilon, l')}{d\epsilon} = \frac{mc}{2\pi^2 e^2 \hbar} \sigma_{l \rightarrow l'}(\epsilon).$$

Поэтому вклады непрерывного спектра в скалярную и тензорную части поляризуемости:

$$\alpha_{\gamma J}^{S, \text{Con}} = \frac{\hbar c}{2\pi^2} \left( \sum_{\gamma' l' J'} (2J' + 1) \left\{ \begin{array}{ccc} l & J & 1/2 \\ J' & l' & 1 \end{array} \right\}^2 \right) \int_0^\infty \frac{(2l+1)\sigma_{PI}(\epsilon)d\epsilon}{(E_{\text{ion}} + \epsilon)^2},$$

$$\alpha_{\gamma J}^{T, \text{Con}} = -\frac{3\hbar c}{2\pi^2} \times \\ \times \left( \sum_{\gamma' l' J'} \frac{(3X(X+1) - 8J(J+1))}{(2J+3)(J+1)} (2J' + 1) \left\{ \begin{array}{ccc} l & J & 1/2 \\ J' & l' & 1 \end{array} \right\}^2 \right) \int_0^\infty \frac{(2l+1)\sigma_{PI}(\epsilon)d\epsilon}{(E_{\text{ion}} + \epsilon)^2}.$$

В этих суммах  $l' = l \pm 1$  (для  $l \geq 1$ ) и  $l' = 1$  (для  $l = 0$ ), а  $J'$  принимает значения  $J' = \left|l' - \frac{1}{2}\right|, l' + \frac{1}{2}$ . Правила сумм для  $6j$ -символов позволяют найти сумму по  $J'$ :

$$\alpha_{\gamma J}^{S, \text{Con}} = \frac{\hbar c}{2\pi^2} \sum_{\gamma' l'} \int_0^\infty \frac{\sigma_{l \rightarrow l'}(\epsilon)d\epsilon}{(E_J^{\text{ion}} + \epsilon)^2},$$

$$\alpha_{\gamma J}^{T, \text{Con}} = -\frac{3\hbar c}{4\pi^2} \sqrt{\frac{40}{3}} \sqrt{\frac{J(2J-1)(2J+1)}{(2J+3)(J+1)}} (-1)^{1-S-J-L_c} \left\{ \begin{array}{ccc} L & 2 & L \\ J & S & J \end{array} \right\} (2L+1) \left\{ \begin{array}{ccc} l & 2 & l \\ L & L_c & L \end{array} \right\} \times \\ \times \sum_{l'=l\pm 1} (-1)^{l'} \left\{ \begin{array}{ccc} l & 2 & l \\ 1 & l' & 1 \end{array} \right\} \int_0^\infty \frac{(2l+1)\sigma_{l \rightarrow l'}(\epsilon)d\epsilon}{(E_J^{\text{ion}} + \epsilon)^2}.$$

**РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ.** Наличие внешнего электрического поля приводит к поляризации атомного остова, что отражается на взаимодействии остова с валентным электроном. Расчеты показывают, что эффект поляризации оказывает заметное влияние на величину сил осцилляторов оптических переходов. В особенности это касается нерезонансных переходов, для которых вследствие интерференции волновых функций начального и конечного состояний значения  $f$  очень малы. Последовательное квантово-механическое рассмотрение эффекта поляризации атомного остова [14] приводит к необходимости замены оператора  $\vec{r}$  в одноэлектронном матричном элементе оптического перехода оператором  $\vec{r}(1 - \Phi(r))$ , где поляризационный член может быть аппроксимирован выражением

$$\Phi(r) = \frac{\alpha r}{(r^2 + r_0^2)^2}.$$

Здесь  $\alpha$  – дипольная поляризуемость остова,  $r_0$  – средний радиус остова. Сравнение вычисленных сил осцилляторов с экспериментальными данными обнаруживает заметную

чувствительность  $f$  к величине  $\alpha$  и слабую зависимость от  $r_0$ . Расчет сил осцилляторов переходов в дискретном спектре и сечений фотоионизации для переходов в непрерывный спектр проводился с помощью программы АТОМ [9], использующей полуэмпирические радиальные функции, которые находятся путем решения уравнения Шредингера с потенциалом

$$U = U_S + U_P = \frac{e^2}{r} \zeta_c \left( \frac{r}{\omega} \right) - \frac{\alpha}{2(r^2 + r_0^2)^2},$$

где потенциал  $U_P$  учитывает влияние поляризации остова на волновую функцию оптического электрона, а статический потенциал  $U_S$  вычисляется с помощью аналитических функций Слетера. Масштабный фактор  $\omega$  определяется из условия того, чтобы собственное значение уравнения совпадало с экспериментальной энергией уровня, отсчитанной от границы ионизации.

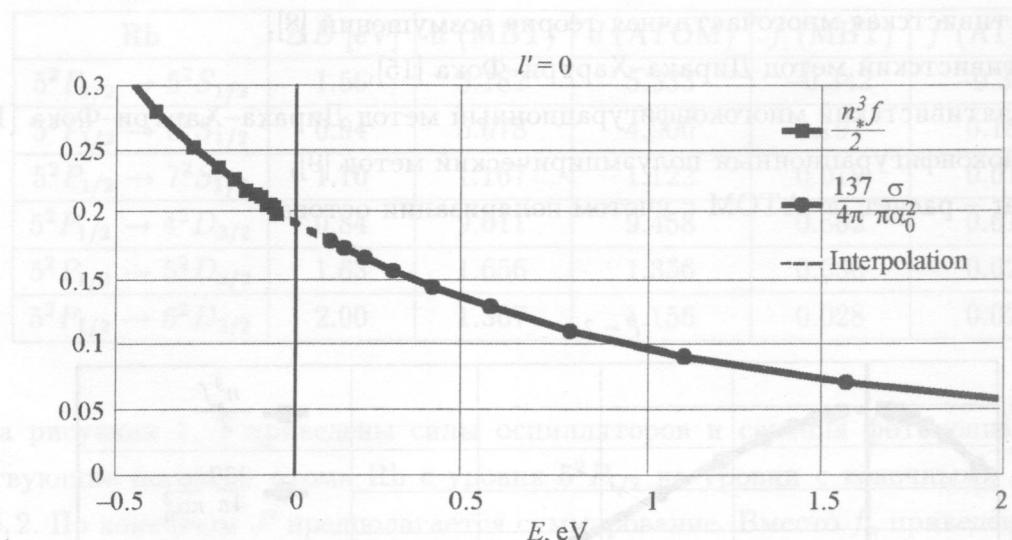


Рис. 1. Силы осцилляторов и сечения фотоионизации с уровня  $5^2P_{1/2}$  атома Rb ( $l' = 0$ ).

Сила осциллятора перехода чувствительна к разности энергий уровней  $\Delta E$ . Если длина волны перехода выражена в нанометрах, то сила осциллятора связана с приведенным матричным элементом, слабо зависящим от  $\Delta E$ , следующим соотношением:

$$f_{ab} = -\frac{30.3756}{(2j_a + 1)\lambda} |\langle a||d||b\rangle|^2.$$

Представляет интерес сравнить приведенные одноэлектронные матричные элементы  $|\langle \gamma l || d || \gamma' l' \rangle|$ , вычисленные с помощью программы АТОМ, использующей экспериментальные энергии, со значениями, полученными в других приближениях. В табл. 1 приведено такое сравнение для некоторых переходов в атоме рубидия.

Таблица 1

*Сравнение абсолютных величин одноэлектронных приведенных матричных элементов для атома рубидия*

	DHF	MBT	FAC	GRA92	ATOM	ATOM+Polar
$5^2 D_{3/2} \rightarrow 5^2 P_{1/2}$	0.299	1.979	0.841	0.263	1.356	1.457
$5^2 D_{3/2} \rightarrow 5^2 P_{3/2}$	0.430	2.155	1.085	0.383	1.525	1.621
$5^2 D_{5/2} \rightarrow 5^2 P_{3/2}$	0.450	2.131	1.187	0.403	1.516	1.612
$4^2 D_{3/2} \rightarrow 5^2 P_{1/2}$	11.079	9.611	10.262	11.586	9.458	9.211
$4^2 D_{3/2} \rightarrow 5^2 P_{3/2}$	11.179	9.695	10.404	11.707	9.539	9.298
$4^2 D_{5/2} \rightarrow 5^2 P_{3/2}$	11.175	9.707	10.406	11.720	9.538	9.297

DHF – метод Дирака–Хартри–Фока с замороженным остовом [8],

MBT – релятивистская многочастичная теория возмущений [8],

FAC – релятивистский метод Дирака–Хартри–Фока [15],

GRA92 – релятивистский многоконфигурационный метод Дирака–Хартри–Фока [16],

ATOM – одноконфигурационный полуэмпирический метод [9],

ATOM+Polar – расчет по ATOM с учетом поляризации остова.

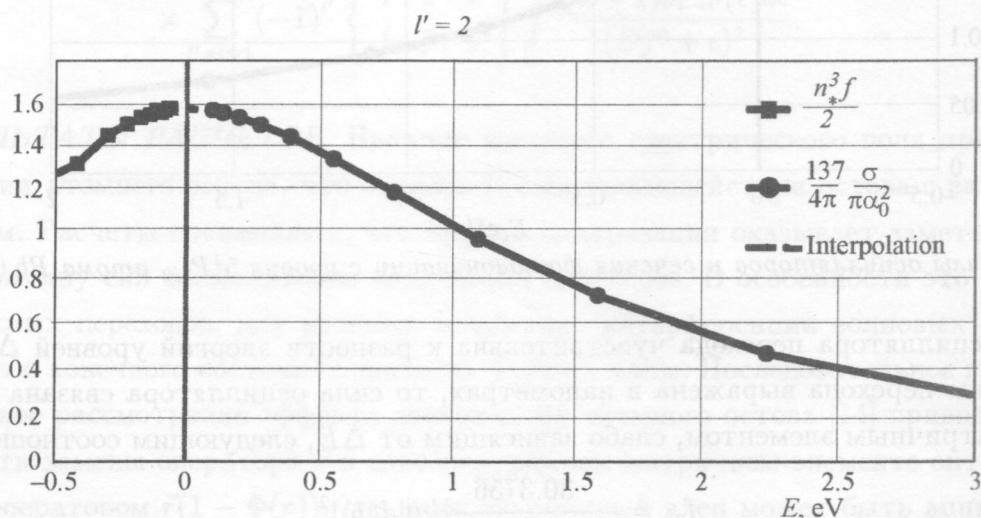


Рис. 2. Силы осцилляторов и сечения фотополионизации с уровня  $5^2 P_{1/2}$  атома Rb ( $l' = 2$ ).

В отличие от перехода  $4D \rightarrow 5P$  в случае перехода  $5D \rightarrow 5P$  большую роль играет интерференция волновых функций начального и конечного состояний, поэтому результаты вычислений заметно отличаются. Тем не менее видно, что приведенные

матричные элементы, вычисленные с помощью программы АТОМ, оказываются близки к значениям, даваемым МВТ. В табл. 2 приведено сравнение приведенных матричных элементов и сил осцилляторов переходов с уровня  $5^2P_{1/2}$  в атоме рубидия, вычисленных с помощью всех порядков теории возмущений [17] и с помощью программы АТОМ. Основной вклад в поляризуемость  $5^2P_{1/2}$  дает наиболее близкий по энергии уровень  $4^2D_{3/2}$ . Вследствие наличия малого энергетического знаменателя небольшая погрешность в силе осциллятора может привести к заметному изменению поляризуемости.

Таблица 2

*Сравнение абсолютных величин одноэлектронных приведенных матричных элементов и сил осцилляторов для Rb*

Rb	$\Delta E$ [eV]	$d$ (МВТ)	$d$ (АТОМ)	$f$ (МВТ)	$f$ (АТОМ)
$5^2P_{1/2} \rightarrow 5^2S_{1/2}$	1.56	5.182	5.333	-0.342	-0.362
$5^2P_{1/2} \rightarrow 6^2S_{1/2}$	0.94	5.078	4.900	0.197	0.184
$5^2P_{1/2} \rightarrow 7^2S_{1/2}$	1.70	1.167	1.122	0.019	0.017
$5^2P_{1/2} \rightarrow 4^2D_{3/2}$	0.84	9.611	9.458	0.662	0.614
$5^2P_{1/2} \rightarrow 5^2D_{3/2}$	1.63	1.656	1.356	0.036	0.024
$5^2P_{1/2} \rightarrow 6^2D_{3/2}$	2.00	1.307	1.156	0.028	0.022

На рисунках 1, 2 приведены силы осцилляторов и сечения фотоионизации, соответствующие переходу атома Rb с уровня  $5^2P_{1/2}$  на уровни с конечными значениями  $l' = 0, 2$ . По конечным  $J'$  предполагается суммирование. Вместо  $f_n$  приведены значения  $\frac{n_*^3 f_n}{2}$ , где  $n_* = n - \Delta = \sqrt{-\frac{Ry}{E_{nl}}}$ , которые переходят в  $\frac{df(nl \rightarrow \epsilon, l')}{d\epsilon} = \frac{137}{4\pi} \frac{\sigma_{l \rightarrow l'}(\epsilon)}{\pi a_0^2}$  в непрерывном спектре. Здесь  $n_*$  и  $E_{nl}$  – эффективное квантовое число и энергия уровня  $nl$ , отсчитанная от порога ионизации,  $\Delta$  – квантовый дефект.

Видно, что дискретный спектр непрерывно переходит в непрерывный. Вычисления поляризуемости проводились для атомов Na, K, Rb с учетом тонкой структуры уровней. В таблицах 3-5 сопоставляются результаты расчетов, выполненных без учета и с учетом поляризации атомного остова. При этом были приняты следующие экспериментальные значения поляризуемостей остова  $\alpha(Na^+) = 1.0a_0^3$ ,  $\alpha(K^+) = 6.0a_0^3$ ,  $\alpha(Rb^+) = 9.1a_0^3$  [18]. Все значения поляризуемостей указаны ниже в единицах  $a_0^3$ .

Таблица 3

Скалярные и тензорные части статической поляризуемости атома  $Na$  (ам.ед.)

$Na$	Без поляризац. остова	С поляризацией остова ( $\alpha = 1.0$ )	Работа [7]	Работа [19]	Эксп. [20]
$3^2S_{1/2}$ $\alpha_{\gamma J}^S$	164	161	167	165	163
$3^2P_{1/2}$ $\alpha_{\gamma J}^S$	357	356	345	390	361
$3^2P_{3/2}$ $\left\{ \begin{array}{l} \alpha_{\gamma J}^S \\ \alpha_{\gamma J}^T \end{array} \right.$	359 -86	358 -87	346 -100	390 -91	364 -88
$3^2D_{3/2}$ $\left\{ \begin{array}{l} \alpha_{\gamma J}^S \\ \alpha_{\gamma J}^T \end{array} \right.$	6390 -3550	6390 -3550	6646 -3723	6818 -3839	
$3^2D_{5/2}$ $\left\{ \begin{array}{l} \alpha_{\gamma J}^S \\ \alpha_{\gamma J}^T \end{array} \right.$	6360 -5040	6360 -5040	6622 -5285	6818 -3839	

Таблица 4

Скалярные и тензорные части статической поляризуемости атома  $K$  (ам.ед.)

$K$	Без поляризац. остова	С поляризацией остова ( $\alpha = 6.0$ )	Работа [7]	Работа [19]	Эксп. [2, 3]
$4^2S_{1/2}$ $\alpha_{\gamma J}^S$	299	290	295	291	294
$4^2P_{1/2}$ $\alpha_{\gamma J}^S$	572	564	552	703	607
$4^2P_{3/2}$ $\left\{ \begin{array}{l} \alpha_{\gamma J}^S \\ \alpha_{\gamma J}^T \end{array} \right.$	582 -95	574 -97	561 -111	739 -111	614 -107
$4^2D_{3/2}$ $\left\{ \begin{array}{l} \alpha_{\gamma J}^S \\ \alpha_{\gamma J}^T \end{array} \right.$	34600 -7450	34600 -7460	39780 -9865	38505 -9296	
$4^2D_{5/2}$ $\left\{ \begin{array}{l} \alpha_{\gamma J}^S \\ \alpha_{\gamma J}^T \end{array} \right.$	34500 -10500	34500 -10500	39600 -13890	43443 -13085	

Таблица 5

Скалярные и тензорные части статической поляризуемости атома  $Rb$  (ам.ед.)

$Rb$	Без поляризац. остова	С поляризацией остова ( $\alpha = 9.1$ )	Работа [7]	Работа [19]	Эксп. [20]
$5^2S_{1/2}$ $\alpha_{\gamma J}^S$	328	300	324	318	320
$5^2P_{1/2}$ $\alpha_{\gamma J}^S$	726	705	748	963	812
$5^2P_{3/2}$ $\left\{ \begin{array}{l} \alpha_{\gamma J}^S \\ \alpha_{\gamma J}^T \end{array} \right.$	783 -143	761 -150	801 -154	1032 -169	859 -163
$5^2D_{3/2}$ $\left\{ \begin{array}{l} \alpha_{\gamma J}^S \\ \alpha_{\gamma J}^T \end{array} \right.$	16500 -1020	16600 -1060	21110 -2871	22679 -2007	
$5^2D_{5/2}$ $\left\{ \begin{array}{l} \alpha_{\gamma J}^S \\ \alpha_{\gamma J}^T \end{array} \right.$	16100 -842	16200 -909	20670 -3387	22289 -2193	

Представляет интерес сравнить величины вкладов в скалярную и тензорную части от дискретного и непрерывного спектров (табл. 6). Видно, что вклад континуума в обе части поляризуемости практически одинаков и не превышает нескольких процентов. При этом он растет с ростом атомного номера.

Таблица 6

*Вклады дискретного и непрерывного спектров в поляризуемости с учетом поляризации остова*

	Na, $3^2D_{5/2}$	K, $4^2D_{5/2}$	Rb, $5^2D_{5/2}$
$\alpha_{\gamma J}^{S,Dis}$	6342	34400	16105
$\alpha_{\gamma J}^{S,Con}$	18	100	95
$\alpha_{\gamma J}^{T,Dis}$	-5035	-10469	-878
$\alpha_{\gamma J}^{T,Con}$	-5	-31	-31
$\alpha_c$	1.0	6.0	9.076
$\dot{\alpha}_{\gamma J}^S$	6360	34500	16200
$\alpha_{\gamma J}^T$	-5040	-10500	-909

В таблице 7 приведены вклады наиболее важных переходов в поляризуемость уровня  $5^2P_{1/2}$  атома рубидия (с учетом поляризации остова) и сравнение с результатами МВТ [17].

Таблица 7

*Скалярные и тензорные части статической поляризуемости атома Rb*

	$\Delta E$ [eV]	$f$ (АТОМ)	$f$ (МВТ)	$\delta\alpha_{\gamma J}^S$ (АТОМ)	$\delta\alpha_{\gamma J}^S$ (МВТ)
$5^2P_{1/2} \rightarrow 5^2S_{1/2}$	1.56	-0.331	-0.342	-101	-104
$5^2P_{1/2} \rightarrow 6^2S_{1/2}$	0.94	0.186	0.197	157	167
$5^2P_{1/2} \rightarrow 7^2S_{1/2}$	1.70	0.018	0.019	4.5	4.8
$5^2P_{1/2} \rightarrow 4^2D_{3/2}$	0.84	0.582	0.662	610	694
$5^2P_{1/2} \rightarrow 5^2D_{3/2}$	1.63	0.028	0.036	7.9	10.2
Полная скалярная поляризуемость				705	805

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ.** В работе расчитаны поляризуемости основного и первых возбужденных состояний щелочных атомов Na, K, Rb. Из анализа проведенных вычислений следует, что для всех рассмотренных атомов основной вклад в поляризуемость  $\alpha_{\gamma J}^S$  ( $nS$ )

дает переход  $ns \rightarrow np$ . При вычислении  $\alpha_{\gamma J}^{S,T}(nP)$  вклад дают три перехода:  $np \rightarrow ns$ ,  $np \rightarrow (n+1)s$ ;  $np \rightarrow nd(\text{Na})$ ,  $np \rightarrow (n-1)d(\text{K, Rb})$ . Расчет поляризуемостей  $\alpha_{\gamma J}^{S,T}(nD)$  требует учета большего количества переходов вследствие наличия больших вкладов разных знаков. Переходы, характеризующиеся большим изменением главного квантового числа  $\Delta n$ , практически не вносят вклада в поляризумость. Это связано с быстрым затуханием матричных элементов с ростом  $\Delta n$ , а также с величиной энергетического знаменателя для таких переходов. Вклад непрерывного спектра во всех случаях мал.

Сравнение полученных значений  $\alpha_{\gamma J}^S$  и  $\alpha_{\gamma J}^T$  с экспериментальными данными и значениями, полученными другими теоретическими методами, показывает недостаточное количественное согласие результатов. Это может быть связано, с одной стороны, с неточностью вычисления приведенных матричных элементов и необходимостью учета взаимодействия конфигураций, а с другой стороны – с компенсацией больших вкладов разных знаков.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ N 06-02-16298.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Е. Кондон, Г. Шортли, *Теория атомных спектров* (М., Мир, 1949).
- [2] R. Molof, H. L. Schwartz, T. M. Miller, and B. Bederson, Phys. Rev. A **10**, 1131 (1974).
- [3] K. E. Miller, D. Krause, Jr., and L. R. Hunter, Phys. Rev. A **49**, 5128 (1994).
- [4] L. R. Hunter, D. Krause, D. J. Berkeland, and M. G. Boshier, Phys. Rev. A **44**, 6140 (1991).
- [5] L. R. Hunter, D. Krause, K. E. Miller, et al., Opt. Commun. **94**, 210 (1992).
- [6] V. E. Chernov, D. L. Dorofeev, I. Yu. Kretinin, and B. A. Zon, Phys. Rev. A **71**, 022505 (2005).
- [7] A. A. Kamenski, V. D. Ovsiannikov, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **39**, 2247 (2006).
- [8] M. S. Safranova, C. J. Williams, C. W. Clark, Phys. Rev. A **69**, 022509 (2004).
- [9] L. A. Vainshtein, V. P. Shevelko, Preprint of the Lebedev Physical Institute N 43 (Moscow, Lebedev Phys. Inst., 1996).
- [10] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, т. III (М., Наука, 1989).
- [11] Л. П. Рапопорт, Б. А. Зон, Н. Л. Манаков, *Теория многофотонных процессов в атомах* (М., Атомиздат, 1978).
- [12] Д. А. Варшалович, А. Н. Москалёв, В. К. Херсонский, *Квантовая теория углового момента* (Ленинград, Наука, 1975).

- [13] V. S. Lebedev, I. L. Beigman, *Physics of Highly Excited Atoms and Ions* (Springer-Verlag, Berlin, 1998).
- [14] S. Hameed, A. Herzenberg, M. James, Proc. Phys. Soc. **2**, 822 (1968).
- [15] M. F. Gu, Astrophysical Journal **582**, 1241 (2003).
- [16] F. A. Parpia, C. Froese Fischer, I. P. Grant, Computer Physics Communications **94**(2-3), 249 (1996).
- [17] B. Arora, M. S. Safronova, C. W. Clark, Phys. Rev. A **76**, 052516 (2007).
- [18] Shevelko, A. V. Vinogradov, Physica Scripta (Sweden) **19**, 275 (1979).
- [19] В. А. Давыдкин, Б. А. Зон, Оптика и спектроскопия **52**(4), 600 (1982).
- [20] Daniel A. Steck, Alkali D Line Data, URL: <http://steck.us/alkalidata/>

Поступила в редакцию 9 сентября 2008 г.