

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи

Залялютдинов Тимур Амирович

**КВАНТОВАЯ ЭЛЕКТРОДИНАМИКА МНОГОФОТОННЫХ
ПЕРЕХОДОВ В АТОМЕ ВОДОРОДА И МНОГОЗАРЯДНЫХ
ИОНАХ**

Специальность 01.04.02—
«теоретическая физика»

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук,
профессор Лабзовский Л. Н.

Санкт-Петербург— 2016

Содержание

Введение	4
1 Постановка задачи и применяемые методы	12
2 Неразделимость "чистого" многофотонного и каскадного вкладов в многофотонные процессы в атомах	15
2.1 Вероятность двухфотонного распада: формализм S-матрицы	15
2.2 Многофотонные распады при наличии каскадов	18
2.3 Регуляризация амплитуд многофотонных процессов при наличии каскадов в рамках КЭД	28
2.4 Квантовомеханический подход для регуляризации амплитуд многофотонных процессов при наличии каскадов	40
2.5 Сравнение различных способов регуляризации амплитуд многофотонных процессов с каскадами	44
3 Модель перепоглощения многофотонного излучения	46
3.1 Перепоглощение однофотонного излучения	46
3.2 Перепоглощение двухфотонного излучения	50
3.3 Перепоглощение трёх- и четырёхфотонного излучения	52
3.4 Относительная роль многофотонного распада возбуждённых состояний в "отрыве" излучения	56
4 Двухфотонная ширина. Мнимая часть собственной энергии электрона	58
4.1 Мнимая часть двухпетлевых радиационных поправок	58
4.2 Двухфотонная ширина в формализме адиабатической S-матрицы Гелл-Манна-Лоу-Сьючера	67
5 Спин-Статистические Правила Отбора для многофотонных переходов в атомах	73
5.1 Обобщение теоремы Ландау-Янга на двухфотонные переходы в атомах	73
5.2 Спин-Статистические Правила Отбора для системы трёх эквивалентных фотонов	80
5.3 Спин-Статистические Правила Отбора для системы четырёх эквивалентных фотонов	91

6	Возможность экспериментальной проверки ССПО	95
6.1	Общая идея проверки	95
6.2	Трёхфотонные переходы в водородоподобных МЗИ	97
6.3	Трёхфотонные переходы в атоме гелия	103
6.4	Результаты вариационных расчётов в атоме гелия	109
	Заключение	114
	Основные положения выносимые на защиту	114
	Список литературы	116

Введение

Актуальность работы

Теория многофотонных переходов в атомах впервые была развита в работе М. Гёшперт-Майер [1]. Первый расчёт двухфотонного распада $2s \rightarrow 1s + 2\gamma(E1)$ в атоме водорода был выполнен в работе Брейта и Теллера [2] (см. поправку к этой работе [3]). Наиболее аккуратный нерелятивистский расчёт этого перехода был произведен в [4], а первые полностью релятивистские расчеты были даны в [5] и затем в [6]- [7]. КЭД поправки к этому переходу в атоме водорода были рассчитаны в [8]. Интерес к характеристикам $2s \rightarrow 1s + 2\gamma(E1)$ перехода в настоящее время вызван рекордными по точности измерениями частоты этого перехода [9]. Этот же переход важен с точки зрения астрофизики поскольку сыграл существенную роль в эпоху космологической рекомбинации и образования реликтового космического излучения [10], [11]. Помимо двухквантового распада $2s \rightarrow 1s$ другие двухквантовые переходы в атоме водорода также интенсивно изучаются как экспериментально, так и теоретически. В частности, это относится к переходам $3s \rightarrow 1s + 2\gamma(E1)$, $3d \rightarrow 1s + 2\gamma(E1)$. В нескольких лабораториях частоты этих переходов измеряются с большой точностью [12], [13]. Эти же переходы представляют интерес и для астрофизики [14]- [15]. Полностью релятивистские расчеты вероятности многофотонных переходов в многозарядных ионах (МЗИ) были проведены в работах [16], [17]- [18]. За исключением двухквантового распада $2s \rightarrow 1s$ в атоме водорода, для всех других многофотонных переходов в основное состояние, а также во многих случаях и для многофотонных переходов в МЗИ, возникает проблема правильного описания каскадных переходов. Впервые эта проблема возникла при описании двухквантовых распадов в МЗИ. Расчёт двухквантовых распадов метастабильных уровней 2^1S_0 , 2^3S_1 в гелиеподобных МЗИ представляет практический интерес в связи с наличием большого числа экспериментальных данных. Поскольку в МЗИ поправки на межэлектронное взаимодействие имеют малость порядка $1/Z$ (Z - заряд ядра), такие расчеты при больших значениях Z могут иметь смысл даже в одноэлектронном приближении. Распады $2^1S_0 \rightarrow 1^1S_0$ и $2^3S_1 \rightarrow 1^1S_0$ рассчитывались в [19] в нерелятивистском приближении, а в [20] - в полностью релятивистском варианте для произвольных значений $Z \leq 100$. Проблема каскадов возникает при описании процесса $(1s2p_{1/2})^3P_0 \rightarrow (1s)2^1S_0 + 2\gamma(E1M1)$ благодаря тому, что в гелиеподобных МЗИ уровни 2^3S_1 и 2^3P_1 лежат ниже, чем 2^3P_0 . Двухквантовый переход $E1M1$ определяет распад метастабильного уровня 2^3_0 в МЗИ. Впервые такой расчет с учётом каскадов был проделан в [21]. Вклад каскадов описывался лоренцевским контуром

и вычитался из общего распределения фотонов по частотам. Та же проблема рассматривалась позднее в [22] в более широком диапазоне значений Z . В работах [23], [24] была разработана общая КЭД теория каскадных переходов в одноэлектронных атомах и ионах, базирующаяся на работе Ф. Лоу [25] по КЭД теории лоренцевского контура спектральных линий. В диссертации показано, что из общей двухфотонной вероятности невозможно однозначно выделить вклад каскадов и "чисто двухфотонную" вероятность, тем более что в полном выражении для вероятности присутствует еще интерференция каскадного и "чисто двухфотонного" вкладов. Примерно в те же годы проблема выделения "чисто двухфотонных" или, как еще они назывались, "нерезонансных" вкладов рассматривалась для атома водорода. В наших работах [26]- [27] показано, что "чисто двухфотонную" вероятность однозначно выделить невозможно, в том числе и рассматривая "двухфотонную ширину т.е. мнимую часть двухпетлевой радиационной поправки. Эквивалентность мнимой части однопетлевой радиационной поправки к энергии уровня сумме одноквантовых вероятностей переходов с этого уровня хорошо известна (см. например [28]). С помощью такого подхода вычислялись также радиационные поправки к одноквантовым вероятностям перехода [29], [30]. Однако, такое же соответствие между двухквантовыми вероятностями и мнимой частью двухпетлевых радиационных поправок не столь очевидно и нуждается в детальном анализе. Такой анализ представлен в настоящей диссертации. Еще один неоднозначный вопрос в теории многофотонных переходов при наличии каскадов это способ регуляризации каскадных вкладов. Расходимости в каскадных вкладах возникают, когда частота излучаемого фотона совпадает с разностью энергий начального и промежуточного состояний и соответствующий знаменатель обращается в нуль. Это может происходить лишь когда энергия промежуточного состояния меньше энергии начального состояния, т.е. когда есть каскадный переход. Как правило, регуляризация каскадных вкладов достигается добавлением мнимой части к энергии промежуточного состояния, т.е. учетом ширины промежуточного уровня [31], [32]- [33]. Такой подход является по сути феноменологическим. Вместе с тем в [32] упоминалось о том, что возможно также учитывать ширину начального уровня в процессе регуляризации. В работах [17], [26], [34] на основе КЭД подхода и теории Лоу [25] было продемонстрировано, что, строго говоря, в рамках КЭД необходимо учитывать ширины обоих уровней, начального и промежуточного. Связь КЭД подхода с феноменологической теорией и относительная важность учета ширины начального состояния рассмотрена в данной диссертации. Обсуждаемые проблемы относятся непосредственно к теории процессов в атоме водорода и в МЗИ с одним и двумя

электронами (некоторые возможные приложения к астрофизике были затронуты в [18]). Ещё одна общая проблема, связанная с фундаментальной перестановочной симметрией бозонов (в нашем случае фотонов), которая тесно связана с многофотонными переходами, также рассмотрена в диссертации. Это обобщение теоремы Ландау-Янга [35], [36] на случай многофотонных переходов в атомах. Согласно теореме Ландау-Янга, система двух фотонов не может иметь суммарный угловой момент, равный единице. Связь этой теоремы с некоторыми специфическими запретами для вероятностей двухфотонных переходов в атомах обсуждалась в [37]- [38]. В диссертации сформулированы Спин-Статистические Правила Отбора (ССПО) для многофотонных переходов в атомах и МЗИ, представляющие собой расширение теоремы Ландау-Янга на случай 3-х и 4-х фотонных переходов.

Цель работы

Основными целями диссертации являются:

1. расчёт двухфотонных переходов в атоме водорода с учётом каскадов
2. расчёт вероятностей перепоглощения двух- и трёхфотонного излучения
3. регуляризация в рамках КЭД амплитуд каскадных многофотонных процессов излучения
4. вычисление двухфотонных ширин в атоме водорода
5. расчёт вероятностей трёхфотонных переходов в одно и двухэлектронных МЗИ
6. исследование Спин-Статистических Правил Отбора для многофотонных переходов в атомах и МЗИ

Научная новизна работы

В диссертации получены следующие новые результаты:

1. Показана неразделимость вклада "чистого" двухфотонного излучения и вклада каскадного излучения в полную вероятность двухфотонного распада. Проведены расчёты вероятностей переходов $4s \rightarrow 1s + 2\gamma(E1)$ и $3s \rightarrow 1s + 2\gamma(E1)$ в атоме водорода.
2. В рамках квантовой электродинамики проведена регуляризация амплитуд многофотонных процессов с каскадами. Показано что КЭД и феноменологический квантовомеханический подходы приводят к одинаковому результату, а также, что при регуляризации каскадов должны учитываться как ширина начального так и ширина промежуточного состояния.

3. Проведены расчёты вероятностей перепоглощения двух и трёхфотонного излучения на примере системы двух атомов водорода. Представлена модель учёта вклада "чистого" излучения в процессы рекомбинации без выделения каскадных членов.
4. Проведены расчёты мнимой части двухпетлевой собственной энергии электрона. Показано, что полученная величина является радиационной поправкой к однофотонной ширине и не может трактоваться как вклад "чистого" излучения в полную вероятность в двухфотонных переходах с каскадами.
5. Представлено аналитическое доказательство спин-статистических правил отбора для многофотонных переходов в атомах и МЗИ являющиеся расширением теоремы Ландау-Янга. Проведены полностью релятивистские численные расчёты трёхфотонных переходов в гелиеподобном уране и атоме водорода между компонентами тонкой структуры с учётом сверхтонкого расщепления. Представлен нерелятивистский расчёт трёхфотонных переходов в атоме гелия на которых реализуются спин-статистические правила отбора. Предложен эксперимент с применением оптических лазеров для проверки Спин-Статистических Правил Отбора.

Научная и практическая значимость работы

1. Приведены вычисления, показывающие неразделимость вклада "чистого" двухфотонного излучения и вклада каскадного излучения в полную вероятность двухфотонного распада.
2. Получены аналитические выражения регуляризованных амплитуд для вероятностей двух и трёхфотонных переходов при наличии каскадов в рамках как квантовоэлектродинамического так и феноменологического подходов. Продемонстрирована эквивалентность обоих методов. Полученный в диссертации результат показывает, что правильная регуляризация амплитуд многофотонных переходов при наличии каскадов важна при расчёте вероятностей перепоглощения излучения.
3. Показано, что мнимая часть двухпетлевой собственной энергии не может рассматриваться как вклад "чистого" излучения в полную вероятность в двухфотонных переходах с каскадами и является радиационной поправкой к ширине энергетического уровня.

4. Представлена модель учёта вклада "чистого" излучения в процессы рекомбинации без выделения каскадных членов. Рассмотренный в диссертации метод может быть полезен в задачах рекомбинации водорода в ранней вселенной.
5. Выведены Спин-Статистические Правила Отбора для многофотонных переходов в атомах. Полученные в диссертации результаты представляют интерес для прецизионных спектроскопических экспериментов по проверке статистики Бозе-Эйнштейна.

Апробация работы

Работа докладывалась на научных семинарах кафедры квантовой механики физического факультета Санкт-Петербургского Государственного Университета и Петербургского Института Ядерной Физики. Основные результаты были представлены на конференциях Physics of Simple Atomic Systems (PSAS), Германия, Эльтвиль, 2011; Прецизионная физика и фундаментальные константы, 2011, г. Дубна; Прецизионная физика и фундаментальные константы, 2014, г. Дубна; The Stored Particle Atomic Research Collaboration at FAIR, Германия, Вормс, 2014; конференция "Молодые учёные России" фонда Дмитрия Зимины "Династия", Москва, 2015; WE-Heraeus-Seminar on Astrophysics, Clocks and Fundamental Constants, Германия, Бад-Хоннеф, 2015; устный доклад на конференции International Conference on Precision Physics and Fundamental Constants, Венгрия, Будапешт, 2015.

Публикации

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

1. Т. А. Залялютдинов, Д. А. Соловьев, Л. Н. Лабзовский, Двухфотонный распад $4s-1s$ в атоме водорода с учетом каскадов, Оптика и Спектроскопия, **110**, 362–368 (2011)
2. T. Zaliutdinov, D. Solovyeu and L. Labzowsky, QED model of the radiation escape from matter, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **45**, 165006 (2012)
3. T. Zaliutdinov, Yu. Baukina, D. Solovyeu, L. Labzowsky, Theory of the multiphoton cascade transitions with two photon links: comparison of quantum electrodynamical and quantum mechanical approaches, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **47** 115007 (2014)
4. T. Zaliutdinov, D. Solovyeu, L. Labzowsky, and G. Plunien, Two-photon transitions with cascades: Two-photon transition rates and two-photon level widths, Phys. Rev. A **89**, 052502 (2014)

5. T. Zalialiutdinov, D. Solovyev, L. Labzowsky, G. Plunien, Exclusion principle for photons: Spin-statistic selection rules for multiphoton transitions in atomic systems, Phys. Rev. A **91**, 033417 (2015)
6. T. Zalialiutdinov, D. Solovyev, L. Labzowsky, QED calculations of three-photon transition probabilities in H-like ions with arbitrary nuclear charge, принята в J. Phys. B (2015), доступна по адресу <http://arxiv.org/abs/1601.04138>
7. T. Zalialiutdinov, D. Solovyev, L. Labzowsky and G. Plunien, Spin-statistic selection rules for multiphoton transitions: Application to helium atoms, Phys. Rev. A **93**, 012510 (2016)

Объём и структура работы

Диссертация состоит из введения, шести глав и заключения. Полный объем диссертации составляет 120 страниц с 21 рисунком и 13 таблицами. Список литературы содержит 97 наименований.

Краткое содержание работы

В **первой** главе диссертации представлено современное состояние физики многофотонных процессов в атомах и многозарядных ионах. Приведён обзор существующих результатов по расчётам двухфотонных переходов при наличии каскадов в атомах и МЗИ. Глава содержит обзор основных направлений исследований в физике многофотонных процессов в атомах и МЗИ. Отмечен особый интерес экспериментаторов к двухфотонным распадам в атоме водорода в связи с новыми весьма точными измерениями температурной и поляризационной анизотропии космического микроволнового фона. Кроме того, представлен обзор прецизионных экспериментов по проверке фундаментальной перестановочной симметрии бозонов, имеющих непосредственное отношение к многофотонными переходам. Обсуждаются результаты достигнутые в теории многофотонных процессов, в частности многофотонного излучения при наличии каскадов, проблемы выделения "чистого" излучения и фундаментальной перестановочной симметрии, тесно связанной со статистикой Бозе-Эйнштейна. Также кратко описываются методы применяемые в диссертации для расчёта вероятностей многофотонных процессов.

Во **второй** главе изложена КЭД теория метода контура линии и её приложение к описанию многофотонных переходов, в частности двух и трёхквантовых распадов возбуждённых состояний в атомах и МЗИ при наличии каскадов. Глава состоит из 5

частей. В §2.1 рассматривается формализм S -матрицы и его приложение к вероятностям двухфотонного распада в атоме водорода. Отмечены существенные особенности при описании двухфотонных переходов при наличии каскадов, которые приводят к появлению ширины уровня в энергетическом знаменателе. Параграф §2.2 затрагивает проблему разделения "чистого" и каскадного излучений в процессах двухфотонного распада. Продемонстрирована невозможность такого однозначного разделения на примере $3s \rightarrow 1s + 2\gamma(E1)$ и $4s \rightarrow 1s + 2\gamma E(1)$ переходов в атоме водорода. В параграфе §2.3 представлен квантовоэлектродинамический (КЭД) подход для регуляризации амплитуд двух и трёхфотонных процессов при наличии каскадов. Регуляризация каскадных членов производится по процедуре предложенной Лоу [25]. В §2.4 рассматривается квантомеханический (КМ, феноменологический) метод регуляризации амплитуд основанный на решении нестационарного уравнения Шрёдингера. Показано что оба подхода (КЭД и КМ) приводят к одинаковым регуляризованным выражениям для амплитуд, включающим в энергетическом знаменателе как ширину начального так и ширину промежуточного (каскадного) состояния. В параграфе §2.5 проводится сравнение различных способов регуляризации, как с одной так и с двумя ширинами в знаменателе на примере задачи перепоглощения многофотонного излучения.

Третья глава посвящена расчётам вероятностей перепоглощения многофотонного излучения одного атома водорода другим. Глава состоит из 5 параграфов. В §3.1 выводятся основные формулы для вероятности перепоглощения однофотонного излучения одного атома другим атомом. Выводится выражение для вероятности излучения фотона после n -кратного перерасеяния. В параграфе §3.2 представлено выражение для вероятности переизлучения атомом после однократного поглощения двух фотонов. Представлены результаты численных расчётов для поглощения $2s \rightarrow 1s + 2\gamma(E1)$ и $3s \rightarrow 1s + 2\gamma(E1)$ переходов в атоме водорода. В §3.3 и §3.4 аналогичные расчёты выполнены для поглощения 3-х и 4-х фотонного излучения. Обсуждение роли многофотонного распада возбуждённых состояний в отрыв излучения в эпоху космологической рекомбинации даётся в параграфе §3.5.

Четвёртая глава посвящена вычислению мнимой части двухпетлевой собственной энергии электрона. Рассматривается метод предложенный в работах [39]- [40] согласно которому вклад "чистого" двухфотонного излучения в двухфотонных переходах с

каскадами может быть получен из двухпетлевой собственной энергии. Глава состоит из 2 параграфов. В §4.1 представлен КЭД вывод аналитического выражения для двухфотонной ширины энергетического уровня. Параграф §4.2 посвящён вычислению двухфотонной ширины в формализме адиабатической матрицы Гелл-Манна-Лоу-Сьючера и обсуждению полученных результатов численных расчётов двухфотонных ширин возбуждённых состояний в атоме водорода.

Пятая глава диссертации посвящена спин-статистическим правилам отбора для многофотонных переходов в атомах и МЗИ представляющих собой расширение теоремы Ландау-Янга. Глава состоит из 4 параграфов. В параграфе §5.1 приводится вывод спин-статистических правил отбора для переходов с излучением (поглощением) двух эквивалентных фотонов. Обсуждаются различия с оригинальной теоремой Ландау-Янга и аналогия с системой нескольких эквивалентных электронов. В §5.2 и §5.3 представлено доказательство спин-статистических правил отбора для 3-х и 4-х фотонных переходов. Представлены численные расчёты на примере трёхфотонных переходов в гелиеподобном уране.

В **шестой** главе рассматривается возможная экспериментальная проверка спин-статистических правил отбора с применением оптических лазеров. Особый интерес к обсуждаемой проблеме вызван недавними экспериментальными работами [37], [38] (см. также [41]) в которых изучалось спин-статистическое поведение системы двух фотонов. Глава состоит из 4 параграфов. В §6.1 обсуждается возможность проведения экспериментов с трёхфотонными переходами в атоме водорода. Представлены рабочие релятивистские формулы для расчёта вероятностей трёхфотонного излучения между компонентами тонкой структуры с учётом сверхтонкого расщепления. В параграфе §6.3 обсуждается возможность проведения экспериментов с трёхфотонными переходами в атоме гелия. Излагаются основы вариационного подхода к решению задачи. Приведены рабочие выражения для матричных элементов дипольного перехода, вероятности трёхфотонного перехода и коэффициентов спин-орбитального смешивания энергетических уровней в атоме гелия, возникающих при вычислении вероятностей интеркомбинационных переходов. Результаты вариационных расчётов уровней энергии, коэффициентов спин-орбитального смешивания и вероятностей переходов представлены в §6.4.

Глава 1. Постановка задачи и применяемые методы

В последние годы процессы двухфотонного распада привлекли особое внимание в связи с новыми весьма точными измерениями температурной и поляризационной анизотропии космического микроволнового фона [42, 43]. В связи с этими наблюдениями становится важным исследовать с высокой точностью рекомбинационную историю водорода. В ранней Вселенной сильный Лайман- α $2p - 1s$ переход не позволяет атомам оставаться в их основном состоянии: каждый фотон, испущенный в таком переходе одним атомом, немедленно поглощается другим атомом. Однако, имеется очень слабый $2s - 1s$ двухфотонный процесс распада, в результате которого излучение может перестать взаимодействовать с веществом и, таким образом, привести к окончательной рекомбинации. Роль $2s - 1s$ двухфотонного распада была впервые установлена в работах [10, 11]. Другие двухфотонные каналы распада, т.е. $ns - 1s$, $nd - 1s$ переходы, также были исследованы в [44]- [45]. При существующей точности достигнутой в астрофизических экспериментах эти вклады оказываются также существенными.

Имеется существенная разница между распадами ns ($n > 2$, аналогично nd) и $2s$ уровней, заключающаяся в присутствии каскадных переходов в ns/nd распадах. Каскадное излучение является доминирующим. Так как каскадное излучение эффективно поглощается, возникает проблема выделения "чистого" двухфотонного излучения в таких переходах. Интерференция между двумя каналами распада, т.е. "чистым" и каскадным излучением, также должна быть учтена.

Подобная проблема возникала в теории двухэлектронных многозарядных ионов (МЗИ) [21]- [22]. В [21] впервые был рассмотрен двухфотонный $E1M1$ переход с наличием каскадного перехода в гелиеподобном уране ($Z = 92$). Позже были проделаны аналогичные расчеты для гелиеподобных МЗИ в случае различных Z ($50 \leq Z \leq 92$) [22]. В [21, 22] "чистый" двухфотонный вклад был получен выделением лоренцевского контура, описывающего каскад, из функции распределения по частотам полного двухфотонного распада. В [21, 22] было рассмотрено также наличие интерференционных членов, но только приближенно: как асимметрия контура Лоренца. Последовательное квантовоэлектродинамическое (КЭД) описание двухфотонных распадов с наличием каскадов было сделано в [23] (см. также [24]). В случае каскадов интеграл по частоте излученного фотона становится расходящимся из-за сингулярных членов, соответствующих резонансам (каскадам). Чтобы исключить расходимость, необходимо просуммировать бесконечный ряд собственнэнер-

гетических поправок, см. [24]. Это суммирование сводится к геометрической прогрессии; тогда поправка на собственную энергию электрона (и, в частности, ширина уровня, как мнимая часть этой поправки) входит в энергетический знаменатель и сдвигает полюс с вещественной оси в комплексную плоскость, делая, таким образом, интеграл сходящимся. Именно таким образом Лоу впервые вывел контур Лоренца в КЭД теории [25]. Другим способом, с помощью преобразования Лапласа в рамках нерелятивистской КЭД, контур Лоренца был получен в работе Фока и Тулуба [46]. Также, введением ширин уровней в сингулярные энергетические знаменатели (но феноменологически в рамках квантовой механики), вероятности двухфотонного распада ns/nd возбужденных состояний были рассчитаны в астрофизических работах [15,31], а также в [47]. В связи с этим становится важной проблема правильной регуляризации каскадных членов в рамках КЭД. В [23] неразделимость "чистого" двухфотонного и каскадного излучения была впервые отмечена для МЗИ. Там было показано, что интерференционные члены могут давать существенный вклад в полную вероятность распада.

В то же время в работах [39], [40] рассматривался другой подход для учёта вклада "чистого" излучения. Известно, что в рамках КЭД радиационная ширина энергетического уровня может быть представлена как мнимая часть собственной энергии электрона. Это приводит к тому, что ширина уровня может быть представлена как сумма вероятностей однофотонных переходов во всевозможные нижележащие состояния. Аналогичным образом в [39], [40] было предложено рассматривать двухфотонную вероятность как двуквантовую ширину энергетического уровня, которая в свою очередь получается как мнимая часть двухпетлевой собственной энергии электрона. Такой подход приводит к выражениям для вероятностей двухфотонных переходов с каскадами в которых отсутствуют расходимости требующие регуляризации. Однако, результаты, полученные в данном подходе, не всегда могут интерпретироваться как вероятности соответствующих двуквантовых переходов и требуют тщательного анализа. Вычисление в рамках КЭД мнимой части двухпетлевой собственной энергии электрона и физическая интерпретация полученных результатов рассматриваются в четвёртой главе диссертации.

Многофотонные процессы в атомах и МЗИ, в частности двухфотонное поглощение, недавно исследовались в прецизионных оптических экспериментах по проверке статистики Бозе-Эйнштейна [37]- [38]. Эта проблема тесно связана с теоремой Ландау-Янга [35]- [36], согласно которой система двух эквивалентных фотонов не может иметь суммарный угловой момент, равный единице. Известно, что волновая функция системы двух фотонов

должна быть симметрична относительно перестановки аргументов. Этого требует статистика Бозе-Эйнштейна. Работа [37] посвящена поиску антисимметричных двухфотонных состояний. С этой целью в [37] исследовались переходы с поглощением двух фотонов в парах бария между состояниями с полными угловыми моментами $J = 0$ и $J = 1$. Такой переход запрещён для двух эквивалентных фотонов по правилам отбора связанным со статистикой Бозе-Эйнштейна (теоремой Ландау-Янга). В [37] установлено ограничение на вероятность того, что два фотона могут находиться в антисимметричном состоянии. Таким образом было продемонстрировано, что статистика Бозе-Эйнштейна в пределах точности эксперимента выполняется. Позже в [41] этот предел был улучшен. В связи с экспериментальным интересом к спин-статистическому поведению многофотонных систем становится важным исследовать правила отбора возникающие в переходах с числом фотонов $N_\gamma > 2$.

Важным моментом являются численные расчёты вероятностей многофотонных переходов в рамках теории возмущений в квантовой механике или квантовой электродинамике. Наибольшую трудность в таких расчётах представляет суммирование по полному набору состояний в электронных пропагаторах. В случае водородоподобных ионов такое суммирование проводится по полному спектру одноэлектронного уравнения Шрёдингера или Дирака. Помимо прямого суммирования дискретного спектра и интегрирования непрерывного спектра (смотри [18], [48]), в диссертации также применяются и другие методы для вычисления спектральных сумм. Среди них - метод суммирования по дискретным базисным состояниям. Он заключается в том, что суммирование по исходному спектру уравнения Шрёдингера или Дирака заменяется суммированием по конечному набору дискретных псевдосостояний. Эти псевдосостояния могут быть построены из кусочно-полиномиальных наборов (метод В-сплайнов [49]). Применение метода В-сплайнов к задачам теории атома рассмотрено в [49], [50]. Кроме того в некоторых случаях в этих же целях используют полиномы Бернштейна (см. [51]). Другие способы дискретизации дираковского спектра были развиты в работах [52], [53].

Другим мощным инструментом для вычисления спектральных сумм одноэлектронного уравнения Шрёдингера или Дирака с кулоновским потенциалом является кулоновская функция Грина (КФГ) или релятивистская кулоновская функция Грина (РКФГ). КФГ и РКФГ широко применяются для расчётов многофотонных процессов в атомах. Применение кулоновской функции Грина позволяет получить результат суммирования в замкнутой форме или в форме разложения по бесконечному числу дискретных псевдосостояний (Штурмовское разложение). КФГ в координатном представлении [54] применялась для

расчётов вероятностей двухфотонного перехода $2s - 1s$ в работе [55]. Обзор приложений метода КФГ к расчёту многофотонных процессов представлен в работах [56], [57].

Кроме того в последней главе диссертации применяется вариационный принцип Рэлея-Ритца [58] для расчётов вероятностей многофотонных переходов в атоме гелия. Использование вариационных функций также приводит к дискретизации спектра исходного уравнения Шрёдингера для двух электронов в кулоновском поле ядра. Задача суммирования в этом случае сводится к решению соответствующего секулярного уравнения и нахождению линейных коэффициентов разложения затравочной волновой функции по базису (см. [59]).

Глава 2. Неразделимость "чистого" многофотонного и каскадного вкладов в многофотонные процессы в атомах

2.1 Вероятность двухфотонного распада: формализм S-матрицы

В этой главе рассматривается проблема неразделимости "чистого" многофотонного и каскадного вкладов в многофотонные процессы в атомах. Ранее невозможность однозначной разделимости этих вкладов была продемонстрирована в работе [26] на примере двухфотонного перехода $3s - 1s$. Однако, в [26] не рассматривалась калибровочная инвариантность предложенного метода. В нашей работе [27] были проведены расчёты аналогичные [26] для двухфотонного перехода $3s - 1s$ с повышенной точностью для двух калибровок. Кроме того в работе [48] была продемонстрирована неразделимость "чистого" и каскадного вкладов на примере двухфотонного $4s - 1s$ перехода.

Амплитуда вероятности двухфотонного распада $A \rightarrow A' + 2\gamma$ соответствует S-матричному элементу:

$$\langle A' | \hat{S}^{(2)} | A \rangle = e^2 \int d^4x_1 d^4x_2 \left(\bar{\psi}_{A'}(x_1) \gamma_{\mu_1} A_{\mu_1}^*(x_1) S(x_1 x_2) \gamma_{\mu_2} A_{\mu_2}^*(x_2) \psi_A(x_2) \right), \quad (2.1)$$

где $\hat{S}^{(2)}$ - S-матрица второго порядка, e - заряд электрона, $\psi_A(x) = \psi_A(\vec{r}) e^{-iE_A t}$ - волновая функция атомного электрона, являющаяся решением уравнения Дирака, E_A - дираковская энергия атома. $\bar{\psi}_{A'}(x) = \psi_{A'}^\dagger \gamma_0$ - дираковски сопряженная функция, $\psi_{A'}^\dagger$ означает эрмитово сопряжение, $\gamma_\mu = (\gamma_0, \vec{\gamma})$ - матрицы Дирака. Волновая функция фотона $A_\mu(x)$ записывается

следующим образом:

$$A_{\mu}^{(\vec{e}, \vec{k})}(x) = \sqrt{\frac{2\pi}{\omega}} e_{\mu}^{(\lambda)} e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)} = \sqrt{\frac{2\pi}{\omega}} e_{\mu}^{(\lambda)} e^{-i\omega t} A_{\mu}^{(\vec{e}, \vec{k})}(\vec{r}), \quad (2.2)$$

где $e_{\mu}^{(\lambda)}$ четырёх-вектор поляризации фотона, $k = (\vec{k}, \omega)$ - волновой четырёх-вектор фотона (\vec{k} - волновой вектор фотона, $\omega = |\vec{k}|$ его частота), $x \equiv (\vec{r}, t)$ - четырёх-вектор координат (\vec{r}, t - пространственные и временная координаты), а λ обозначает тип фотона (электрический или магнитный). Описывая реальные, т.е. поперечные, фотоны, мы можем записать равенство:

$$\gamma_{\mu} e_{\mu}^{(\lambda)} = \vec{e}^{(\lambda)} \vec{\alpha}, \quad (2.3)$$

где $\vec{e}^{(\lambda)}$ - вектор поляризации фотона, $\vec{\alpha} = \gamma_0 \vec{\gamma}$ - α -матрицы Дирака. Наконец, $S(x_1 x_2)$ - фейнмановский пропагатор атомного электрона. В картине Фарри разложение пропагатора по собственным функциям гамильтониана Дирака выглядит следующим образом:

$$S(x_1 x_2) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 e^{i\omega_1(t_1-t_2)} \sum_n \frac{\psi_n(\vec{r}_1) \bar{\psi}_n(\vec{r}_2)}{E_n(1-i0) + \omega_1}, \quad (2.4)$$

где суммирование проводится по всему дираковскому спектру электронных состояний в поле ядра. Амплитуда перехода $U_{A'A}$ определяется из соотношения:

$$\langle A' | \hat{S}^{(2)} | A \rangle = -2\pi i \delta(\omega + \omega' - E_A + E_{A'}) U_{A'A}^{(2)}, \quad (2.5)$$

где $U_{A'A}$ - амплитуда процесса, а частоты ω, ω' соответствуют двум излученным фотонам.

Вероятность перехода не может быть определена непосредственно из $|\langle A' | \hat{S}^{(2)} | A \rangle|^2$, так как в этом случае мы получим квадрат δ -функции. Стандартная процедура состоит в следующем: мы должны выразить одну из δ -функций, возникающих в (2.1) после интегрирования по времени t через интеграл Фурье

$$\delta(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{iEt} dt. \quad (2.6)$$

Формально ограничим интегрирование по времени интервалом $(-T/2, +T/2)$, тогда вместо (2.6) получаем

$$\delta_T(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-T/2}^{T/2} e^{iEt} dt. \quad (2.7)$$

Умножая $\delta_T(E)$ на δ -функцию $\delta(E)$ приходим к результату:

$$\delta(E)\delta_T(E) = \delta(E)\delta_T(0) = \delta(E)\frac{T}{2\pi}.$$

Таким образом, вероятность процесса пропорциональна времени наблюдения T . Естественно ввести вероятность перехода в единицу времени. По определению

$$W_{A'A}^{(2\gamma)} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \left| \langle A' | \hat{S}^{(2)}(T) | A \rangle \right|^2 = 2\pi \left| U_{A'A}^{(2)} \right|^2 \delta(\omega + \omega' - E_A + E_{A'}), \quad (2.8)$$

где $(\dots)_{A'A}$ обозначает матричный элемент $\langle A' | \dots | A \rangle$ с волновыми функциями конечного $\psi_{A'}^\dagger(\vec{r})$ и начального $\psi_A(\vec{r})$ состояний, соответственно.

Если конечное состояние системы принадлежит сплошному спектру (как в нашем случае, когда есть излученные фотоны) дифференциальная вероятность перехода определяется как

$$dW_{A'A}^{(2\gamma)}(\vec{k}, \vec{e}) = 2\pi \left| U_{A'A}^{(2)} \right|^2 \delta(\omega + \omega' - E_A + E_{A'}) \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{d\vec{k}'}{(2\pi)^3}, \quad (2.9)$$

Используя формулы (2.1) и (2.9) для двухфотонного перехода, интегрируя по временам и частоте в электронном пропагаторе и учитывая перестановочную симметрию фотонов для процесса двухфотонного излучения, находим

$$U_{A'A}^{(2)} = \frac{2\pi e^2}{\sqrt{\omega\omega'}} \left[\sum_n \frac{(\vec{\alpha}\vec{A}_{\vec{e},\vec{k}}^*)_{A'n} (\vec{\alpha}\vec{A}_{\vec{e}',\vec{k}'}^*)_{nA}}{E_n - E_A + \omega'} + \sum_n \frac{(\vec{\alpha}\vec{A}_{\vec{e}',\vec{k}'}^*)_{A'n} (\vec{\alpha}\vec{A}_{\vec{e},\vec{k}}^*)_{nA}}{E_n - E_A + \omega} \right] \quad (2.10)$$

где $\vec{A}_{\vec{e},\vec{k}} = \vec{e} e^{i\vec{k}\vec{r}}$.

В частности, нас интересуют двухфотонные распады ns -уровней в атоме водорода. В этом случае атомные электроны можно описывать нерелятивистски, т.е. с помощью уравнения Шрёдингера. В этом параграфе мы остановимся на $2s - 1s$ двухфотонном переходе ($n = 2$), когда каскад отсутствует. В нерелятивистском пределе (см. например [60]) после того как произведено интегрирование по частоте ω' одного из фотонов, суммирование по

поляризациям, а также интегрирование по направлениям вылета фотонов, мы получаем функцию распределения вероятности по частоте фотона:

$$dW_{ns,1s}(\omega) = \frac{8\omega^3(\omega_0 - \omega)^3}{27\pi} e^4 |S_{1s,ns}(\omega) + S_{1s,ns}(\omega_0 - \omega)|^2 d\omega, \quad (2.11)$$

$$S_{1s,ns}(\omega) = \sum_{n'p} \frac{\langle R_{1s}|r|R_{n'p}\rangle \langle R_{n'p}|r|R_{ns}\rangle}{E_{n'p} - E_{ns} + \omega}, \quad (2.12)$$

$$\langle R_{n'p}|r|R_{nl}\rangle = \int_0^\infty r^3 R_{n'p}(r) R_{nl}(r) dr, \quad (2.13)$$

где $\omega_0 = E_{ns} - E_{1s}$, $R_{nl}(r)$ представляет радиальную часть нерелятивистской волновой функции (решение уравнения Шредингера), а E_{nl} - энергия атомного электрона. Выражение для вероятности перехода записано в форме "длины". Подробно калибровочная инвариантность двухфотонных переходов в нерелятивистском пределе была рассмотрена в [61].

Вероятность распада в единицу времени может быть получена после интегрирования (2.11) по частоте ω :

$$W_{ns,1s} = \frac{1}{2} \int_0^{\omega_0} dW_{ns,1s}(\omega). \quad (2.14)$$

В случае $n = 2$ каскад отсутствует, функция распределения (2.11) регулярна, и интеграл (2.14) сходится. Значение вероятности в единицу времени хорошо известно и равно $W_{2s,1s} = 24.7548 m\alpha^2(\alpha Z)^6$ p.e. = 8.229 c^{-1} [6].

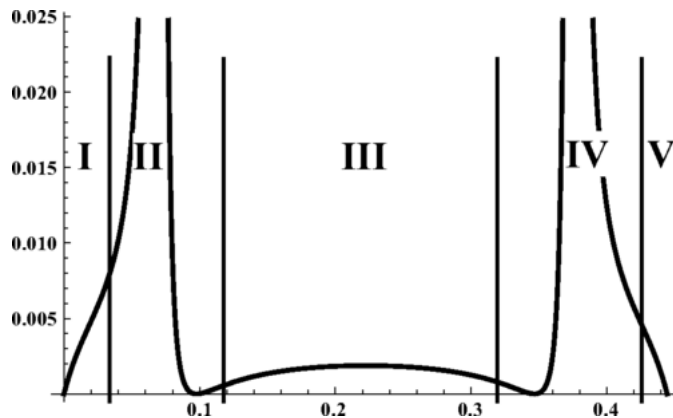
2.2 Многофотонные распады при наличии каскадов

В случае каскадных переходов ($n > 2$), отдельные слагаемые в (2.12) становятся сингулярными и интеграл (2.14) расходится. Эта расходимость имеет физическое происхождение: излученный фотон попадает в резонанс. Следовательно, расходимость может быть устранена лишь введением ширины этого резонанса. Эта же ситуация была рассмотрена в [23] для МЗИ. Следуя выкладкам в [23] (смотри также [26]), мы должны выделить резонансные члены (соответствующие каскаду) в сумме по всем промежуточным состояниям (2.12) и применить процедуру Лоу [25] для регуляризации соответствующих выражений в окрестности частоты резонанса. Метод Лоу [25] для вывода контура линии заключает-

ся в суммировании приводимых собственнoэнергетических диаграмм, которое приводит в геометрической прогрессии и появлению ширины уровня в энергетическом знаменателе. Кроме того в работе [46] лоренцевский контур выводился в рамках нерелятивистской КЭД. Подробное описание процедуры регуляризации в рамках КЭД будет приведено в §2.3.

В случае перехода $3s-1s$ интегрирование по частоте на промежутке $[0, \omega_0]$ в (2.14) должно быть разбито на несколько подпромежутков (Рис. (1)): пять в случае $3s \rightarrow 1s+2\gamma$ перехода. Первый интервал начинается от $\omega = 0$ до левой границы второго интервала II. Последний охватывает окрестность первого резонанса, соответствующий частоте $\omega = E_{3s} - E_{2p}$. Внутри интервала II резонансное слагаемое $n_1 = 2p$ должно быть выделено из суммы по всем промежуточным состояниям и заменено выражением с регуляризованным энергетическим знаменателем. Третий интервал III распространяется от правой границы второго интервала II до левой границы четвёртого IV, последний в свою очередь охватывает область резонанса в окрестности частоты $\omega = E_{2p} - E_{1s}$. Внутри четвёртого интервала резонансный член $n_1 = 2p$ снова должен быть заменен выражением с регуляризованным энергетическим знаменателем. Наконец пятый интервал V ограничен левой границей четвёртого интервала и максимальной частотой $\omega_0 = E_{3s} - E_{1s}$ а.е. в случае двухфотонного распада $3s$ уровня в атоме водорода. Отметим, что функция распределения по частоте является симметричной относительно частоты $\omega = \omega_0/2$ с 1% точностью (связанной с разницей входящих в знаменатели ширин). Очевидно, что каскадные переходы дают доминирующий вклад в вероятность двухфотонного распада.

Рис. 1: Функция распределения по частоте $dW_{3s-1s}^{2\gamma}(\omega)/d\omega$ для перехода $3s \rightarrow 1s + 2\gamma$, делённая на α^6 (α - константа тонкой структуры). Границы частотных подинтервалов I-V обозначены вертикальными линиями. По оси абсцисс отложена частота в а. е.



Окончательно полную вероятность двухфотонного распада $3s$ уровня в атоме водорода можно представить в виде суммы трёх вкладов $W_{3s-1s}^{2\gamma}$: каскадного, чистого и интерферен-

ЦИОННОГО:

$$W_{3s-1s}^{2\gamma} = W_{3s-1s}^{2\gamma, \text{ cascade}} + W_{3s-1s}^{2\gamma, \text{ pure}} + W_{3s-1s}^{2\gamma, \text{ interference}} , \quad (2.15)$$

$$W_{3s;1s}^{(\text{cascade})} = \frac{4}{27\pi} \frac{\Gamma_{3s} + \Gamma_{2p}}{\Gamma_{2p}} \int_{(\text{II})} \omega^3 (\omega_0 - \omega)^3 \left| \frac{(r)_{3s2p} (r)_{2p1s}}{E_{2p} - E_{3s} + \omega - \frac{i}{2}(\Gamma_{3s} + \Gamma_{2p})} \right|^2 d\omega + \quad (2.16)$$

$$+ \frac{4}{27\pi} \int_{(\text{IV})} \omega^3 (\omega_0 - \omega)^3 \left| \frac{(r)_{3s2p} (r)_{2p1s}}{E_{2p} - E_{1s} - \omega - \frac{i}{2}\Gamma_{2p}} \right|^2 d\omega ,$$

$$W_{3s;1s}^{(\text{pure } 2\gamma)} = \frac{4}{27\pi} \int_{(\text{II})} \omega^3 (\omega_0 - \omega)^3 \left| S_{1s;3s}^{(2p)}(\omega) + S_{1s;3s}(\omega_0 - \omega) \right|^2 d\omega + \quad (2.17)$$

$$+ \frac{4}{27\pi} \int_{(\text{IV})} \omega^3 (\omega_0 - \omega)^3 \left| S_{1s;3s}(\omega) + S_{1s;3s}^{(2p)}(\omega_0 - \omega) \right|^2 d\omega +$$

$$+ \frac{4}{27\pi} \int_{(\text{I+III+V})} \omega^3 (\omega_0 - \omega)^3 \left| S_{1s;3s}(\omega) + S_{1s;3s}(\omega_0 - \omega) \right|^2 d\omega ,$$

$$dW_{3s;1s}^{(\text{interference})} = \frac{\Gamma_{3s} + \Gamma_{2p}}{\Gamma_{2p}} \int_{(\text{II})} \frac{4\omega^3 (\omega_0 - \omega)^3}{27\pi} \text{Re} \left[\frac{(r)_{3s2p} (r)_{2p1s}}{E_{2p} - E_{3s} + \omega - \frac{i}{2}(\Gamma_{3s} + \Gamma_{2p})} \right] \times \quad (2.18)$$

$$\left[S_{1s;3s}^{(2p)}(\omega) + S_{1s;3s}(\omega_0 - \omega) \right] d\omega +$$

$$+ \int_{(\text{IV})} \frac{4\omega^3 (\omega_0 - \omega)^3}{27\pi} \text{Re} \left[\frac{(r)_{3s2p} (r)_{2p1s}}{E_{2p} - E_{1s} - \omega - \frac{i}{2}\Gamma_{2p}} \right] \left[S_{1s;3s}(\omega) + S_{1s;3s}^{(2p)}(\omega_0 - \omega) \right] d\omega , \quad (2.19)$$

$$S_{1s;3s} = \sum_{n'p} \frac{(r)_{3sn'p} (r)_{n'p1s}}{E_{n'p} - E_{3s} + \omega} , \quad (2.20)$$

$$(r)_{nl n'l'} = \int_0^\infty r^3 R_{nl}(r) R_{n'l'}(r) dr . \quad (2.21)$$

Здесь $S_{1s;3s}^{(2p)}$ определяется выражением (2.20) с исключенным из суммы $2p$ состоянием.

Результаты численных расчётов представлены в таблице 1. Удобно определить размер второго интервала II как произведение некоторого целого числа l и ширины резонансного состояния, т.е. $\Delta\omega_{II} = 2(\Gamma_{3s} + \Gamma_{2p})l$. Аналогичным образом можно поступить и для четвёртого интервала $\Delta\omega_{IV} = 2\Gamma_{2p}l$. Значение параметра l варьируется от $l = 10^4$ до $l = 1.5 \times 10^6$. Таким

образом правая граница второго интервала в атомных единицах равна $\omega^{res.1} + l(\Gamma_{3s} + \Gamma_{2p}) = \frac{5}{72} + l(\Gamma_{3s} + \Gamma_{2p})$, левая граница четвёртого интервала в свою очередь равна $\omega^{res.2} - l\Gamma_{2p} = \frac{3}{8} - l\Gamma_{2p}$.

Строки таблицы 1 представляют вклады различных интервалов в чистое двухфотонное излучение $W_{3s-1s}^{2\gamma,pure}$ при разном выборе параметра l . В последних трёх строках представлен интерференционный вклад $W_{3s-1s}^{2\gamma,interference}$, каскадный $W_{3s-1s}^{2\gamma,cascade}$ и значение полной вероятности двухфотонного перехода $W_{3s-1s}^{2\gamma}$. Из таблицы 1 можно сделать следующий вывод: чистое двухфотонное излучение зависит от выбора интервалов $\Delta\omega_{II}$, $\Delta\omega_{IV}$ и не может быть выделено из полной вероятности $W_{3s-1s}^{2\gamma}$. Только сумма всех трёх вкладов $W_{3s-1s}^{2\gamma} = W_{3s-1s}^{2\gamma,cascade} + W_{3s-1s}^{2\gamma,pure} + W_{3s-1s}^{2\gamma,interference}$ определена однозначно и не зависит от выбора интервалов, т.е. остаётся инвариантной.

Эта инвариантность видна из сравнения двух последних строк в таблице 1: каскадный вклад изменяется в 6 раз в зависимости от выбора параметра l (в этом же 6 раз вклады чистого и интерференционного вклада также становятся важными) в то время как в полной вероятности $W_{3s-1s}^{2\gamma}$ все 6 знаков остаются неизменными.

В таблице 2 представлены аналогичные вычисления для двухфотонного распада $3s$ уровня выполненные в калибровке "скорости". Хотя все числа отличаются довольно значительно, полная вероятность $W_{3s-1s}^{2\gamma}$ остаётся прежней, инвариантной относительно выбора интервалов и совпадает со значением в калибровке "длины" в шести знаках. Результаты, представленные в таблицах 1 и 2 опубликованы в нашей работе [27]. Стоит отметить, что приведённые в [27] расчёты, ранее были опубликованы в [26], однако были выполнены только в калибровке длины и с меньшей точностью. Также в [26] не были представлены отдельно полные вероятности, позволяющие проследить калибровочную инвариантность расчётов.

Также особый интерес представляет двухфотонный распад $4s$ -уровня в атоме водорода. Двухфотонный $4s - 1s$ распад более сложный, так как он содержит уже четыре (а не два, как в случае $3s - 1s$) резонанса, также требующих регуляризации в рамках КЭД [25]. Аналогично случаю $3s - 1s$ перехода интегрирование по частоте на промежутке $[0, \omega_0]$ должно быть разбито на несколько под-промежутков, 9 в случае двухфотонного распада $4s$ -уровня. Первый интервал начинается от 0 до нижней границы второго интервала. Последний охватывает окрестность первого резонанса, соответствующий частоте $\omega_{4s-3p}^{res.1} = 7/288$ в атомных единицах. Внутри интервала (II) резонансное слагаемое $n = 3$ в (2.12) должно быть выделено из суммы по всем промежуточным состояниям и заменено выражением с регуляризованным энергетическим знаменателем. Таковым знаменателем

является $E_{3p} - E_{4s} + \omega + \frac{i}{2}\Gamma$, где $\Gamma = \Gamma_{3p} + \Gamma_{4s}$. Третий интервал (III) распространяется от верхней границы интервала (II) до нижней границы интервала (IV), который, в свою очередь, соответствует другому резонансу с частотой $\omega_{4s-2p}^{res} = 3/32$ а.е. Внутри интервала (IV) резонансный член в (2.12) вновь должен быть заменен на аналогичный с модифицированным знаменателем $E_{2p} - E_{4s} + \omega + \frac{i}{2}\Gamma$, где $\Gamma = \Gamma_{2p} + \Gamma_{4s}$. Далее, интервал (V) распространяется от верхней границы интервала (IV) до нижней границы интервала (VI), который определяет окрестность второго "колена" $\omega_{2p-1s}^{res} = 3/8$ а.е. второго каскада. Внутри этого интервала мы заменяем энергетический сингулярный знаменатель на $E_{2p} - E_{1s} - \omega - \frac{i}{2}\Gamma_{2p}$. Следующий интервал (VII) определяется от верхней границы интервала (VI) до нижней границы интервала (VIII). Интервал (VIII) определяет окрестность второго "колена" первого каскада и соответствует частоте $\omega_{3p-1s}^{res} = 4/9$ а.е.. Внутри этого интервала сингулярный энергетический знаменатель будет равен $E_{3p} - E_{1s} - \omega - \frac{i}{2}\Gamma_{3p}$. Наконец последний интервал (IX) ограничен верхним пределом интервала (VIII) и максимальной частотой $\omega_0 = 15/32$ а.е. в случае двухфотонного распада $4s$ -уровня в атоме водорода. Функция распределения по частоте является симметричной относительно частоты $\omega = \omega_0/2$ с 1% точностью (связанной с разницей входящих в знаменатели ширин). Каскадные переходы дают доминирующий вклад в вероятность двухфотонного распада.

Подставляя (2.11) в (2.14) при $n = 4$ и оставляя лишь резонансные члены во втором, четвертом, шестом и восьмом частотных интервалах (смотри Рис. 2), мы получим вклад каскадов в полную вероятность двухфотонного распада $4s$ -уровня. Поделив на полную ширину $4s$ -уровня Γ_{4s} , мы получим относительную величину каскадного перехода. Вклады каскадных переходов в интервалах (I), (III), (V), (VII) и (IX) полагаются равными нулю. Каскадный вклад в ширину $4s$ -уровня может быть выписан в виде (форма "длины"):

$$\begin{aligned}
W_{4s;1s}^{(cascade\ 1\gamma)} &= \frac{4}{27\pi} \int_{(II)} \omega^3 (\omega_0 - \omega)^3 \left| \frac{\langle R_{4s}(r)|r|R_{3p}(r)\rangle \langle R_{3p}(r')|r'|R_{1s}(r')\rangle}{E_{3p} - E_{4s} + \omega - \frac{i}{2}\Gamma} \right|^2 d\omega + \\
&+ \frac{4}{27\pi} \int_{(IV)} \omega^3 (\omega_0 - \omega)^3 \left| \frac{\langle R_{4s}(r)|r|R_{2p}(r)\rangle \langle R_{2p}(r')|r'|R_{1s}(r')\rangle}{E_{2p} - E_{4s} - \omega - \frac{i}{2}\Gamma} \right|^2 d\omega + \\
&+ \frac{4}{27\pi} \int_{(VI)} \omega^3 (\omega_0 - \omega)^3 \left| \frac{\langle R_{4s}(r)|r|R_{3p}(r)\rangle \langle R_{3p}(r')|r'|R_{1s}(r')\rangle}{E_{3p} - E_{1s} - \omega - \frac{i}{2}\Gamma_{3p}} \right|^2 d\omega + \\
&+ \frac{4}{27\pi} \int_{(VIII)} \omega^3 (\omega_0 - \omega)^3 \left| \frac{\langle R_{4s}(r)|r|R_{2p}(r)\rangle \langle R_{2p}(r')|r'|R_{1s}(r')\rangle}{E_{2p} - E_{1s} - \omega - \frac{i}{2}\Gamma_{2p}} \right|^2 d\omega. \quad (2.22)
\end{aligned}$$

А вероятность "чистого" двухфотонного распада на каждом из интервалов, определенных выше, выглядит следующим образом:

$$dW_{4s;1s}^{(\text{pure } 2\gamma)} = \frac{4}{27\pi} \omega^3 (\omega_0 - \omega)^3 \left| S_{1s;4s}^{(3p)}(\omega) + S_{1s;4s}(\omega_0 - \omega) \right|^2 d\omega, \quad \omega \in \mathbf{II} \quad (2.23)$$

$$dW_{4s;1s}^{(\text{pure } 2\gamma)} = \frac{4}{27\pi} \omega^3 (\omega_0 - \omega)^3 \left| S_{1s;4s}^{(2p)}(\omega) + S_{1s;4s}(\omega_0 - \omega) \right|^2 d\omega, \quad \omega \in \mathbf{IV} \quad (2.24)$$

$$dW_{4s;1s}^{(\text{pure } 2\gamma)} = \frac{4}{27\pi} \omega^3 (\omega_0 - \omega)^3 \left| S_{1s;4s}(\omega) + S_{1s;4s}^{(2p)}(\omega_0 - \omega) \right|^2 d\omega, \quad \omega \in \mathbf{VI} \quad (2.25)$$

$$dW_{4s;1s}^{(\text{pure } 2\gamma)} = \frac{4}{27\pi} \omega^3 (\omega_0 - \omega)^3 \left| S_{1s;4s}(\omega) + S_{1s;4s}^{(3p)}(\omega_0 - \omega) \right|^2 d\omega, \quad \omega \in \mathbf{VIII} \quad (2.26)$$

$$dW_{4s;1s}^{(\text{pure } 2\gamma)} = \frac{4}{27\pi} \omega^3 (\omega_0 - \omega)^3 \left| S_{1s;4s}(\omega) + S_{1s;4s}(\omega_0 - \omega) \right|^2 d\omega, \quad (2.27)$$

$$\omega \in \mathbf{I}, \mathbf{III}, \mathbf{V}, \mathbf{VII}, \mathbf{IX} .$$

Здесь $S_{1s;3s}^{(3(2)p)}(\omega)$ определяется выражением (2.12) с исключенным состоянием $3p$ ($2p$). В противоположность каскадам, все интервалы дают вклад в "чистое" двухфотонное излучение. Абсолютная величина "чистого" двухфотонного излучения для перехода $4s \rightarrow 2\gamma + 1s$ выражается соотношением:

$$b_{4s-1s}^{(\text{pure } 2\gamma)} = \frac{1}{2} \frac{1}{\Gamma_{4s}} \int_0^{\omega_0} dW_{4s;1s}^{(\text{pure } 2\gamma)}(\omega) . \quad (2.28)$$

Остается ввести только интерференционные члены. Для краткости выпишем только вклад во втором и четвертом интервалах. Соответствующие функции распределения по частоте определены формулами:

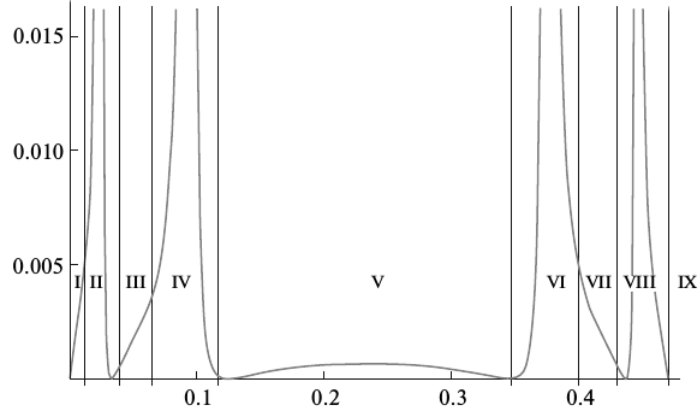
$$dW_{4s;1s}^{(\text{inter } 1)} = \frac{4\omega^3 (\omega_0 - \omega)^3}{27\pi} \text{Re} \left[\frac{\langle R_{4s}(r) | r | R_{3p}(2r) \rangle \langle R_{3p}(r') | r' | R_{1s}(r') \rangle}{E_{3p} - E_{4s} + \omega + \frac{i}{2}\Gamma} \right] \times \left[S_{1s;4s}^{(3p)}(\omega) + S_{1s;4s}(\omega_0 - \omega) \right] d\omega , \quad (2.29)$$

$$dW_{4s;1s}^{(\text{inter } 2)} = \frac{4\omega^3(\omega_0 - \omega)^3}{27\pi} \text{Re} \left[\frac{\langle R_{4s}(r)|r|R_{2p}(2r) \rangle \langle R_{2p}(r')|r'|R_{1s}(r') \rangle}{E_{2p} - E_{4s} + \omega + \frac{i}{2}\Gamma} \right] \times \left[S_{1s;4s}^{(2p)}(\omega) + S_{1s;4s}(\omega_0 - \omega) \right] d\omega \quad (2.30)$$

и абсолютная величина определяется

$$b_{4s;1s}^{(\text{inter})} = \frac{1}{2\Gamma_{4s}} \int_{\text{(II)}} dW_{4s;1s}^{(\text{inter } 1)} + \frac{1}{2\Gamma_{4s}} \int_{\text{(IV)}} dW_{4s;1s}^{(\text{inter } 2)} + \frac{1}{2\Gamma_{4s}} \int_{\text{(VI)}} dW_{4s;1s}^{(\text{inter } 3)} + \frac{1}{2\Gamma_{4s}} \int_{\text{(VIII)}} dW_{4s;1s}^{(\text{inter } 4)}. \quad (2.31)$$

Рис. 2: Функция распределения по частоте $dW_{4s-1s}^{2\gamma}(\omega)/d\omega$ для перехода $4s \rightarrow 1s + 2\gamma$, делённая на α^6 (α - константа тонкой структуры). Границы частотных подинтервалов обозначены вертикальными линиями. По оси абсцисс отложена частота в а. е.



Результаты численных расчетов представлены в таблице 3 и опубликованы в нашей работе в [48]. Удобно определить размер $\Delta\omega$ второго интервала как произведение некоторого целого числа l и ширины Γ , т.е. $\Delta\omega = 2l\Gamma$. Также четвертый, шестой и восьмой интервалы определены как $\Delta\omega = 2l\Gamma$, $\Delta\omega = 2l\Gamma_{2p}$ и $\Delta\omega = 2l\Gamma_{3p}$, соответственно. В таблице 3 числа даны для различных значений l от $l \simeq 10^5$ до $l \simeq 10^7$. Верхняя граница интервала (II) равна $\omega^{res\ 1} + l\Gamma = 7/288 + l\Gamma$ (в атомных единицах), а нижняя граница интервала IV равна $\omega^{res\ 1} - l\Gamma = 7/288 - l\Gamma$. Аналогично определены остальные (четвертый, шестой и восьмой) интервалы. Строки в Таблице 1 соответствуют абсолютным (b) и относительным (W) вероятностям переходов "чистого" и "интерференционного" каналов, соответственно. Для более детального анализа вклады вероятностей "чистого" двухфотонного переходов также приводятся для каждого частотного интервала. Сумма абсолютных вероятностей отдельных вкладов равна единице $b_{4s-3p-1s}^{(\text{cascade})} + b_{4s-2p-1s}^{(\text{cascade})} + b_{4s;1s}^{(\text{pure } 2\gamma)} + b_{4s;1s}^{(\text{inter})} = 1$. Это соотношение выполняется с высокой точностью, так как мы пренебрегли лишь очень слабым однофотонным 1

переходом $4s \rightarrow 1s + \gamma$. Из таблицы 2 мы можем сделать следующие выводы: как и в случае МЗИ [22] и в случае двухфотонного перехода $3s \rightarrow 1s + 2\gamma$, вклады "чистого" двухфотонного (нерезонансного) и каскадного (резонансного) излучения в вероятность распада оказываются неразделимыми. Меняя размер интервалов $\Delta\omega$, мы получаем существенно различные значения $dW_{4s;1s}$, начиная с 133.47664 c^{-1} (для $l = 10^4$) до 2.50247 c^{-1} (для $l = 3.47 \cdot 10^6$). Более того, в наших расчетах, зависящих от размера интервала, интерференционный вклад также достаточно существенен в сравнении с вкладом "чистого" двухфотонного распада. Таким образом, мы продемонстрировали, что величина "чистого" двухфотонного распада для $4s$ -состояния атома водорода не может быть строго определена. Ранее для нерезонансного вклада в переходе $4s \rightarrow 1s + 2\gamma$ было получено значение 11.951 c^{-1} [31]. Это значение находится в рамках значений данных в таблице 3, однако, как было показано выше, не может служить в качестве однозначного определения величины "чистого" двухфотонного распада.

Таким образом "чистый" двухфотонный вклад невозможно отделить от вклада каскадных процессов. Интерференция между этими двумя типами переходов по величине сравнима с "чистым" двухфотонным вкладом. Проблема учёта "чистого" излучения в задачах космологической рекомбинации должна быть сформулирована так, чтобы не требовалось разделять "чистые" двухфотонные и каскадные переходы из возбужденных состояний атома водорода. Один из примеров такого подхода будет представлен в Главе 3.

Таблица 1: Вероятности перехода (в с^{-1}) для различных каналов двухфотонного распада $3s$ уровня в зависимости от размеров интервалов (l) в калибровке "скорости". Последняя колонка таблицы относится к предельному случаю, когда интервалы II и IV замыкаются друг с другом с использованием трёх параметров $l_1 = 4.53 \times 10^6$, $l_2 = 4.58 \times 10^6$ and $l_3 = 10^7$.

l	10^4	10^5	2.5×10^5	5×10^5	10^6	l_1, l_2, l_3
$W_I^{(pure)}$	53.05375194	7.05462259	3.57430739	2.18976651	1.27735735	0
$W_{II}^{(pure)}$	0.00624713	0.06246845	0.15613353	0.31199777	0.62181876	3.98083823
$W_{III}^{(pure)}$	95.53585438	7.87779112	2.79274511	1.45164839	1.04561648	0
$W_{IV}^{(pure)}$	0.00618480	0.06184525	0.15457664	0.30889200	0.61567230	3.95741133
$W_V^{(pure)}$	53.56051962	7.11011114	3.59987543	2.20557518	1.28862529	0
$W^{(pure)}$	202.16255787	22.16683855	10.27763810	6.46787984	4.84909017	7.93824956
$W^{(inter)}$	-0.00910554	-0.09106015	-0.22761672	-0.45498984	-0.90802360	-6.976045531
$W^{(case)}$	6.31675910×10^6	6.3169401×10^6	6.31695216×10^6	6.31695622×10^6	6.31695830×10^6	6.31696010×10^6
$W^{(total)}$	6.31696125×10^6	6.31696215×10^6	6.31696221×10^6	6.31696223×10^6	6.31696224×10^6	6.31696196×10^6

Таблица 2: Вероятности перехода (в с^{-1}) для различных каналов двухфотонного распада $3s$ уровня в зависимости от размеров интервалов (l) в калибровке "скорости". Последняя колонка таблицы относится к предельному случаю, когда интервалы II и IV замыкаются друг с другом с использованием трёх параметров $l_1 = 4.53 \times 10^6$, $l_2 = 4.58 \times 10^6$ and $l_3 = 10^7$.

l	10^4	10^5	2.5×10^5	5×10^5	10^6	l_1, l_2, l_3
$W_I^{(pure)}$	53.05371101	7.05459545	3.57428602	2.18974982	1.27734585	0
$W_{II}^{(pure)}$	0.00373447	0.03734343	0.09334150	0.18656065	0.37212616	2.45141850
$W_{III}^{(pure)}$	95.53586269	7.87777276	2.79271674	1.45161319	1.04557595	0
$W_{IV}^{(pure)}$	0.00369721	0.03697087	0.09241062	0.18470252	0.36843982	2.43568051
$W_V^{(pure)}$	53.56047863	7.11008395	3.59985400	2.20555842	1.28861370	0
$W^{(pure)}$	202.15748401	22.11676645	10.15260889	6.21818460	4.35210148	4.88709901
$W^{(inter)}$	-0.00251068	-0.02510978	-0.06278658	-0.125659184	-0.25201266	-2.71427111
$W^{(case)}$	6.31675909×10^6	6.31694006×10^6	6.31695212×10^6	6.31695614×10^6	6.31695814×10^6	6.31695986×10^6
$W^{(total)}$	6.31696125×10^6	6.31696215×10^6	6.31696221×10^6	6.31696223×10^6	6.31696224×10^6	6.31696203×10^6

Таблица 3: Вероятности перехода (в s^{-1}), а также их относительные величины, для различных каналов двухфотонного распада $4s$ -уровня в подынтервалах (I)-(IX) в зависимости от размеров интервалов (l). Последняя колонка таблицы относится к предельному случаю, когда интервалы II, IV, VI и VIII замыкаются друг с другом с использованием двух параметров $l_1 = 3.48 \cdot 10^6$, $l_2 = 3.52 \cdot 10^6$. Этот случай соответствует методу расчета в [15, 31].

l	10^4	10^5	$5 \cdot 10^5$	10^6	$2 \cdot 10^6$	$3.47 \cdot 10^6$	l_1, l_2
$b^{(\text{pure } 2\gamma)}$	$3.0233 \cdot 10^{-5}$	$3.1750 \cdot 10^{-6}$	$8.0662 \cdot 10^{-7}$	$5.5264 \cdot 10^{-7}$	$4.9533 \cdot 10^{-7}$	$5.6681 \cdot 10^{-7}$	$7.2829 \cdot 10^{-7}$
$W_I^{(\text{pure } 2\gamma)}$	13.35220	1.73703	0.52511	0.30539	0.14332	0.04029	0
$W_{II}^{(\text{pure } 2\gamma)}$	0.00145	0.01449	0.07243	0.14468	0.28785	0.49154	0.52825
$W_{III}^{(\text{pure } 2\gamma)}$	33.47500	3.61406	0.82795	0.41625	0.14812	0.00036	0
$W_{IV}^{(\text{pure } 2\gamma)}$	0.00184	0.01842	0.09193	0.18293	0.35780	0.57374	1.08139
$W_V^{(\text{pure } 2\gamma)}$	39.08470	3.17576	0.51206	0.33606	0.31441	0.29873	0
$W_{VI}^{(\text{pure } 2\gamma)}$	0.00183	0.01829	0.09129	0.18167	0.35545	0.57088	1.08164
$W_{VII}^{(\text{pure } 2\gamma)}$	33.91020	3.65639	0.83566	0.42000	0.15043	0.00204	0
$W_{VIII}^{(\text{pure } 2\gamma)}$	0.00142	0.01416	0.07078	0.14140	0.28140	0.48093	0.52414
$W_{IX}^{(\text{pure } 2\gamma)}$	13.64800	1.76918	0.53400	0.31152	0.14813	0.04396	0
$W^{(\text{pure } 2\gamma)}$	133.47664	14.01778	3.56123	2.43989	2.18690	2.50247	3.21542
$b^{(\text{inter})}$	$-1.08815 \cdot 10^{-9}$	$-1.08822 \cdot 10^{-8}$	$-5.43989 \cdot 10^{-8}$	$-1.08722 \cdot 10^{-7}$	$-2.16848 \cdot 10^{-7}$	$-3.73758 \cdot 10^{-7}$	$-5.87950 \cdot 10^{-7}$
$W^{(\text{inter})}$	-0.00480	-0.04804	-0.24017	-0.48001	-0.95738	-1.65014	-2.59248

2.3 Регуляризация амплитуд многофотонных процессов при наличии каскадов в рамках КЭД

Как уже упоминалось выше наличие каскадов в вероятностях двухфотонных переходов из состояний с $n > 2$ в основное состояние требует регуляризации соответствующих резонансных слагаемых. Проблема каскадов в двухфотонных переходах в двухэлектронных МЗИ впервые обсуждалась в [21]. Эта же проблема позже рассматривалась в [22]. В [23] (см. также [24]) в рамках КЭД был предложен подход для регуляризации каскадных переходов. Эта процедура приводит к появлению ширины энергетического уровня в резонансном знаменателе. Однако существует и другой подход, феноменологический (квантовомеханический), в котором ширина уровня вводится как феноменологический параметр. В квантовомеханическом (КМ) подходе обычно вводится только ширина промежуточного резонансного состояния [62], [32], [31]. В КЭД подходе, основанном на процедуре Лоу для вывода лоренцевского контура линии, регуляризация приводит к появлению суммы двух ширины знаменателе, начального и промежуточного энергетического уровня. Важно отметить, что в [32] возможность введения суммы двух ширины также упоминалась. В [26, 34] КЭД подход применялся для описания многофотонных переходов с каскадами из состояний $3s$, $3p$, $3d$ и $4s$ в атоме водорода.

Регуляризацию каскадных членов удобно начать с простейшего примера: двухфотонного перехода $3s \rightarrow 1s + 2\gamma$. В $3s \rightarrow 1s + 2\gamma$ есть только один каскад $3s \rightarrow 2p + \gamma \rightarrow 1s + 2\gamma$.

Полная вероятность двухфотонного перехода $W_{3s-1s}^{2\gamma}$ есть

$$W_{3s-1s}^{2\gamma} = \frac{1}{2} \int_0^{\omega_0} dW_{3s-1s}^{2\gamma}(\omega), \quad (2.32)$$

где $dW_{3s-1s}^{2\gamma}(\omega)$ дифференциальная плотность вероятности, ω частота одного из фотонов, $\omega_0 = E_{3s} - E_{1s}$. Дифференциальная вероятность $dW_{3s-1s}^{2\gamma}(\omega)$ как уже упоминалось выше может быть представлена в виде суммы трёх членов: каскадного вклада, "чистого" двухфотонного излучения и интерференции:

$$dW_{3s-1s}^{2\gamma} = dW_{3s-1s}^{2\gamma(cascade)} + dW_{3s-1s}^{2\gamma(pure)} + dW_{3s-1s}^{2\gamma(interference)}. \quad (2.33)$$

Неразделимость "чистого" и каскадного вкладов обсуждалась в предыдущем параграфе. Вклад каскада можно представить как сумму вкладов двух каскадных колен:

$$dW^{2\gamma(\text{cascade})} = dW_{3s-2p-1s}^{2\gamma(\text{resonance 1})} + dW_{3s-2p-1s}^{2\gamma(\text{resonance 2})}, \quad (2.34)$$

с двумя резонансными частотами: $\omega^{res1} = E_{3s} - E_{2p}$ и $\omega^{res2} = E_{2p} - E_{1s}$. Соответствующие резонансные вклады в рамках КЭД были получены в [26]

$$dW_{3s-2p-1s}^{2\gamma(\text{resonance 1})} = \frac{\Gamma_{3s} + \Gamma_{2p}}{\Gamma_{2p}} \frac{W_{3s-2p}^{1\gamma}(\omega^{res1}) W_{2p-1s}^{1\gamma}(\omega^{res2}) d\omega}{(\omega - \omega^{res1})^2 + \frac{1}{4}(\Gamma_{3s} + \Gamma_{2p})^2}, \quad (2.35)$$

$$dW_{3s-2p-1s}^{2\gamma(\text{resonance 2})} = \frac{W_{3s-2p}^{1\gamma}(\omega^{res1}) W_{2p-1s}^{1\gamma}(\omega^{res2}) d\omega}{(\omega - \omega^{res2})^2 + \frac{1}{4}\Gamma_{2p}^2}. \quad (2.36)$$

Здесь Γ_{3s} , Γ_{2p} радиационные ширины уровней $3s$, $2p$ соответственно, $W_{3s-2p}^{1\gamma}$, $W_{2p-1s}^{1\gamma}$ вероятности однофотонных переходов. В нерелятивистском пределе (учитывая только доминирующие $E1$ переходы) $\Gamma_{3s} = W_{3s-2p}^{1\gamma}$, $\Gamma_{2p} = W_{2p-1s}^{1\gamma}$. Таким образом интегрируя выражения (2.35), (2.36) по частоте ω и принимая во внимание (2.32)

$$\frac{1}{2} \int_0^{\omega_0} dW_{3s-2p-1s}^{2\gamma(\text{resonance 1})} = \frac{1}{2} W_{3s-2p}^{1\gamma} = \frac{1}{2} \Gamma_{3s}, \quad (2.37)$$

$$\frac{1}{2} \int_0^{\omega_0} dW_{3s-2p-1s}^{2\gamma(\text{resonance 2})} = \frac{1}{2} W_{3s-2p}^{1\gamma} = \frac{1}{2} \Gamma_{3s}. \quad (2.38)$$

Здесь,

$$W_{3s-1s}^{2\gamma(\text{cascade})} = \Gamma_{3s} \quad (2.39)$$

и

$$W_{3s-1s}^{2\gamma} = \Gamma_{3s} + \frac{1}{2} \int_0^{\omega_0} \left[dW_{3s-1s}^{2\gamma(\text{pure})} + dW_{3s-1s}^{2\gamma(\text{interference})} \right]. \quad (2.40)$$

В рамках КМ подхода регуляризация обычно выполняется введением ширины промежуточных np состояний, т.е. заменяя энергию E_{np} на $E_{np} - \frac{i}{2}\Gamma_{np}$ в знаменателе. В случае $3s - 2p - 1s$ каскада $\Gamma_{np} = \Gamma_{2p}$. Поэтому вклад первого резонанса вместо выражения (2.35)

принимает вид

$$dW_{3s-2p-1s}^{2\gamma(\text{resonance } 1)} = \frac{W_{3s-2p}^{1\gamma}(\omega^{res1}) W_{2p-1s}^{1\gamma}(\omega^{res2}) d\omega}{(\omega - \omega^{res1})^2 + \frac{1}{4}\Gamma_{2p}^2}. \quad (2.41)$$

в то время как вклад второго каскада $dW_{3s-2p-1s}^{2\gamma(\text{resonance } 2)}$ остаётся прежним (выражение (2.36)).

Важно подчеркнуть что подстановка выражения (2.41) в интеграл (2.32) приводит к тому же результату (см. выражение (2.37)) что и подстановка выражения (2.35). Можно предположить, что оба подхода эквивалентны. Однако это не так по двум причинам. Во-первых, эквивалентность вкладов каскадных членов в полную вероятность перехода не есть эквивалентность полной вероятности перехода из-за существования интерференции между каскадным и чистым двухфотонным вкладами. Во-вторых, в различных физических приложениях функция распределения по частоте двухфотонного перехода сворачивается с другими функциями. Это также нарушает эквивалентность упомянутую выше (конкретные примеры приведены в параграфе 2.5). Основной целью параграфов 2.3, 2.4 и 2.5 является построение метода регуляризации при котором в энергетическом знаменателе каскадных членов появляется ширина начального состояния. Подробное описание как КЭД так и КМ подходов приведено в нашей работе [63].

Перейдём к последовательному описанию многофотонных процессов с каскадами в рамках КЭД. Имея в виду приложение к задачам рекомбинации, рассмотрим резонансное рассеяние на основном состоянии $1s$ атома водорода. В дальнейшем предполагается, что рассматривается свободный атом, возбуждаемый источником с шириной излучения сравнимой с естественной шириной резонансного состояния. Таким образом исключается возбуждение узкополосным лазерным источником. Такое возбуждение конечно не соответствует космологической ситуации.

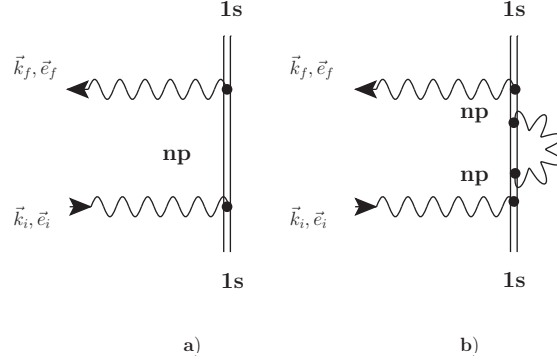
Рассматриваемые условия соответствуют случаю, когда каждый атом возбуждается фотонами испущенными другим атомом. Фейнмановская диаграмма соответствующая резонансному рассеянию фотона изображена на Рис. (3).

Соответствующая амплитуда рассеяния даётся выражением [28, 61]

$$S_{1s}^{(2)sc} = -2\pi i \delta(\omega_f - \omega_i) U_{1s}^{(2)sc}, \quad (2.42)$$

$$U_{1s}^{(2)sc} = e^2 \sum_n \frac{\left(\gamma_\mu A_\mu^*(\vec{k}_f, \vec{e}_f) \right)_{1sn} \left(\gamma_\mu A_\mu(\vec{k}_i, \vec{e}_i) \right)_{n1s}}{\omega_f + E_{1s} - E_n}, \quad (2.43)$$

Рис. 3: Фейнмановский график, описывающий резонансное рассеяние фотонов на основном состоянии атома водорода. На Рис. 3 (а) изображён процесс резонансного рассеяния с возбуждением np состояния. На Рис. 3 (б) сделана вставка собственной энергии электрона в пропагатор. Двойные сплошные линии обозначают электрон в поле ядра (картина Фарри), волнистые линии обозначают поглощенные, испускаемые и виртуальные фотоны.



где E_n дираковские энергии, γ_μ матрицы Дирака, $A_\mu^{\vec{k}, \vec{e}}$ векторный потенциал электромагнитного поля, \vec{e} вектор поляризации, \vec{k} волновой вектор и $\omega = |\vec{k}|$ частота фотона, индексы i, f обозначают поглощенный и испущенный фотон соответственно. Суммирование в (2.43) происходит по всему дираковскому спектру. Из закона сохранения следует что $|\vec{k}_f| = |\vec{k}_i|$.

Для процесса резонансного рассеяния частота фотона $\omega_i = \omega_f$ близка к разнице энергий двух атомных состояний. В случае резонанса на np состоянии $\omega_i \simeq E_{np} - E_{1s}$. Оставляя только один резонансный член в сумме по n в выражении (2.43) приходим к

$$U_{1s(np)}^{(2)sc} = e^2 \frac{\left(\gamma_\mu A_\mu^{*(\vec{k}_f, \vec{e}_f)} \right)_{1snp} \left(\gamma_\mu A_\mu^{(\vec{k}_i, \vec{e}_i)} \right)_{np1s}}{\omega_f + E_{1s} - E_{np}}. \quad (2.44)$$

Из выражения (2.44) видно что в резонансном приближении амплитуда рассеяния факторизуется на две части описывающие излучение и поглощение. В зависимости от того какой процесс должен быть описан, энергетический знаменатель приписывается или к поглощению или к излучению. В частности, амплитуда излучения может быть записана следующим образом

$$U_{np1s}^{em} = e \frac{\left(\gamma_\mu A_\mu^{*(\vec{k}_f, \vec{e}_f)} \right)_{1snp}}{\omega_f + E_{1s} - E_{np}}. \quad (2.45)$$

Нерезонансные поправки в резонансном приближении, впервые обсуждались в [25] и недавно рассматривались в работах [64, 65]. Роль этих поправок оказалось незначительной в большинстве случаев. Эти поправки возникают, если принять во внимание все оставшие-

ся после выделения резонансного слагаемого в сумме по n члены в выражении (2.43). Так как в обсуждаемой задаче нет необходимости в сверхточном определении резонансных частот, нерезонансными поправками можно пренебречь.

Из закона сохранения энергии (смотри выражение (2.42)) следует что $\omega_i = \omega_f$. Таким образом условие резонанса можно записать в виде

$$|\omega_i - E_{np} + E_{1s}| = |\omega_f - E_{np} + E_{1s}| \leq \Gamma_{np}. \quad (2.46)$$

В случаях, когда можно пренебречь шириной Γ_{np} в выражении (2.46), оно принимает вид закона сохранения энергии

$$\omega_f = E_{np} - E_{1s}. \quad (2.47)$$

Таким образом можно использовать (2.47) в числителе выражения (2.45), но не знаменателе. Чтобы вывести лоренцовский профиль для процесса излучения будем следовать процедуре предложенной Лоу [25]. Она заключается в учёте бесконечного числа собственно энергетических поправок в резонансном приближении в электронном пропагаторе (смотри Рис. (3)). Эта процедура сводится к геометрической прогрессии, суммирование которой приводит к появлению ширины уровня Γ_{np} в энергетическом знаменателе выражения (2.44) [24]

$$U_{np-1s}^{em} = e \frac{\left(\gamma_\mu A_\mu^*(\vec{k}_f \vec{e}_f) \right)_{1snp}}{\omega_f + E_{1s} - E_{np} + \frac{i}{2} \Gamma_{np}}. \quad (2.48)$$

Возводя амплитуду в выражении Eq. (2.48) в квадрат по модулю, интегрируя по направлениям вылета фотона $\vec{\nu}_f$ и суммируя по поляризациям, приходим к лоренцевскому контуру для абсолютной вероятности излучения фотона в интервале частот $\omega_f, \omega_f + d\omega_f$

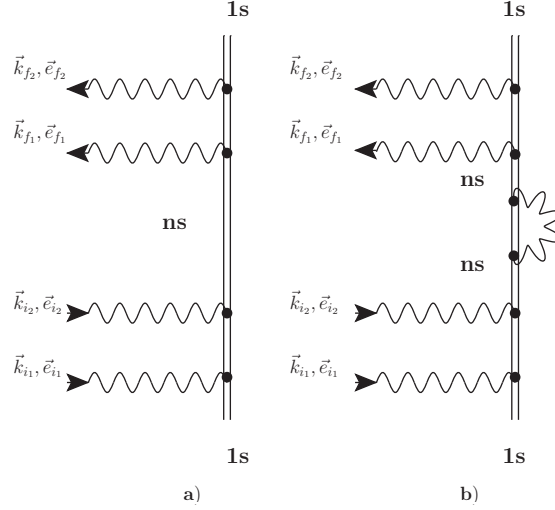
$$dw_{np-1s}(\omega_f) = \frac{1}{2\pi} \frac{W_{np-1s}^{1\gamma} d\omega_f}{(\omega_f + E_{1s} - E_{np} - L_{np})^2 + \frac{1}{4} \Gamma_{np}^2}, \quad (2.49)$$

где $W_{np-1s}^{1\gamma}$ вероятность однофотонного перехода $np \rightarrow 1s$. Лоренцовский контур нормирован на относительную вероятность перехода для $np - 1s$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dw_{np-1s} = \frac{W_{np-1s}^{1\gamma}}{\Gamma_{np}} = b_{np-1s}^{1\gamma}. \quad (2.50)$$

Перейдём к рассмотрению амплитуды двухфотонных процессов. Амплитуда двухфотонно-

Рис. 4: Фейнмановский график, описывающий двухфотонное резонансное рассеяние на основном состоянии атома водорода, с возбуждением ns ($n > 2$) состояний. Резонансное условие $\omega_1 + \omega_2 = E_{ns} - E_{1s}$. Обозначения те же, что и на Рис. 3



го процесса рассеяния представленного фейнмановской диаграммой на Рис. 4а выглядит следующим образом

$$U_{1s}^{(4)sc.} = e^4 \sum_{n_1 n_2 n_3} \frac{\left(\gamma_{\mu_1} A_{\mu_1}^*(\vec{k}_{f_2} \vec{e}_{f_2}) \right)_{1s n_1} \left(\gamma_{\mu_2} A_{\mu_2}^*(\vec{k}_{f_1} \vec{e}_{f_1}) \right)_{n_1 n_2}}{(\omega_{f_2} + E_{1s} - E_{n_1}) (\omega_{f_2} + \omega_{f_1} + E_{1s} - E_{n_2})} \times \frac{\left(\gamma_{\mu_3} A_{\mu_3}(\vec{k}_{i_2} \vec{e}_{i_2}) \right)_{n_2 n_3} \left(\gamma_{\mu_4} A_{\mu_4}(\vec{k}_{i_1} \vec{e}_{i_1}) \right)_{n_3 1s}}{(\omega_{f_2} + \omega_{f_1} - \omega_{i_2} + E_{1s} - E_{n_3})} \quad (2.51)$$

Закон сохранения энергии для такого процесса теперь $\omega_{f_1} + \omega_{f_2} = \omega_{i_1} + \omega_{i_2}$ и условие резонанса определяются выражением

$$\omega_{i_1} + \omega_{i_2} = \omega_0 = E_{ns} - E_{1s}. \quad (2.52)$$

Из (2.52) следует приближённый закон сохранения энергии, аналогичный выражению (2.46)

$$|\omega_{f_1} + \omega_{f_2} - E_{ns} + E_{1s}| \leq \Gamma_{ns}, \quad (2.53)$$

который может быть заменён выражением аналогичным (2.47)

$$\omega_{f_1} + \omega_{f_2} = E_{ns} - E_{1s}, \quad (2.54)$$

где шириной Γ_{ns} можно пренебречь. Согласно выражению (2.52) и закону сохранения последний энергетический знаменатель в (2.51) может быть заменён на

$$\omega_{f_2} + \omega_{f_1} - \omega_{i_2} + E_{1s} - E_{n_3} = \omega_{i_1} + E_{1s} - E_{n_3} , \quad (2.55)$$

т.е. он не зависит от частот излучённых фотонов.

Оставим в резонансном приближении только один член $n_2 = ns$ в сумме по n_2 . Для $n > 2$ всегда есть главный однофотонный вклад в ширину Γ_{ns} , например вероятность $W_{3s-2p}^{1\gamma}$ в случае $n = 3$. Предполагая существование такого вклада продолжим вставлять однопетлевые собственно-энергетические поправки в центральный пропагатор на Рис. 4а (процедура Лоу).

После суммирования всей последовательности амплитуда излучения двухфотонного процесса $ns \rightarrow 1s + 2\gamma$ выглядит следующим образом

$$U_{ns-1s}^{em} = e^2 \sum_{n_1} \frac{\left(\gamma_{\mu_1} A_{\mu_1}^{*(\vec{k}_{f_2} \vec{e}_{f_2})} \right)_{nsn_1} \left(\gamma_{\mu_2} A_{\mu_2}^{*(\vec{k}_{f_1} \vec{e}_{f_1})} \right)_{n_1 n_2}}{(\omega_{f_2} + E_{1s} - E_{n_1}) (\omega_{f_2} + \omega_{f_1} + E_{1s} - E_{ns} + \frac{i}{2} \Gamma_{ns})} . \quad (2.56)$$

Ширина Γ_{ns} определяется по разному для разных ns состояний. Например, $\Gamma_{3s} = W_{3s-2p}^{1\gamma}$ так как нет никаких других однофотонных распадов $3s$ уровня (в дипольном приближении). Дальнейшее рассмотрение вероятностей двухфотонных переходов должно выполняться отдельно для разных n . Перейдём непосредственно к $3s \rightarrow 1s + 2\gamma$ переходу. Фейнмановский график для резонансного двухфотонного рассеяния с возбуждением $3s$ состояния изображён на Рис. 5.

К выражению (2.56) необходимо добавить член соответствующий перестановке $\vec{k}_{f_1}, \vec{e}_{f_1}$ и $\vec{k}_{f_2}, \vec{e}_{f_2}$ фотонов местами.

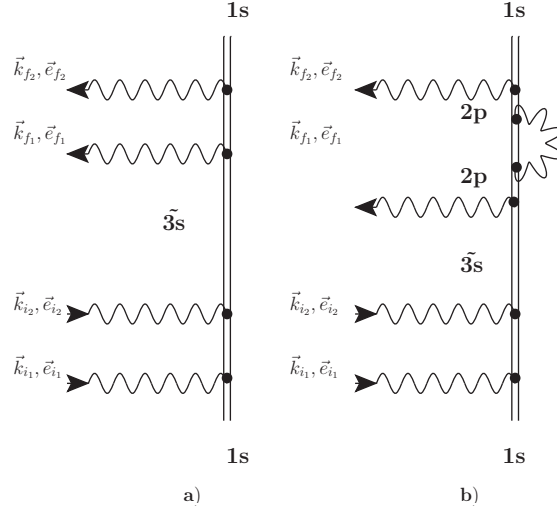
Для $3s-1s$ двухфотонного перехода возможно только одно каскадное колено: $3s-2p-1s$. Таким образом, условия резонанса определяются как

$$\omega^{res.1} = E_{3s} - E_{2p} , \quad (2.57)$$

$$\omega^{res.2} = E_{2p} - E_{1s} .$$

Чтобы рассмотреть вклад каскадов в $3s \rightarrow 1s$ переход необходимо положить $n_1 = 2p$ в выражении (2.56). Применяя процедуру Лоу к верхнему электронному пропагатору, как

Рис. 5: Фейнмановский график, описывающий двухфотонное резонансное рассеяние на основном состоянии атома водорода, с возбуждением $3s$ состояния (резонансное условие $\omega_{i_1} + \omega_{i_2} = E_{3s} - E_{1s}$). Частоты резонансов $\omega^{res.1} = E_{3s} - E_{2p}$, $\omega^{res.2} = E_{2p} - E_{1s}$. На Рис. 5 (a) изображён процесс резонансного рассеяния с возбуждением $3s$ состояния с последующим распадом $3s - 2p - 1s$. На Рис. 5 (b) выполнена вставка собственной энергии электрона в верхний электронный пропагатор. $\tilde{3s}$ означает, что процедура Лоу уже выполнена для данной линии. Остальные обозначения те же, что и на Рис. 3 и 4.



показано на Рис. 5, приходим к

$$U_{3s-2p-1s}^{em, cascade} = e^2 \left\{ \frac{\left(\gamma_{\mu_1} A_{\mu_1}^*(\vec{k}_{f_2} \vec{e}_{f_2}) \right)_{1s2p} \left(\gamma_{\mu_2} A_{\mu_2}^*(\vec{k}_{f_1} \vec{e}_{f_1}) \right)_{2p3s}}{\omega_{f_2} + E_{1s} - E_{2p} + \frac{i}{2}\Gamma_{2p}} + \frac{\left(\gamma_{\mu_1} A_{\mu_1}^*(\vec{k}_{f_1} \vec{e}_{f_1}) \right)_{1s2p} \left(\gamma_{\mu_2} A_{\mu_2}^*(\vec{k}_{f_2} \vec{e}_{f_2}) \right)_{2p3s}}{\omega_{f_1} + E_{1s} - E_{2p} + \frac{i}{2}\Gamma_{2p}} \right\} \times \frac{1}{\omega_{f_2} + \omega_{f_1} + E_{1s} - E_{3s} + \frac{i}{2}\Gamma_{3s}}. \quad (2.58)$$

Первый член в фигурных скобках описывает резонанс на частоте $\omega^{res.1}$, второй член относится к резонансу на частоте $\omega^{res.2}$.

Возведём квадрат модуля амплитуды $U_{3s-2p-1s}^{em, cascade}$, проинтегрируем по направлениям излученных фотонов и просуммируем по поляризациям.

Рассмотрим квадрат модуля первого члена в фигурных скобках и вынесем за скобки в выражении (2.58). Этот член представлен фейнмановской диаграммой на Рис. 5a и соответствует вкладу первого резонанса в выражении (2.57). В этом случае нас интересует вывод контура Лоренца для верхнего колена каскада $3s - 2p - 1s$. Поэтому сперва проинтегрируем по частоте второго испущенного фотона ω_{f_2} . Вообще говоря, должно быть

выполнено интегрирование по всем частотам принимая во внимание выражение (2.54)

$$\int_0^{\omega_0} d\omega_{f_1} \int_0^{\omega_{f_1}} d\omega_{f_2} = \frac{1}{2} \int_0^{\omega_0} d\omega_{f_1} \int_0^{\omega_0} d\omega_{f_2}, \quad (2.59)$$

где $\omega_0 = E_{3s} - E_{1s}$. Выражение (2.59) имеет место в силу симметрии (2.58) относительно перестановки $\omega_{f_1} \leftrightarrow \omega_{f_2}$.

Интегрирование по частоте ω_{f_2} в выражении (2.58) выполняется в комплексной плоскости. Так как только полюсные члены дают вклад в интеграл, можно расширить интервал интегрирования до $(-\infty, +\infty)$. Применяя теорему Коши, после некоторых алгебраических преобразований приходим к выражению для каскадного вклада от первого резонанса в дифференциальную относительную вероятность

$$db_{3s-2p-1s}^{2\gamma(\text{resonance } 1)}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{\Gamma_{3s} + \Gamma_{2p}}{\Gamma_{3s}\Gamma_{2p}} \frac{W_{3s-2p}^{1\gamma}(\omega^{\text{res.1}}) W_{2p-1s}^{1\gamma}(\omega^{\text{res.2}}) d\omega}{(\omega - \omega^{\text{res.1}})^2 + \frac{1}{4}(\Gamma_{3s} + \Gamma_{2p})^2} \quad (2.60)$$

(здесь для ясности обозначение для частоты ω_{f_1} заменено на ω).

Дифференциальная абсолютная вероятность $db^{2\gamma}$ связана с дифференциальной вероятностью $dw_{ns-1s}^{2\gamma}(\omega)$ следующим образом

$$db_{ns-1s}^{2\gamma}(\omega) = \frac{dw_{ns-1s}^{2\gamma}}{\Gamma_{ns}}. \quad (2.61)$$

Это определение относится ко всем вкладам выражения Eq. (2.33) в двухфотонную вероятность. Таким образом используя выражения (2.59), (2.61) приходим к ранее представленному выражению (2.35). Интегрирование в (2.61) по оставшейся частоте приводит к полной относительной вероятности

$$b_{ns-1s}^{2\gamma} = \frac{W_{ns-1s}^{2\gamma}}{\Gamma_{ns}}. \quad (2.62)$$

Важно отметить, что последнее интегрирование согласно выражению (2.60) должно быть проведено в интервале $(0, \omega_0)$ так как полюсное приближение уже не может быть использовано. Аналогичным образом приходим к выражению (2.36).

Для рассмотрения "чистого" двухфотонного вклада в вероятность перехода $3s \rightarrow 1s + 2\gamma$ вернёмся к выражению (2.56) с исключённым состоянием $2p$ из суммы по n_1 . Следует помнить, что как было показано ранее, однозначное выделение "чистого" двухфотонного излучения в случае переходов с каскадами невозможно. Извлечение слагаемого $2p$ из суммы

по n_1 в (2.56) соответствует "полюсному приближению" в котором интегрирование по частоте продлеваются на интервал $(-\infty, \infty)$. В предыдущем параграфе рассматривался более общий подход, когда каскадные слагаемые регуляризовывались только в определённых "окнах". В этом случае $2p$ должно быть исключено из суммы по n_1 только в конкретном "окне". "Полюсное приближение" соответствует ширине такого окна $[\omega] = \infty$. Так как энергетические знаменатели теперь несингулярные мы можем применить закон сохранения энергии, чтобы заменить частоту ω_{f_1} во втором знаменателе на $\omega_{f_1} = \omega_0 - \omega_{f_2}$. Возводя в квадрат по модулю выражение (2.56) с исключённым состоянием $n_1 = 2p$, интегрируя по направлениям вылета излучённых фотонов, суммируя по поляризациям и интегрируя по частоте ω_{f_1} получаем вклад "чистого" двухфотонного излучения в дифференциальную вероятность $3s \rightarrow 1s + 2\gamma$. Аналогичным образом может быть получен вклад интерференции между каскадным и "чистым" излучением в амплитуде (2.56).

Повторяя выкладки для двухфотонного $3s - 1s$ перехода на случай двухфотонного $4s - 1s$ перехода получаем вклады двух каскадов $4s - 2p - 1s$ and $4s - 3p - 1s$: 1) вклад от верхнего колена $4s - 2p$ от каскада $4s - 2p - 1s$, 2) вклад от нижнего колена $4s - 2p$ от каскада $4s - 2p - 1s$, 3) вклад от верхнего колена $4s - 3p$ от каскада $4s - 3p - 1s$, 2) вклад от нижнего колена $4s - 3p$ от каскада $4s - 3p - 1s$, где резонансные частоты $\omega^{res.1} = E_{4s} - E_{2p}$, $\omega^{res.2} = E_{2p} - E_{1s}$ для каскада $4s - 2p - 1s$ и $\omega^{res.3} = E_{4s} - E_{3p}$, $\omega^{res.4} = E_{3p} - E_{1s}$ для каскада $4s - 3p - 1s$. Это приводит к

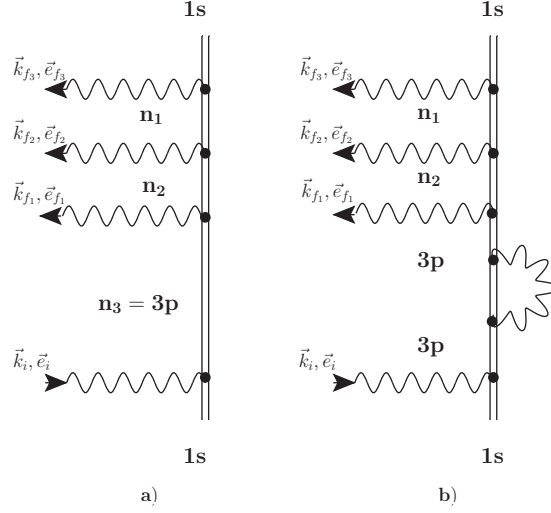
$$W_{4s-1s}^{2\gamma(cascade)} = \frac{1}{2} \int_0^{\omega_0} \sum_{i=1}^4 dW^{2\gamma(resonance\ i)} = W_{4s-2p}^{1\gamma} + \frac{W_{3p-1s}^{1\gamma}}{\Gamma_{3p}} W_{4s-3p}^{1\gamma} = W_{4s-2p}^{1\gamma} + b_{3p-1s}^{1\gamma} W_{4s-3p}^{1\gamma}, \quad (2.63)$$

где $\omega_0 = E_{4s} - E_{1s}$, $b_{3p-1s}^{1\gamma}$ абсолютная вероятность для перехода $3p - 1s$. Принято во внимание что $\Gamma_{3p} = W_{3p-1s}^{1\gamma} + W_{3p-2s}^{1\gamma}$ и $b_{3p-1s}^{1\gamma} = \frac{W_{3p-1s}^{1\gamma}}{W_{3p-1s}^{1\gamma} + W_{3p-2s}^{1\gamma}}$. Здесь $W_{4s-1s}^{2\gamma(cascade)} \neq \Gamma_{4s}$, где $\Gamma_{4s} = W_{4s-2p}^{1\gamma} + W_{4s-3p}^{1\gamma}$, в отличие от выражения (2.38) в случае $3s - 1s$ перехода.

Перейдём к рассмотрению трёхфотонных переходов при наличии каскадов, на примере $3p \rightarrow 1s + 3\gamma$ перехода. Основные каналы распада $3p$ уровня: $3p \rightarrow 1s + \gamma$ и $3p \rightarrow 2s + \gamma$. Поэтому в качестве процесса резонансного рассеяния в этом случае выберем процесс однофотонного поглощения с последующим трёхфотонным излучением, изображённым на Рис. 6. Для перехода $3p \rightarrow 1s + 3\gamma$ есть два каскада, содержащие двухфотонные колена: $3p \rightarrow 2p + 2\gamma \rightarrow 1s + 3\gamma$ and $3p \rightarrow 2s + \gamma \rightarrow 1s + 3\gamma$.

В случае трёхфотонного перехода будем учитывать только вклады каскадных членов. Эти вклады содержат по одному "чистому" двухфотонному колену ($3p - 2p$ или $2s - 1s$) того же порядка что и "чистый" двухфотонный вклад в $3s - 1s$ переходе.

Рис. 6: Фейнмановский график, описывающий резонансный процесс с однофотонным возбуждением и трёхфотонным излучением для основного состояния атома водорода. На Рис. 6 (a) изображён процесс резонансного рассеяния. На Рис. 6 (b) выполнена вставка собственной энергии электрона в центральный электронный пропагатор.



"Чистый" трёхфотонный переход и соответствующие двухфотонные члены значительно меньше чем каскадные вклады и следовательно ими можно пренебречь в "двухфотонном" приближении [26]. В этом смысле ситуация отличается от случая двухфотонного $3s - 1s$ перехода, когда мы интересовались "чистым" двухфотонным и интерференционным излучением. Вывод аналогичный двухфотонному случаю приводит к следующему выражению для трёхфотонной амплитуды излучения $3p - 1s$ в резонансном приближении:

$$U_{3p-1s}^{em.3\gamma} = e^3 \sum_{n_1 n_2} \frac{\left(\gamma_{\mu_1} A_{\mu_1}^*(\vec{k}_{f_3} \vec{e}_{f_3}) \right)_{1s n_1} \left(\gamma_{\mu_2} A_{\mu_2}^*(\vec{k}_{f_2} \vec{e}_{f_2}) \right)_{n_1 n_2} \left(\gamma_{\mu_3} A_{\mu_3}^*(\vec{k}_{f_1} \vec{e}_{f_1}) \right)_{n_2 3p}}{(E_{1s} - E_{n_1} + \omega_{f_3}) (E_{1s} - E_{n_2} + \omega_{f_3} + \omega_{f_2})} \times \frac{1}{E_{1s} - E_{3p} + \omega_{f_3} + \omega_{f_2} + \omega_{f_1} + \frac{i}{2}\Gamma_{3p}}. \quad (2.64)$$

В выражении (2.64) все собственноэнергетические вставки в электронный пропагатор уже просуммированы как показано на Рис. 6. Точный закон сохранения теперь выглядит как $\omega_i = \omega_{f_1} + \omega_{f_2} + \omega_{f_3}$. Условие резонанса и приближённый закон сохранения в случае трёхфотонного распада можно записать следующим образом.

$$|\omega_i - (E_{3p} - E_{1s})| = |\omega_{f_1} + \omega_{f_2} + \omega_{f_3} - (E_{3p} - E_{1s})| \leq \Gamma_{3p}. \quad (2.65)$$

Фиксируя вклад каскада $3p \rightarrow 2s + \gamma \rightarrow 1s + 3\gamma$ полагаем $n_2 = 2s$ в выражении (2.64). Это даёт

$$U_{3p-1s}^{em,3\gamma} = e^3 \frac{1}{E_{1s} - E_{3p} + \omega_{f_3} + \omega_{f_2} + \omega_{f_1} + \frac{i}{2}\Gamma_{3p} (E_{1s} - E_{2s} + \omega_{f_3} + \omega_{f_2} + \frac{i}{2}\Gamma_{2s})} \frac{(\gamma_{\mu_1} A_{\mu_1}^{*\vec{k}_{f_1} \vec{e}_{f_1}})_{3p2s}}{\sum_{n_1} \frac{(\gamma_{\mu_2} A_{\mu_2}^{*\vec{k}_{f_2} \vec{e}_{f_2}})_{2sn_1} (\gamma_{\mu_3} A_{\mu_3}^{*\vec{k}_{f_3} \vec{e}_{f_3}})_{n_1 1s}}{E_{1s} - E_{n_1} + \omega_{f_3}}} + (\text{перестановка}). \quad (2.66)$$

В выражении (2.66) необходимо учесть вклады фейнмановских диаграмм со всеми возможными перестановками фотонных линий.

Далее необходимо возвести в квадрат по модулю правую часть выражения (2.66), проинтегрировать по направлениям вылета испущенных фотонов, просуммировать по поляризациям и затем проинтегрировать по частотам фотонов $\omega_{f_1}, \omega_{f_2}, \omega_{f_3}$ принимая во внимание условие (2.65). Важно отметить, что интегрируя вклад каскада $3p - 2s - 1s$ необходимо учесть, что частота ω_{f_1} зафиксирована условием резонанса

$$\omega_{f_1} - (E_{3p} - E_{2s}) \leq \Gamma_{3p} + \Gamma_{2s}. \quad (2.67)$$

Вставляя выражение (2.67) в приближённый закон сохранения энергии (2.65) приходим к равенству

$$\omega_{f_2} + \omega_{f_3} = E_{2s} - E_{1s}. \quad (2.68)$$

Интегрирование $\omega_{f_2}, \omega_{f_3}$ должно быть выполнено следующим образом

$$\int_0^{E_{2s}-E_{1s}} d\omega_{f_2} \int_0^{\omega_{f_2}} d\omega_{f_3} = \frac{1}{2} \int_0^{E_{2s}-E_{1s}} d\omega_{f_2} \int_0^{E_{2s}-E_{1s}} d\omega_{f_3}. \quad (2.69)$$

Выражение (2.69) получается после симметризации (2.67) относительно перестановки фотонов $\omega_{f_2}, \omega_{f_3}$. Интегрирование по частотам (по ω_{f_1} и ω_{f_2} в (2.66)) может быть расширено на интервал $[-\infty, +\infty]$ так как используются полюсное приближение. Третье интегрирование по частоте ω_{f_3} в выражении (2.66) согласно (2.69) выполняется в конечном интервале $[0, E_{2s} - E_{1s}]$. Таким образом интегрирование по всем частотам даёт

$$b_{3p-1s}^{3\gamma}(3p - 2s - 1s) = \frac{W_{3p-2s}^{1\gamma} W_{2s-1s}^{2\gamma}}{\Gamma_{3p} \Gamma_{2s}}, \quad (2.70)$$

где $\omega_0 = E_{2s} - E_{1s}$.

Физический смысл безразмерной величины $b_{3p-1s}^{3\gamma}(3p-2s-1s)$ требует отдельного обсуждения. Эта величина определяет трёхфотонный распад $3p-1s$ по каналу $3p \rightarrow 2s+\gamma \rightarrow 1s+3\gamma$. Эта вероятность мала по сравнению с основным каналом распада для $3p$ состояния, т.е. вероятностью однофотонного перехода $W_{3p-1s}^{1\gamma}$. Величины $b_{3p-1s}^{3\gamma}(3p-2s-1s)$ есть отношение вероятности 3-фотонного перехода $W_{3p-1s}^{3\gamma}(3p-2s-1s)$ к вероятности двухфотонного распада $W_{2s-1s}^{2\gamma} = \Gamma_{2s}$. Таким образом из (2.70) следует

$$W_{3p-1s}^{3\gamma}(3p-2s-1s) = \frac{W_{3p-2s}^{1\gamma} W_{2s-1s}^{2\gamma}}{\Gamma_{3p}}. \quad (2.71)$$

Аналогичным образом можно представить вклад 3-трёхфотонного каскада $3p-2p+2\gamma \rightarrow 1s+3\gamma$

$$b^{3\gamma}(3p-2p-1s) = \frac{W_{2p-1s}^{1\gamma} W_{3p-2p}^{2\gamma}}{\Gamma_{2p} \Gamma_{3p}}. \quad (2.72)$$

В отличие от $b^{3\gamma}(3p-2s-1s)$ величина определяемая выражением (2.72) должна рассматриваться как отношение вероятности перехода через канал $3p-2p-1s$ к полной ширине уровня $3p$ т.е. Γ_{3p} . Таким образом

$$W_{3p-1s}^{3\gamma}(3p-2p-1s) = \frac{W_{2p-1s}^{1\gamma} W_{3p-2p}^{2\gamma}}{\Gamma_{2p}}. \quad (2.73)$$

Окончательное выражение для полной вероятности перехода $3p-1s$ (включая однофотонный и трёхфотонный каналы распада) можно представить как

$$W_{3p-1s}^{tot} = W_{3p-1s}^{1\gamma} + W_{3p-1s}^{3\gamma} = W_{3p,1s}^{1\gamma} + \frac{W_{2p,1s}^{1\gamma} W_{3p,2p}^{2\gamma}}{\Gamma_{2p}} + \frac{W_{3p,2s}^{1\gamma} W_{2s,1s}^{2\gamma}}{\Gamma_{3p}}. \quad (2.74)$$

2.4 Квантовомеханический подход для регуляризации амплитуд многофотонных процессов при наличии каскадов

Квантовомеханический подход к регуляризации амплитуд многофотонных процессов при наличии каскадов основывается на решении нестационарного уравнения Шрёдингера [66]

$$i \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = \left(\hat{H}_0 + \hat{V}(t) \right) \psi(t), \quad (2.75)$$

где \hat{H}_0 независимый от времени свободный атомный Гамильтониан, $\hat{V}(t)$ возмущение описывающее взаимодействие атома с фотонным полем. Согласно теории возмущений нас интересует решение уравнения (2.75) в виде разложения

$$\psi(t) = \sum_{\nu} a_{\nu}(t) e^{-i\varepsilon_{\nu}t} \psi_{\nu}^{(0)}, \quad (2.76)$$

где $\psi_{\nu}^{(0)}$ собственные функции \hat{H}_0 :

$$\hat{H}_0 \psi_{\nu}^{(0)} = E_{\nu} \psi_{\nu}^{(0)} \quad (2.77)$$

и ε_{ν} энергия системы атом + фотонное поле. Эти энергии могут быть представлены как

$$\varepsilon_{\nu} = E_{\nu} - \frac{i}{2} \Gamma_{\nu} + \sum \omega, \quad (2.78)$$

где E_{ν} собственные значения Гамильтониана \hat{H}_0 , Γ_{ν} ширины соответствующих уровней и $\sum \omega$ сумма энергий фотонов, излучённых атомом при переходе в состояние ν . В (2.76) вводится дополнительное обозначение, указывающее на то к какому состоянию применяется теория возмущений $\psi_{\mu}^{(0)}$:

$$\psi_{\mu}(t) = \sum_{\nu} a_{\mu\nu}(t) e^{-i\varepsilon_{\nu}t} \psi_{\nu}^{(0)}, \quad (2.79)$$

Для коэффициентов $a_{\mu\nu}(t)$ в выражении (2.75) получается система уравнений

$$i \frac{\partial a_{\mu\nu}(t)}{\partial t} = \sum_{\nu'} \hat{V}_{\nu\nu'} a_{\mu\nu'}(t) e^{i(\varepsilon_{\nu} - \varepsilon_{\nu'})t}, \quad (2.80)$$

где $\hat{V}_{\nu\nu'}$ матричный элемент оператора \hat{V} . Этот матричный элемент не зависит от времени, зависимость от времени включена в экспоненту $e^{-i\varepsilon_{\nu}t}$. Нас интересуют величины

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |a_{\mu\nu}(t)|^2 = W_{\mu\nu}, \quad (2.81)$$

которые могут пониматься как вероятности переходов из состояния μ в состояние ν системы атом + поле. Для вывода вероятности двухфотонного излучения необходимо рассмотреть второй порядок теории возмущений. В нулевом порядке для начального состояния $\mu = i$ мы имеем $a_{i\nu}^{(0)} = \delta_{i\nu}$, где $\delta_{i\nu}$ символ Кронекера. Амплитуда нулевого порядка должна быть подставлена в правую часть выражения (2.80). Таким образом, получаем уравнение

для поправки первого порядка $a_{i\nu}^{(1)}$

$$i \frac{\partial a_{i\nu}^{(1)}}{\partial t} = \widehat{V}_{\nu i} e^{i(\varepsilon_\nu - \varepsilon_i)t}. \quad (2.82)$$

Интегрирование (2.82) даёт

$$a_{i\nu}^{(1)} = \frac{\widehat{V}_{\nu i} (1 - e^{i(\varepsilon_\nu - \varepsilon_i)t})}{\varepsilon_\nu - \varepsilon_i}. \quad (2.83)$$

Принимая во внимание что

$$\begin{aligned} \varepsilon_i &= E_i - \frac{i}{2}\Gamma_i, \\ \varepsilon_\nu &= E_\nu - \frac{i}{2}\Gamma_\nu + \omega, \end{aligned} \quad (2.84)$$

где ν промежуточное состояние в амплитуде двухфотонного перехода и ω частота испущенного фотона в переходе $i \rightarrow \nu$. На следующем шаге необходимо подставить выражение (2.83) в правую часть выражения (2.80) и положить $\nu = f$ (конечное состояние). Это приводит к следующему уравнению

$$i \frac{\partial a_{if}^{(2)}(t)}{\partial t} = \sum_{\nu} \frac{\widehat{V}_{f\nu} \widehat{V}_{\nu i}}{\varepsilon_i - \varepsilon_\nu} [1 - e^{i(\varepsilon_\nu - \varepsilon_i)t}] e^{i(\varepsilon_f - \varepsilon_\nu)t}. \quad (2.85)$$

Здесь $\varepsilon_f = E_f - \frac{i}{2}\Gamma_f + \omega + \omega'$ с условием что $\omega_1 + \omega_2 = E_i - E_f$; если f основное состояние то $\Gamma_f = 0$.

Интегрируя (2.85) по времени находим поправку второго порядка

$$a_{if}^{(2)} = \sum_{\nu'} \frac{\widehat{V}_{f\nu'} \widehat{V}_{\nu i}}{\varepsilon_{\nu'} - \varepsilon_i} \left(\frac{1 - e^{i(\varepsilon_f - \varepsilon_{\nu'})t}}{\varepsilon_f - \varepsilon_{\nu'}} - \frac{1 - e^{i(\varepsilon_f - \varepsilon_i)t}}{\varepsilon_f - \varepsilon_i} \right), \quad (2.86)$$

В выражении (2.86) необходимо перейти к пределу $t \rightarrow \infty$ согласно определению (2.81). Принимая во внимание перестановочную симметрию окончательно приходим к выражению для вероятности двухфотонного излучения

$$dW_{if}^{(2)} = \lim_{t \rightarrow \infty} |U_{if}^{(2)}|^2 d\omega d\omega', \quad (2.87)$$

где $U_{if}^{(2)} = a_{if}^{(2)} + a_{if}^{(2)}(\omega \leftrightarrow \omega')$. После простого алгебраического преобразования приходим к виду

$$U_{if}^{(2)} = \left\{ \sum_{\nu} \frac{\widehat{V}_{f\nu'} \widehat{V}_{\nu i}}{(E_f - E_{\nu} + \omega + \frac{i}{2}(\Gamma_{\nu} - \Gamma_f))} + \sum_{\nu} \frac{\widehat{V}_{f\nu} \widehat{V}_{\nu i}}{(E_f - E_{\nu} + \omega' + \frac{i}{2}(\Gamma_{\nu} - \Gamma_f))} \right\} \times \frac{1}{E_f - E_i + \omega + \omega' + \frac{i}{2}(\Gamma_i - \Gamma_f)}. \quad (2.88)$$

Видно, что выражение (2.88) совпадает с выражением (2.58) полученным в рамках КЭД, если положить $i = 3s$, $f = 1s$, $\nu = 2p$, $\omega = \omega_{f_1}$ и $\omega' = \omega_{f_2}$. Дальнейшие вычисления приводят к тем же результатам, что и КЭД подход.

Аналогичные рассуждения могут быть использованы и в случае трёхфотонных переходов. Подставляя (2.86) в правую часть выражения (2.80) приходим к уравнению на поправку третьего порядка теории возмущений $a_{i\nu}^{(3)}$

$$i \frac{\partial a_{if}^{(3)}}{\partial t} = \sum_{n\nu} \frac{V_{fn} V_{n\nu} V_{\nu i}}{\varepsilon_{\nu} - \varepsilon_i} \left(\frac{1 - e^{i(\varepsilon_n - \varepsilon_{\nu})t}}{\varepsilon_n - \varepsilon_{\nu}} - \frac{1 - e^{i(\varepsilon_n - \varepsilon_i)t}}{\varepsilon_n - \varepsilon_i} \right) e^{i(\varepsilon_f - \varepsilon_n)t}. \quad (2.89)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \varepsilon_n &= E_n - \frac{i}{2}\Gamma_n + \omega + \omega', \\ \varepsilon_f &= E_f - \frac{i}{2}\Gamma_f + \omega + \omega' + \omega''. \end{aligned} \quad (2.90)$$

Переходя к пределу $t \rightarrow \infty$ из (2.89) находим

$$a_{if}^{(3)} = \sum_{n\nu} \frac{V_{fn} V_{n\nu} V_{\nu i}}{(\varepsilon_f - \varepsilon_i)(\varepsilon_f - \varepsilon_n)(\varepsilon_f - \varepsilon_{\nu})}. \quad (2.91)$$

Подставляя выражения (2.84) и (2.90) в (2.91) приходим к

$$a_{if}^{(3)} = \sum_{n\nu} \frac{V_{fn} V_{n\nu} V_{\nu i}}{(E_f - E_n + \omega'' + \frac{i}{2}(\Gamma_n - \Gamma_f))(E_f - E_{\nu} + \omega' + \omega'' + \frac{i}{2}(\Gamma_{\nu} - \Gamma_f))} \times \frac{1}{(E_f - E_i + \omega + \omega' + \omega'' + \frac{i}{2}(\Gamma_i - \Gamma_f))}. \quad (2.92)$$

Выражение (2.92) также совпадает с выражением (2.64), полученным в рамках КЭД, если положить $i = 3p$, $f = 1s$. Дальнейшие вычисления аналогичны проделанным ранее в параграфе §2.3

2.5 Сравнение различных способов регуляризации амплитуд многофотонных процессов с каскадами

Рассмотрим пример правильного выбора регуляризации каскадов на примере вычисления вероятности поглощения многофотонного излучения представленного функцией распределения по частоте. Вероятность поглощения излучения одного атома другим атомом рассматривалась в работах [25], [67], [18]. Подробное описание подхода будет рассмотрено в третьей главе диссертации. В нашем случае идёт речь о поглощении двухфотонного излучения одного атома однофотонной линией поглощения другого.

Начнём с вероятности поглощения $X_{2s-1s}^{2\gamma}$ двухфотонного излучения $2s-1s$ и сравним его с поглощением других двухфотонных переходов. Величина $X^{2\gamma}$ определяется следующим образом [18]

$$X_{2s-1s}^{2\gamma} = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} L_{2p-1s}^{1\gamma}(\omega) dW_{2s-1s}^{2\gamma}(\omega), \quad (2.93)$$

где $dW_{2s-1s}^{2\gamma}(\omega)$ распределение по частоте (дифференциальная плотность вероятности) для $2s-1s$ двухфотонного переход, $L_{2p-1s}^{2\gamma}$ Лоренцевский контур для линии поглощения $1s-2p$, который совпадает с Лоренцевским контуром для линии излучения $2p-1s$. Лоренцевский контур даётся выражением (2.49). Безразмерное распределение по частоте $\frac{dW_{2s-1s}^{2\gamma}}{d\omega}$ нормировано на двухфотонную вероятность

$$\frac{1}{2} \int_0^{\omega_{2s-1s}} dW_{2s-1s}^{2\gamma}(\omega) = W_{2s-1s}^{2\gamma} = 8.229 \text{ s}^{-1}. \quad (2.94)$$

При интегрировании в (2.94) вне интервала $[0, \omega_0]$, где $\omega_0 = E_{2s} - E_{1s}$, функция распределения $dW_{2s-1s}^{2\gamma}(\omega)$ полагается равной нулю. Таким образом безразмерная величина $X_{2s-1s}^{2\gamma}$ может рассматриваться как поглощаемость, т.е. абсолютная вероятность поглощения двухфотонного излучения $2s-1s$ однофотонной линией поглощения. Численные расчёты приводят к результату

$$X_{2s-1s}^{2\gamma} = 6.50 \times 10^{-22}, \quad (2.95)$$

который показывает, что двухфотонное излучение $2s-1s$ испущенное одним атомом водорода не может поглотиться через Лайман-альфа переход другого атома водорода находящимся в основном состоянии. Важно отметить что переход $2s-1s$ не содержит каскадов,

т.е. распределение по частоте $dW_{2s-1s}^{2\gamma}$ не имеет сингулярностей, которые должны быть регуляризованы. Величина

$$Y_{2s-1s}^{2\gamma} = 1 - X_{2s-1s}^{2\gamma} \quad (2.96)$$

может быть интерпретирована как "непоглощаемость" и для $2s-1s$ двухфотонного перехода равна

$$Y_{2s-1s}^{2\gamma} = 1. \quad (2.97)$$

В таблице 4 представлены результаты вычислений вероятностей поглощения для двухфотонных $3s-1s$, $3d-1s$, $4d-1s$ и трёхфотонных $3p \rightarrow 1s$, $4p \rightarrow 1s$ переходов. Все эти переходы требуют регуляризации каскадных вкладов. Излучение двух- и трёхфотонных переходов может быть поглощено несколькими однофотонными линиями поглощения: $1s-2p$, $1s-3p$, $2p-3s$, $2p-3d$. Ограничимся рассмотрением только $E1$ переходов в атоме водорода. Таким образом обобщение выражения (2.93) для случая $3s(3d)-1s$ двухфотонного перехода имеет вид

$$X_{3s(3d)-1s}^{2\gamma} = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} \left[L_{2p-1s}^{1\gamma}(\omega) + L_{3p-1s}^{1\gamma}(\omega) + L_{3s-2p}^{1\gamma}(\omega) + L_{3d-2p}^{1\gamma}(\omega) \right] dW_{3s(3d)-1s}^{2\gamma}(\omega), \quad (2.98)$$

Лоренцевский контур для переходов между двумя возбуждёнными состояниями nl и $n'l'$ даётся выражением [24]

$$L_{nl \rightarrow n'l'}^{1\gamma}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{W_{nl \rightarrow n'l'}^{1\gamma}}{(\omega + E_{n'l'} - E_{nl})^2 + \frac{1}{4}(\Gamma_{nl} + \Gamma_{n'l'})^2}, \quad (2.99)$$

в которое входит знаменатель с суммой двух ширин Γ_{nl} и $\Gamma_{n'l'}$. Аналогичным образом рассчитаны вероятности поглощения для двухфотонного $4d-1s$ и трёхфотонного $3p-1s$ переходов.

В Таблице 1 представлены два типа величин $X_{nl-1s}^{m\gamma}$ ($m = 2, 3$): для первого типа величина $X_{nl-1s}^{m\gamma(1)}$ вычисляется с распределением по частоте $dW_{nl-1s}^{m\gamma}(\omega)$ в котором регуляризация каскадов выполнена с двумя ширинами в знаменателе (смотри выражение (2.35) для $3s-1s$ перехода), для второго типа регуляризация выполнена только с одной шириной (смотри выражение (2.41) для $3s-1s$ перехода). В Таблице 1 значения вероятностей $W_{nl-1s}^{2\gamma}$, $W_{nl-1s}^{3\gamma}$ также выделены, чтобы подчеркнуть разницу между чистыми двух- трёхфотонными пере-

ходами $2s \rightarrow 1s + 2\gamma$, $3p \rightarrow 1s + 3\gamma$ и переходами с каскадами $3s \rightarrow 1s + 2\gamma$, $nd \rightarrow 1s + 2\gamma$ ($n = 3, 4$), $4p \rightarrow 1s + 3\gamma$. Эта разница соотносится с большим различием значений для вероятности поглощения двух различных типов переходов и подчёркивает, что наличие каскадов полностью изменяет их характеристики.

Различие между величинами $X_{nl-1s}^{m\gamma(1)}$ и $X_{3s-1s}^{m\gamma(2)}$ демонстрирует важность применяемой схемы регуляризации. В случае $3d - 1s$, $4d - 1s$ перехода отклонение больше 10% от полной величины $X^{2\gamma}$, для $4p \rightarrow 1s + 3\gamma$ перехода достигает 9.5%. Эти результаты показывают важность правильной регуляризации каскадных вкладов для описания как двух- так и трёхфотонных процессов.

Таблица 4: Вероятности поглощения двух- и трёхфотонных переходов $nl \rightarrow 1s + k\gamma$ ($k = 2, 3$) для различных схем регуляризации. Индекс (1) соответствует регуляризации с двумя ширинами, индекс (2) соответствует регуляризации с одной шириной.

nl	$X_{nl-1s}^{2\gamma(1)}$	$X_{nl-1s}^{2\gamma(2)}$	$Y_{nl-1s}^{2\gamma(1)}$	$Y_{nl-1s}^{2\gamma(2)}$	$W_{nl-1s}^{2\gamma}, s^{-1}$
$2s$	6.393×10^{-22}	6.393×10^{-22}	1.00000	1.00000	8.22935
$3s$	0.00497	0.00502	0.99504	0.99498	0.06317×10^8
$3d$	0.04652	0.05217	0.95349	0.94783	0.64686×10^8
$4d$	0.02118	0.02385	0.97882	0.97615	0.26013×10^8
	$X_{nl-1s}^{3\gamma(1)}$	$X_{nl-1s}^{3\gamma(2)}$	$Y_{nl-1s}^{3\gamma(1)}$	$Y_{nl-1s}^{3\gamma(2)}$	$W_{nl-1s}^{3\gamma}, s^{-1}$
$3p$	2.547×10^{-22}	2.547×10^{-22}	1.00000	1.00000	1.01909
$4p$	0.00231	0.00253	0.99747	0.99770	0.003929×10^8

Глава 3. Модель перепоглощения многофотонного излучения

3.1 Перепоглощение однофотонного излучения

Модель перепоглощения многофотонного излучения, рассматриваемая в этой главе, представлена в нашей работе [18]. Квантовомеханическое феноменологическое описание лоренцевского контура известно начиная с работ [68], [69]. Квантовоэлектродинамический вывод лоренцевского контура для переходов между двумя возбуждёнными состояниями рассматривался в [23], [24]. Соответствующее выражение для перехода $a \rightarrow a_1$ выглядит следующим образом [24]:

$$dW_{aa_1(a_0)}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{\Gamma_{aa_1} \Gamma_{a_1 a_0} (\Gamma_a + \Gamma_{a_1})}{\Gamma_a \Gamma_{a_1}} \frac{d\omega}{(\omega - \bar{\omega}_{aa_1})^2 + \frac{1}{4}(\Gamma_a + \Gamma_{a_1})^2}. \quad (3.1)$$

В выражении (3.1) подразумевается, что возбуждённое состояние a_1 переходит в основное состояние a_0 с излучением одного фотона. Здесь Γ_a , Γ_{a_1} радиационные ширины уровней a , a_1 и Γ_{aa_1} , $\Gamma_{a_1a_0}$ парциальные ширины соответствующие переходам $a \rightarrow a_1$ и $a_1 \rightarrow a_0$ соответственно. Вероятности переходов связаны с парциальными ширинами соотношениями

$$W_{aa_1} = \Gamma_{aa_1}; \quad W_{a_1a_0} = \Gamma_{a_1a_0}. \quad (3.2)$$

Таким образом, контур линии для перехода $a \rightarrow a_1$ зависит от дальнейшего канал распада состояния a_1 . Фактически это зависимость от относительных вероятностей $b_{aa_1} = \Gamma_{aa_1}/\Gamma_a$ и $b_{a_1a_0} = \Gamma_{a_1a_0}/\Gamma_{a_1}$. В простейшем случае, когда оба состояния a и a_1 имеют только один канал распада $b_{aa_1} = b_{a_1a_0} = 1$ выражение (3.1) принимает вид

$$dW_{aa_1}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{(\Gamma_a + \Gamma_{a_1})d\omega}{(\omega - \tilde{\omega}_{aa_1})^2 + \frac{1}{4}(\Gamma_a + \Gamma_{a_1})^2}. \quad (3.3)$$

Здесь зависимость от состояния a_0 полностью исчезает. Как уже обсуждалось в предыдущей главе, нерезонансными поправками при выводе лоренцевского контура можно пренебречь. Таким образом крылья профиля можно продлить вплоть до бесконечности без значимой погрешности. Принимая это во внимание, условие нормировки выглядит следующим образом

$$dW(\omega) = L(\omega)d\omega, \quad (3.4)$$

$$\int_0^{\infty} L_{aa_1}(\omega)d\omega = 1, \quad (3.5)$$

в случае выражения (3.3) и

$$\int_0^{\infty} L_{aa_1(a_0)}(\omega)d\omega = b_{aa_1}b_{a_1a_0}, \quad (3.6)$$

в случае выражения (3.1).

Выражения (3.5), (3.6) представляют абсолютную интегральную вероятность для фотона излучённого в переходе $a \rightarrow a_1$. Если никаких других каналов распада кроме $a \rightarrow a_1$ нет, вероятность равняется единице. Если же, например, такие каналы распада существуют

для состояний a и a_1 , то полная вероятность определяется произведением относительных вероятностей $b_{aa_1}b_{a_1a_0}$.

Рассмотрим излучение, испущенное атомом в переходе $a \rightarrow a_1$, имеющее распределение по частоте описываемое выражением (3.3) и поглощённое другим атомом в переходе $a_1 \rightarrow a$.

Предположим, что фотон излучённый в переходе $a \rightarrow a_1$ и имеющий распределение по частоте определяемое выражением (3.3), поглощён другим атомом в переходе $a_1 \rightarrow a$. Контур линии для поглощения даётся выражением (3.3). Вероятность поглощения связана с парциальной шириной соотношением

$$W_{a_1a} = \frac{g_{a_1}}{g_a} \Gamma_{aa_1}, \quad (3.7)$$

где g_{a_1} , g_a вырожденность состояний a_1 , a соответственно. Если поглощённые атомом фотоны излучаются в переходе $a \rightarrow a_1$ другого атома, вероятность поглощения определяется как [18]

$$X_{aa_1}^{(2)} = \int_0^\infty I_{aa_1}(\omega) L_{aa_1}(\omega) d\omega, \quad (3.8)$$

где $I_{aa_1}(\omega) = (\Gamma_a + \Gamma_{a_1})L_{aa_1}(\omega)$ безразмерная функция распределения поглощаемого излучения, нормированная условием

$$\int_0^\infty I_{aa_1}(\omega) d\omega = \Gamma_a + \Gamma_{a_1}. \quad (3.9)$$

Распределение излученных фотонов по частоте КЭД теории S -матрицы впервые было рассмотрено в работах Лоу [25] и позднее применено [23], [67] для изучения многократного рассеяния фотонов на атоме. Аналогичным образом определим вероятность поглощения после n -кратного перерасеяния

$$X_{aa_1}^{(n)} = \int_0^\infty [I_{aa_1}(\omega)]^{n-1} L_{aa_1}(\omega) d\omega = (\Gamma_a + \Gamma_{a_1})^{n-1} \int_0^\infty [L_{aa_1}(\omega)]^n d\omega. \quad (3.10)$$

Для $n = 1$ выражение (3.10) сводится к (3.5). Интегрирование может быть расширено на интервал $-\infty \leq \omega \leq +\infty$ так как главный вклад дают полюса выражений (3.1) и (3.3) для

L_{aa_1} . Используя равенство

$$\left[\frac{1}{(\omega - \tilde{\omega}_{aa_1})^2 + \frac{1}{4}(\Gamma_a + \Gamma_{a_1})^2} \right]^n = \frac{1}{[\omega - \tilde{\omega}_{aa_1} - \frac{i}{2}(\Gamma_a + \Gamma_{a_1})]^n [\omega - \tilde{\omega}_{aa_1} + \frac{i}{2}(\Gamma_a + \Gamma_{a_1})]^n} \quad (3.11)$$

и применяя теорему Коши для интегрирования по ω в (3.10) находим

$$X_{aa_1}^{(n)} = [(\Gamma_a + \Gamma_{a_1})]^{n-1} \frac{2\pi i}{(n-1)!} \left[\left(\frac{1}{\omega - \tilde{\omega}_{aa_1} + \frac{i}{2}(\Gamma_a + \Gamma_{a_1})} \right)^n \right]_{\omega=\tilde{\omega}_{aa_1} + \frac{i}{2}(\Gamma_a + \Gamma_{a_1})}^{(n-1)} \times \left(\frac{\Gamma_a + \Gamma_{a_1}}{2\pi} \right)^n, \quad (3.12)$$

где $[\dots]^{(n-1)}$ означает $(n-1)$ -производную по переменной ω . Вычисление выражения (3.12) даёт

$$X_{aa_1}^{(n)} = \frac{(2n-2)!}{((n-1)!)^2} \frac{1}{(2\pi)^{n-1}}. \quad (3.13)$$

Нетрудно проверить, что для любых $n > 1$ величина $X_{aa_1}^{(n)} < 1$. Таким образом можно интерпретировать $X_{aa_1}^{(n)}$ как абсолютную вероятность поглощения излучения в процессе перерасеяния и переизлучения. Величина

$$Y_{aa_1}^{(n)} = 1 - X_{aa_1}^{(n)} = 1 - \frac{(2n-2)!}{((n-1)!)^2} \frac{1}{(2\pi)^{n-1}}. \quad (3.14)$$

определяет вероятность "отрыва" излучения [18]. В частности,

$$Y_{aa_1}^{(2)} = 1 - \frac{1}{\pi} = 0.682, \quad (3.15)$$

$$Y_{aa_1}^{(3)} = 1 - \frac{3}{2\pi^2} = 0.848. \quad (3.16)$$

Эта простейшая модель ведёт к следующим заключениям. Вероятность отрыва излучения в однофотонном переходе равна 0.682 уже после первого переизлучения и становится близкой к единице с увеличением числа перерасеяний. Такой результат свидетельствует, что модель, по-видимому, не слишком пригодна для описания отрыва излучения в однофотонных переходах. Однако, для двухфотонных переходов она даёт более разумные результаты.

Этот результат не зависит от конкретного перехода и, следовательно, относится также и к Лайман-альфа переходам. Подчеркнём, что эти оценки не заменяют точного астрофи-

зического подхода к проблеме перерасеяния фотонов на атомах и представлены только для того чтобы сделать дальнейшие вычисления более наглядными.

3.2 Перепоглощение двухфотонного излучения

Определим вероятность "отрыва" двухфотонного излучения одного атома в процессе поглощения Лайман-альфа линией другого атома аналогично выражению (3.8):

$$X_{2s,1s}^{(2)2\gamma} = \frac{1}{2} \int_0^{\omega_0} I_{2s,1s}(\omega) L_{2p,1s}(\omega) d\omega, \quad (3.17)$$

где $I_{2s,1s}(\omega) = dW_{2s,1s}(\omega)$, $\omega_0 = E_{2s} - E_{1s}$. Интегрируя (3.17) по ω , находим

$$X_{2s,1s}^{(2)2\gamma} = 6.50 \cdot 10^{-22} \quad (3.18)$$

Малость величины (3.18) показывает, что двухфотонное излучение $2s - 1s$ одного атома не может быть поглощено другим. Это означает, что излучение полностью "отрывается" в двухфотонном $2s - 1s$ переходе

$$Y_{2s,1s}^{(2)2\gamma} = 1 - X_{2s,1s}^{(2)2\gamma} = 1. \quad (3.19)$$

Здесь, индекс (2) как и в параграфе 3.1, означает, что рассматривается только однократное перерасеяние фотонов. Этого вполне достаточно, чтобы оценить относительную важность вкладов различных каналов распада в "отрыв" излучения. Прделаем аналогичные выкладки для перехода $3s \rightarrow 1s + 2\gamma(E1)$. В этом случае будем полагать, что двухфотонное $3s - 1s$ излучение поглощается всеми возможными однофотонными переходами в диапазоне $[0, \omega_0]$, т.е. $3s - 2p$, $3d - 2s$, $3p - 2s$ и $2p - 1s$.

$$X_{3s,1s}^{(2)2\gamma} = \frac{1}{2} \int_0^{\omega_0} I_{3s,1s}(\omega) [L_{3s,2p}(\omega) + L_{2p,1s}(\omega) + L_{3d,2p}(\omega) + L_{3p,2s}(\omega)] d\omega, \quad (3.20)$$

где $\omega_0 = E_{3s} - E_{1s}$. Численное интегрирование даёт

$$X_{3s,1s}^{(2)2\gamma} = 0.00497. \quad (3.21)$$

Величина $X_{3s,1s}^{(2)2\gamma}$ намного больше $X_{2s,1s}^{(2)2\gamma}$, но меньше чем 1. Это означает, что вероятность "отрыва" высока:

$$Y_{3s,1s}^{(2)2\gamma} = 0.99504. \quad (3.22)$$

Аналогичные результаты дают вычисления для двухфотонного распада уровней ns ($n > 2$), nd . В переходе $3d \rightarrow 1s + 2\gamma(E1)$ присутствует один каскад с двумя коленами; в переходе $4s \rightarrow 1s + 2\gamma(E1)$ два каскада, каждый с двумя коленами $4s \rightarrow 3p \rightarrow 1s$ и $4s \rightarrow 2p \rightarrow 1s$ и в переходе $4d \rightarrow 1s + 2\gamma(E1)$ также два каскада каждый с двумя коленами $4d \rightarrow 3p \rightarrow 1s$ и $4d \rightarrow 2p \rightarrow 1s$. Соответствующие вероятности переходов $W_{3d,1s}^{(2\gamma)}$, $W_{4s,1s}^{(2\gamma)}$, $W_{4d,1s}^{(2\gamma)}$, полные ширины уровне Γ_{3d} , Γ_{4s} , Γ_{4d} а также вероятности поглощения $X_{nl,1s}^{(2)2\gamma}$ и "отрыва" излучения $Y_{nl,1s}^{(2)2\gamma}$ приведены в таблице 5. Таким образом, в рассматриваемой модели все уровни ns , nd с $n = 3, 4$ дают вклад в "отрыв" излучения соизмеримый с вкладом двухфотонного $2s - 1s$ перехода.

Наименьший "отрыв" (разница порядка 3% по сравнению с двухфотонным распадом $2s$ уровня) возникает в двухфотонном распаде $3d$ состояния. Однако, роль этих состояний в космологическом "отрыве" излучения сильно подавлена термодинамическим фактором (смотри параграф 3.4). Необходимо отметить следующие два обстоятельства в приведённых выше расчётах. Во-первых, рассматривались только двухфотонные $E1E1$ переходы, возможные переходы с фотонами высшей мультипольности не учитывались. Такой подход хорошо применим для атома водорода (смотри, например [61]). Во-вторых различие между $\Gamma_{aa'}$ и Γ_a в выражении (3.1) для однофотонных переходов $3s - 2p$, $3d - 2p$, $4s - 3p$, $4s - 2p$, $4d - 3p$, $4d - 2p$ также не принималось во внимание так как переходы с фотонами высших мультипольностей, входящие в выражение для ширины, сильно подавлены. Принимая выше сказанное во внимание, выражение (3.20) для лоренцевского контура $L_{3s,2p}$ должно определяться следующим образом

$$L_{3s,2p} = \frac{1}{2\pi} \frac{\Gamma_{3s,2p}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{3s}} \frac{\Gamma_{3s}^{(1\gamma)} + \Gamma_{2p}^{(1\gamma)}}{(\omega - \tilde{\omega}_{3s,2p})^2 + \frac{1}{4}(\Gamma_{3s}^{(1\gamma)} + \Gamma_{2p}^{(1\gamma)})^2}. \quad (3.23)$$

Здесь $\Gamma_{3s} = \Gamma_{3s,2p}^{(1\gamma)}$, так как переходами $3s \rightarrow 1s + \gamma(M1)$, $3s \rightarrow 2s + \gamma(M1)$ пренебрегается, в виду того что их вклад в полную ширину Γ_{3s} весьма мал [26].

3.3 Перепоглощение трёх- и четырёхфотонного излучения

В работах [34], [70] было выдвинуто предположение, что многофотонные переходы с двухфотонными коленами, могут также давать вклад в "отрыв" излучения в процессе космологической рекомбинации. Этот подход был назван "двухфотонным приближением" так как вкладом "чистого" многофотонного излучения с числом фотонов больше чем 2 можно пренебречь. В [34] в качестве примера двухфотонного приближения рассматривался трёхфотонный $3p \rightarrow 1s$ переход. Распад $3p$ состояния возможен однофотонным переходом $3p \rightarrow 1s + \gamma(E1)$ или трёхфотонным $3p \rightarrow 1s + 3\gamma(E1)$. Эти каналы не интерферируют друг с другом из-за различного числа фотонов в конечном состоянии. Однофотонная вероятность равна

$$W_{3p,1s}^{(1\gamma)} = 195.61m\alpha^2(\alpha Z)^4 \dots = 1.67342 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}, \quad (3.24)$$

где m масса электрона, α постоянная тонкой структуры, Z заряд ядра ($Z = 1$ для водорода). В трёхфотонный переход $3p \rightarrow 1s + 3\gamma(E1)$ дают вклад "чистое" трёхфотонное излучение, два каскада $3p \rightarrow 2s + \gamma(E1) \rightarrow 1s + 2\gamma(E1)$, $3p \rightarrow 2p + 2\gamma(E1) \rightarrow 1s + \gamma(E1)$ и интерференция. "Чистое" трёхфотонное излучение имеет порядок $m\alpha^3(\alpha Z)^8$ р. е.

Вероятности трёхфотонного распада для переходов без каскадов рассчитывались в работах [71] для $2p \rightarrow 1s + 3\gamma(E1)$:

$$W_{2p,1s}^{(3\gamma)} = 0.4946m\alpha^3(\alpha Z)^8 \text{ r.} \dots \quad (3.25)$$

Важно отметить, что для вероятности $3p \rightarrow 1s + 3\gamma(E1)$ перехода вклады "чистого" трёхфотонного излучения и каскадного также неразделимы, как и в случае двухфотонного $3s \rightarrow 1s + 2\gamma(E1)$, $3d \rightarrow 1s + 2\gamma(E1)$ перехода в §3.2. Однако, в отличие от двухфотонного распада, где на уровне точности "двухфотонного приближения" рассматривались все вклады, в случае трёхфотонного распада на том же уровне точности достаточно рассматривать только вклад каскадов полностью пренебрегая "чистым" трёхфотонным излучением и интерференционными членами. Это возможно, так как амплитуда "чистой" трёхфотонной вероятности значительно меньше "чистой" двухфотонной вероятности. Таким образом задача сводится к рассмотрению только вкладов от каскадов [34]

$$W_{3p,1s}^{(3\gamma)} = W_{3p,2p}^{(2\gamma)} + \frac{W_{3p,2s}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{3p}} W_{2s,1s}^{(2\gamma)}. \quad (3.26)$$

Порядок амплитуды трёхфотонного перехода фактически определяется переходом в каскадном колене, в нашем случае двухфотонным переходом.

Полная вероятность распада $3p$ уровня Γ_{3p} определяется так (аналогично Γ_{3s} в параграфе 3.2)

$$\Gamma_{3p} = \Gamma_{3p,1s}^{(1\gamma)} + \Gamma_{3p,2s}^{(1\gamma)} \quad (3.27)$$

Двухфотонная вероятность перехода $W_{3p,2p}^{(2\gamma)}$ вычисляется аналогично вероятности $W_{2s,1s}^{(2\gamma)}$ так как представляет "чистый" двухфотонный распад. Поэтому

$$W_{3p,2p}^{(2\gamma)} = \frac{1}{2} \int_0^{\omega_0} dW_{3p,2p}^{(2\gamma)}(\omega), \quad (3.28)$$

где $\omega_0 = E_{3p} - E_{2p}$. Дифференциальное распределение по частоте $dW_{3p,2p}^{(2\gamma)} \equiv I_{3p,2p}$ выглядит следующим образом (в а.е.)

$$dW_{3p,2p}^{(2\gamma)}(\omega) = \frac{8\omega^3(\omega_0 - \omega)^3}{9\pi * 15^2} \alpha^2 \sum_{m_{l_{3p}} m_{l_{2p}}} \sum_{q'q} (-1)^{q+q'} \left| S_{3p,2p}^{q'q}(\omega) + S_{3p,2p}^{q'q}(\omega_0 - \omega) \right|^2 d\omega, \quad (3.29)$$

где

$$\begin{aligned} S_{3p,2p}^{q'q}(\omega) = & (5C_{1q'00}^{l_{3p}m_{l_{3p}}} C_{1ql_{2p}m_{l_{2p}}}^{00}) \sum_{n's} \frac{\langle R_{3p}|r|R_{n's} \rangle \langle R_{n's}|r|R_{2p} \rangle}{E_{n's} - E_{3p} + \omega} + \\ & + (2\sqrt{5} \sum_{m_{l_n}} C_{1q'2m_{l_n}}^{l_{3p}m_{l_{3p}}} C_{1ql_{2p}m_{l_{2p}}}^{2m_{l_n}}) \sum_{n'd} \frac{\langle R_{3p}|r|R_{n'd} \rangle \langle R_{n'd}|r|R_{2p} \rangle}{E_{n'd} - E_{3p} + \omega}, \end{aligned} \quad (3.30)$$

$$\langle R_{n'l'}|r|R_{nl} \rangle = \int_0^{\infty} r^3 R_{n'l'}(r) R_{nl}(r) dr, \quad (3.31)$$

$C_{l_1 m_{l_1} l_2 m_{l_2}}^{l m_l}$ коэффициенты Клебша-Гордана, m_l проекции угловых моментов.

В выражении (3.30) нет резонансных членов. Поэтому суммирование по $n's$, $n'd$ в выражении (3.30) можно выполнить с помощью кулоновской функции Грина. Суммируя по всем проекциям угловых моментов в (3.30), находим

$$\begin{aligned} dW_{3p,2p}^{(2\gamma)} = & \frac{8\omega^3(\omega_0 - \omega)^3}{3^5 2^5 \pi} \alpha^2 (25I_0^2(\nu) + 76I_2^2(\nu) + 25I_0^2(\nu') + 160I_0(\nu')I_2(\nu') + 76I_2^2(\nu') + \\ & + 10I_0(\nu)(16I_2(\nu) + 15I_0(\nu') + 6I_2(\nu')) + 12I_2(\nu)(5I_0(\nu') + 21I_2(\nu'))) d\omega, \end{aligned} \quad (3.32)$$

Интегралы I_0 , I_2 в выражении (3.32) а определены следующим образом

$$I_0(\nu) = \int_0^\infty \int_0^\infty dr_1 dr_2 r^3 r'^3 R_{21}(r_1) g_0(\nu; r_1, r_2) R_{31}(r_2) , \quad (3.33)$$

$$I_2(\nu) = \int_0^\infty \int_0^\infty dr_1 dr_2 r^3 r'^3 R_{21}(r_1) g_2(\nu; r_1, r_2) R_{31}(r_2) ,$$

где $\nu = Z/\sqrt{E_{3p} - \omega}$, $\nu' = Z/\sqrt{E_{3p} - \omega'}$, $\omega' = \omega_0 - \omega$. Радиальная часть кулоновской функции Грина $g_l(\nu; r, r')$ равна

$$g_l(\nu; r, r') = \frac{4Z}{\nu} \left(\frac{4}{\nu^2} r r' \right)^l \exp\left(-\frac{r+r'}{\nu}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n! L_n^{2l+1}\left(\frac{2r}{\nu}\right) L_n^{2l+1}\left(\frac{2r'}{\nu}\right)}{(2l+1+n)!(n+l+1-\nu)}. \quad (3.34)$$

В выражении (3.34) L_n^{2l+1} - полиномы Лагерра. Вероятность "отрыва" трёхфотонного излучения в переходе $3p \rightarrow 1s + 3\gamma(E1)$ определяется так

$$Y_{3p,1s}^{(2)3\gamma} = 1 - X_{3p,1s}^{(2)3\gamma} , \quad (3.35)$$

$$X_{3p,1s}^{(2)3\gamma} = \frac{1}{2} \int_0^{\omega_0} I_{3p,2p}(\omega) [L_{3p,2s}(\omega) + L_{3s,2p}(\omega) + L_{3d,2p}(\omega)] d\omega + \frac{W_{3p,2s}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{3p}} X_{2s,1s}^{(2)}. \quad (3.36)$$

В выражении (3.36) вероятность распада $W_{3p,2s}^{(1\gamma)} \equiv \Gamma_{3p,2s}^{(1\gamma)} = 2.24603 \cdot 10^7 \text{ s}^{-1}$, $\Gamma_{3p,1s}^{(1\gamma)} = 1.67342 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$ и согласно (3.27) $\Gamma_{3p} = 1.89803 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$. Отметим, что различие между вероятностью $W_{3p,1s}^{(3\gamma)}$ и шириной Γ_{3p} больше чем различие между $W_{3d,1s}^{(2\gamma)}$, $W_{4s,1s}^{(2\gamma)}$, $W_{4d,1s}^{(2\gamma)}$ и Γ_{3d} , Γ_{4s} , Γ_{4d} соответственно. Прямой однофотонный распад уровней $3d$, $4s$, $4d$ происходит намного быстрее чем соответствующие каскадные переходы (смотри таблицу 5). Это объясняется тем, что каскады содержат "чистые" двухфотонные колена, вероятность которых мала и имеет порядок двухфотонного $2s - 1s$ перехода.

По-другому обстоит дело с трёхфотонным переходом $4p \rightarrow 1s + 3\gamma(E1)$, $4f \rightarrow 1s + 3\gamma(E1)$. Формулы, аналогичные выражению (3.26), для этого перехода выглядят следующим образом

$$W_{4p,1s}^{(3\gamma)} = W_{4p,2p}^{(2\gamma)} + \frac{W_{3p,1s}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{3p}} W_{4p,3p}^{(2\gamma)} + \frac{W_{4p,3d}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{4p}} W_{3d,1s}^{(2\gamma)} + \frac{W_{4p,3d}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{4p}} W_{3d,1s}^{(2\gamma)} + \frac{W_{4p,3s}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{4p}} W_{3s,1s}^{(2\gamma)} + \frac{W_{4p,2s}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{4p}} W_{2s,1s}^{(2\gamma)} , \quad (3.37)$$

$$W_{4f,1s}^{(3\gamma)} = W_{4f,2p}^{(2\gamma)} + W_{3d,1s}^{(2\gamma)} + \frac{W_{3p,1s}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{3p}} W_{4f,3p}^{(2\gamma)}. \quad (3.38)$$

Двухфотонные колена каскадов $4p \rightarrow 2p + 2\gamma(E1) \rightarrow 1s + 3\gamma(E1)$, $4f \rightarrow 2p + 2\gamma(E1) \rightarrow 1s + 3\gamma(E1)$ аналогичны случаю $3s \rightarrow 1s + 2\gamma(E1)$ перехода, т.е. они представляют собой каскады $4p \rightarrow 3d \rightarrow 2p$ и $4f \rightarrow 3d \rightarrow 2p$ соответственно.

Эти каскадные колена рассчитываются также как и случай $3s \rightarrow 1s + 2\gamma(E1)$ перехода и имеют амплитуду того же порядка. Полные вероятности переходов $W_{4p,2p}^{(2\gamma)}$, $W_{4f,2p}^{(2\gamma)}$ отличаются от полных ширин $\Gamma_{4p} = \Gamma_{4p,1s}^{(1\gamma)} + \Gamma_{4p,2s}^{(1\gamma)} + \Gamma_{4p,3s}^{(1\gamma)} + \Gamma_{4p,3d}^{(1\gamma)}$ и $\Gamma_{4f} = \Gamma_{4f,3d}^{(1\gamma)}$, соответственно (см. Главу 4). Два других канала распада уровней $4p$, $4f$, т.е. $4p \rightarrow 3p + 2\gamma(E1) \rightarrow 1s + 3\gamma(E1)$ и $4f \rightarrow 3p + 2\gamma(E1) \rightarrow 1s + 3\gamma(E1)$ содержат "чистые" двухфотонные колена, и поэтому их вероятность мала по сравнению с Γ_{4p} , Γ_{4f} . Эти результаты, вместе с величинами $X_{4p,1s}^{(2)3\gamma}$, $Y_{4p,1s}^{(2)3\gamma}$ и $X_{4f,1s}^{(2)3\gamma}$, $Y_{4f,1s}^{(2)3\gamma}$ также представлены в Таблице.

Перейдём к четырёхфотонным процессам и рассмотрим переход $4s \rightarrow 1s + 4\gamma(E1)$. Этот процесс не интерферирует с двухфотонным каналом $4s \rightarrow 1s + 2\gamma(E1)$, рассмотренном в параграфе 3.2, в виду различного числа фотонов в конечном состоянии. Как и в случае трёхфотонного распада, "чистым" четырёхфотонным излучением можно пренебречь и рассматривать только вклады с двухфотонными коленами $4s \rightarrow 3p + \gamma(E1) \rightarrow 2s + 2\gamma(E1) \rightarrow 1s + 4\gamma(E1)$, $4s \rightarrow 3s + 2\gamma(E1) \rightarrow 2p + 3\gamma(E1) \rightarrow 1s + 4\gamma(E1)$ и $4s \rightarrow 3p + \gamma(E1) \rightarrow 2p + 3\gamma(E1) \rightarrow 1s + 4\gamma(E1)$. Выражения аналогичные (3.26) имеют вид [34], [70]:

$$W_{4s,1s}^{(4\gamma)} = W_{4s,3s}^{(2\gamma)} + \frac{W_{4s,3p}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{4s}} W_{3p,2p}^{(2\gamma)} + \frac{W_{4s,3p}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{4s}} \frac{W_{3p,2s}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{3p}} W_{2s,1s}^{(2\gamma)}. \quad (3.39)$$

В(3.39) $W_{4s,3p}^{(1\gamma)} \equiv \Gamma_{4s,3p}^{(1\gamma)}$. Величина Γ_{4s} представляется как

$$\Gamma_{4s} = \Gamma_{4s,3p}^{(1\gamma)} + \Gamma_{4s,2p}^{(1\gamma)}. \quad (3.40)$$

Аналогичным образом $W_{3p,2s}^{(1\gamma)} \equiv \Gamma_{3p,2s}^{(1\gamma)}$ и Γ_{3p} определяются выражением (3.27). Двухфотонная дифференциальная плотность вероятности (распределение по частоте) $dW_{4s,3s}^{(2\gamma)}$ получается из выражений (2.9), (2.10) заменой $A' \rightarrow 4s$, $A \rightarrow 3s$. Таким образом, вероятность "отрыва" через четырёхфотонный переход $4s \rightarrow 1s + 4\gamma(E1)$

$$Y_{4s,1s}^{(2)4\gamma} = 1 - X_{4s,1s}^{(2)4\gamma}, \quad (3.41)$$

$$\begin{aligned}
X_{4s,1s}^{(2)4\gamma} = & \frac{1}{2} \int_0^{\omega_0} I_{4s,3s}(\omega) [L_{4s,3p}(\omega) + L_{4p,3s}(\omega) + L_{4f,3d}(\omega) + L_{4d,3p}(\omega) + L_{4p,3d}(\omega)] d\omega + \\
& + \frac{1}{2} \frac{W_{4s,3p}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{4s}} \int_0^{\omega_0} I_{3p,2p}(\omega) [L_{3p,2s}(\omega) + L_{3s,2p}(\omega) + L_{3d,2p}(\omega)] d\omega + \frac{W_{4s,3p}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{4s}} \frac{W_{3p,2s}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{3p}} X_{2s,1s}^{(2)2\gamma},
\end{aligned} \tag{3.42}$$

где $\omega_0 = E_{4s} - E_{1s}$. Вставляя все необходимые распределения по частотам для однофотонных переходов в выражение (3.42) приходим к результату представленному в таблице 5. Результаты для аналогичных вычислений $4d \rightarrow 1s + 4\gamma(E1)$ перехода также представлены в таблице 5. Отметим, что для этих 4-фотонных распадов как и для 3-фотонного распада $3p \rightarrow 1s + 3\gamma(E1)$ вероятность перехода много меньше полной ширины уровней Γ_{4s}, Γ_{4d} . Таким образом, при рассмотрении 2-х, 3-х и 4-х фотонных распадов, вычисление вклада в "отрыв" излучения переходов из уровней $nl(n \leq 4)$ в "двухфотонном приближении" полностью исчерпаны всевозможными каналами.

3.4 Относительная роль многофотонного распада возбуждённых состояний в "отрыве" излучения

Оценим относительную важность многофотонных (двух-, трёх- и четырёх-) распадов уровней $ns, np(2 < n \leq 4)$, $nd, nf(n \leq 4)$ в "отрыв" излучения в эпоху космологической рекомбинации на примере модели рассмотренной в параграфах §3.1-3.3. Будем предполагать, что система находится в термодинамическом равновесии, т.е. температура электронов T_e приблизительно равна температуре фотонов T_γ [72]. Для определения T_γ воспользуемся формулой [72]

$$T_\gamma = T_0(1 + z), \tag{3.43}$$

где $T_0 = 2.725K$ - температура космического микроволнового излучения и величина z определяет красное смещение, которая для оценок может быть равной $z \approx 1000$ для эпохи космологической рекомбинации. Сравним вклад возбуждённых состояний атома водорода в "отрыв" излучения с вкладом двухфотонного распада $2s$ уровня [10], [11]. Пусть величина R_{2s} характеризует "отрыв" излучения в двухфотонном распаде $2s$ уровня. Тогда можно использовать следующую характеристику "отрыва" излучения, для оценки относительной

роли возбуждённых состояний

$$R = R_{2s} \left[1 + \left(Y_{3s,1s}^{(2)2\gamma} + \frac{g_d}{g_s} Y_{3d,1s}^{(2)2\gamma} \right) e^{-\frac{E_{3s}-E_{2s}}{kT_e}} + \right. \\ \left. + \left(Y_{4s,1s}^{(2)2\gamma} + \frac{g_d}{g_s} Y_{4d,1s}^{(2)2\gamma} + \frac{g_p}{g_s} Y_{4p,1s}^{(2)3\gamma} + \frac{g_f}{g_s} Y_{4f,1s}^{(2)3\gamma} \right) e^{-\frac{E_{4s}-E_{2s}}{kT_e}} \right]. \quad (3.44)$$

В выражении (3.44) коэффициенты вырождения для состояний nl такие: $g_s = 2$, $g_p = 6$, $g_d = 10$, $g_f = 14$. Вероятности "отрыва" излучения $Y_{nl,1s}$ представлены в таблице 5. Для грубой оценки можно положить все значения $Y_{nl,1s}^{(2)s\gamma}$ равными единице (см. таблицу 5). Тогда для $T_e = 2.725K$ первая экспонента в правой части выражения (3.44) равна

$$e^{-\frac{E_{3s}-E_{2s}}{kT_e}} \approx 0.00032105 \quad (3.45)$$

и вторая экспонента

$$e^{-\frac{E_{4s}-E_{2s}}{kT_e}} \approx 0.000019225. \quad (3.46)$$

Тогда

$$R = R_{2s} [1 + 0.0018501 + 0.0002941] = R_{2s} [1 + 0.0021442]. \quad (3.47)$$

Числа в выражении (3.45) означают, что "отрыв" излучения со всех возбуждённых состояний с $n = 3$ может давать вклад порядка 0.18%, а вклад в "отрыв" излучения со всех состояний с $n = 4$ порядка 0.03%. Полученные оценки могут иметь важное значение в связи с достигнутым уровнем точности астрофизических наблюдений.

Таким образом состояния с $n \leq 4$ могут давать соизмеримый вклад. Из этого выражения были исключены 3-фотонные переходы из $3p$ уровня и 4-фотонные распады $4s$, $4d$ рассмотренные в параграфе §3.3. Вероятность этих распадов, согласно таблице 5, мала. Чтобы дать существенный вклад в вероятность "отрыва" излучения, каскадный переход должен содержать только "чистые" двухфотонные колена. Только 3-фотонные распады уровней $4p$, $4f$ удовлетворяют этому условию.

В этой главе в рамках КЭД представлена простая модель для оценки вклада относительной роли возбуждённых состояний в "отрыв" излучения в эпоху космологической рекомбинации. Эти оценки не заменяют точное решение астрофизических уравнений баланса, однако могут указывать на то какие процессы (в данном случае распады возбуждённых

состояний) могут быть приняты во внимание в этих уравнениях. Вычисления в рамках приведённой модели показывают, что трёхфотонные переходы из состояний $nl(n \leq 4)$ дают вклад в "отрыв" излучения соизмеримый с вкладом двухфотонного излучения. Двухфотонное приближение используемое в этой главе при расчёте вероятностей перепоглощения хорошо оправдано в виду относительной малости "чистого" 3-х и 4-х фотонного излучения в переходах с каскадами.

Таблица 5: Вклады многофотонных процессов с каскадами, имеющие одно двухфотонное колено, в "отрыв" излучения. Здесь k число фотонов; nl - начальное состояние атома; $W_{nl,n'l'}^{(k\gamma)}$ - полная вероятность для переходов с каскадами; $W_{nl,n'l'}^{(k\gamma)*}$ - полная вероятность для переходов только с "чистыми" двухфотонными коленами, Γ_{nl} - полная ширина возбуждённого состояния; $X_{nl,n'l'}^{(k\gamma)}$ - вероятность поглощения; $Y_{nl,n'l'}^{(k\gamma)}$ - вероятность "отрыва" фотонов.

	k	nl	$W_{nl,1s}^{(k\gamma)}, s^{-1}$	$W_{nl,1s}^{(k\gamma)*}, s^{-1}$	Γ_{nl}, s^{-1}	$X_{nl1s}^{(2)k\gamma}$	$Y_{nl1s}^{(2)k\gamma}$
1	2	2s		8.22935	8.22935	6.39353×10^{-22}	1.00000
2		3s	0.06317×10^8		0.06317×10^8	0.00497	0.99504
3		3d	0.64686×10^8		0.64686×10^8	0.04652	0.95349
4		4s	0.04171×10^8		0.04416×10^8	0.00431	0.99569
5		4d	0.26013×10^8		0.27677×10^8	0.02118	0.97882
6	3	3p		1.01909	1.89803×10^8	2.33432×10^{-22}	1.00000
7		4p	0.003929×10^8		0.81311×10^8	0.011005	0.98995
8		4f	0.784812×10^8		0.13795×10^8	0.08435	0.95348
9	4	4s		0.61571	0.04416×10^8	2.47954×10^{-22}	1.00000
10		4d		0.41132	0.27678×10^8	1.75724×10^{-22}	1.00000

Глава 4. Двухфотонная ширина. Мнимая часть собственной энергии электрона

4.1 Мнимая часть двухпетлевых радиационных поправок

Эта часть работы посвящена вычислению двухфотонной ширины возбуждённого состояния атома как мнимой части двухпетлевой собственной энергии электрона. Основные результаты представлены в нашей работе [73]. Особый интерес к этим вычислениям вызван работами [39]- [40], в которых предлагалось рассматривать двухфотонную ширину как вклад "чистого" двухфотонного излучения. В то же время ранее было показано (см. Главу 1), что в рамках КЭД теории такое выделение носит неоднозначный характер [26], [18]. В связи с этим крайне важным становится вычисление двухфотонных ширин в атоме во-

дорода, сравнение с вероятностями соответствующих двухфотонных переходов и их физическая интерпретация.

Известно, что полная радиационная ширина Γ возбуждённого состояния атома равна сумме вероятностей переходов по всем возможным каналам распада во все нижележащие состояния:

$$\Gamma_A^{\text{total}} = \sum_i W_{A \rightarrow 0}^i, \quad (4.1)$$

где A означает возбуждённое состояние атома, 0 - основное состояние, суммирование по i соответствуют всем возможным каналам распада, включая многофотонные переходы с каскадами. С другой стороны ширина уровня может быть определена как мнимая часть сдвига энергии ΔE_A из-за радиационных и межэлектронных поправок

$$\Gamma_A = -2\text{Im}\Delta E_A. \quad (4.2)$$

Следует отметить, что эти два определения не совпадают друг с другом при наличии в сумме (4.1) вероятностей переходов с каскадами. Каскады, как будет показано ниже, не дают вклада в выражение (4.2).

В случае однофотонных переходов для $\Gamma_n^{1\gamma}$ имеет место выражение

$$\Gamma_n^{1\gamma} = \sum_{n' < n} \Gamma_{nn'}^{1\gamma} = \sum_{n' < n} W_{nn'}^{1\gamma}. \quad (4.3)$$

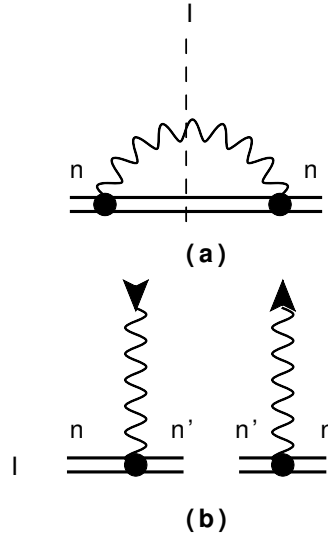
Для одноэлектронного атома релятивистское выражение для $\Gamma_n^{1\gamma}$ записывается следующим образом (смотри [60])

$$\Gamma_n^{1\gamma} = \sum_{n' < n} \Gamma_{nn'}^{1\gamma} = -\frac{\alpha}{2} \sum_{n' < n} \left(1 - \frac{E_{n'}}{|E_{n'}|}\right) \left(\frac{1 - \vec{\alpha}_1 \vec{\alpha}_2}{r_{12}} \sin(|E_{n'} - E_n| r_{12})\right)_{n' n n'}, \quad (4.4)$$

где $\vec{\alpha}_i$ ($i = 1, 2$) матрицы Дирака, действующие на дираковские волновые функции, зависящие от переменных \vec{r}_1 и \vec{r}_2 , соответственно. Суммирование в (4.4) проходит по всем положительно определённым уровням энергии лежащими ниже чем n : $E_{n'} < E_n$. В выражении (4.4) интегрирование по направлениям вылета фотона и суммирование по поляризации уже учтено.

Выражение (4.4) получается при рассмотрении мнимой части однопетлевой собственной энергии электрона. Соответствующий фейнмановский график изображён на Рис. (7).

Рис. 7: Фейнмановский график однопетлевой собственной энергии, соответствующий однофотонной ширине $\Gamma_n^{1\gamma}$ (смотри выражение (4.4)). Двойная сплошная линия обозначает электрон в поле ядра (картина Фарри), волнистая линия обозначает виртуальный (Рис. 7 (a)) или реальный (Рис. 7 (b)) фотоны. Вертикальная пунктирная линия соответствует разрезу графика.



Есть простое правило, помогающее понять, к какому переходу относится мнимая часть того или иного фейнмановского графика для радиационной поправки. Это правило заключается в разрезании графиков электронных собственнoэнергетических петель как показано на Рис. 7. Разрезы поляризации вакуума не дают вклад в мнимую часть поправки к энергии. На Рис. 7 показано, что мнимая часть петли соответствует сумме однофотонных переходов в нижележащее состояние. Важно заметить, что мнимые части двухпетлевых поправок были вычислены ранее в рамках нерелятивистского КЭД подхода в [39]- [40]. Расчёт представленный в этой главе полностью релятивистский и только в конце выполняется нерелятивистский предел [73].

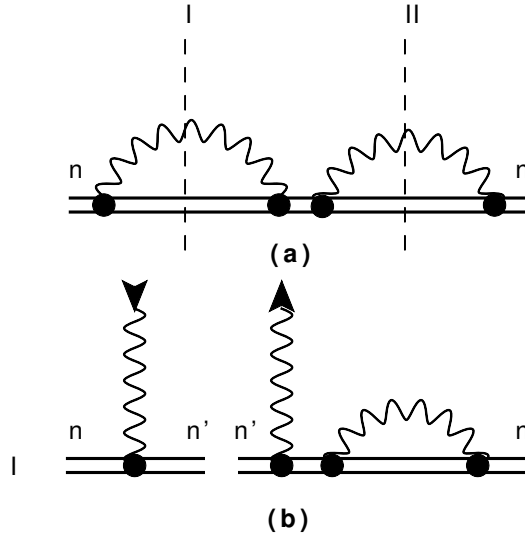
Собственнoэнергетические поправки второго порядка по α представлены на Рис. 8, 9 и 10. Фейнмановский график на Рис. 8а называется приводимым, так как он может быть разделён на две части разрезанием только одной внутренней электронной линии. Графики на Рис. 9а и 10а по этой причине называются неприводимыми, так как не могут быть разделены на две части разрезанием одной электронной линии. В [60] было показано, что радиационные поправки к энергии (ΔE_A) соответствующие неприводимым графикам, могут быть получены через соотношения

$$\langle A' | \hat{S} | A \rangle = 2\pi i \delta(E_{A'} - E_A) \langle A' | \hat{U} | A \rangle, \quad (4.5)$$

$$\Delta E_A = \langle A | \widehat{U} | A \rangle, \quad (4.6)$$

где $\langle A | \widehat{U} | A \rangle$ матричный элемент амплитуды. Из рисунка 8 видно, что каждый из разрезов I, II представляет вклад поправки на собственную энергию электрона к однофотонной амплитуде и не даёт вклад в двухфотонную ширину $\Gamma_n^{2\gamma}$. Радиационные поправки к вероятности к однофотонного перехода, вычисленные как мнимая часть соответствующих радиационных поправок к энергетическому уровню рассматривались в работах [29, 74]. В этой главе будем рассматривать только вклады непосредственно связанные с двухфотонной шириной, которым соответствуют фейнмановские диаграммы на рисунках 9 и 10.

Рис. 8: Фейнмановский график для диаграммы "петля за петлёй" (lal). Обозначения те же что и на Рис. 7. График показывает, что Рис. 8 (a) даёт вклад только в поправку на собственную энергию электрона к амплитуде однофотонного процесса и не даёт вклад в двухфотонную ширину $\Gamma_n^{2\gamma}$.



Выражения для четвёртого порядка S -матричных элементов, которые соответствуют диаграммам "петля в петле" (англ. "loop inside loop сокр. "lil") (Рис. 9) и "скрещенные петли" (англ. "crossed loops сокр. "cl") (Рис. 10) записываются следующим образом

$$\langle A | \widehat{S}^{(4)lil} | A \rangle = e^4 \int d^4 x_1 d^4 x_2 d^4 x_3 d^4 x_4 (\bar{\psi}_A(x_1) \gamma_{\mu_1} S(x_1 x_2) \gamma_{\mu_2} S(x_2 x_3) \gamma_{\mu_3} S(x_3 x_4) \gamma_{\mu_4} \psi_A(x_4)) \times \quad (4.7)$$

$$D_{\mu_1 \mu_4}(x_1 x_4) D_{\mu_2 \mu_3}(x_2 x_3),$$

$$\langle A | \widehat{S}^{(4)cl} | A \rangle = e^4 \int d^4 x_1 d^4 x_2 d^4 x_3 d^4 x_4 (\bar{\psi}_A(x_1) \gamma_{\mu_1} S(x_1 x_2) \gamma_{\mu_2} S(x_2 x_3) \gamma_{\mu_3} S(x_3 x_4) \gamma_{\mu_4} \psi_A(x_4)) \times \quad (4.8)$$

$$D_{\mu_1 \mu_3}(x_1 x_3) D_{\mu_2 \mu_4}(x_2 x_4).$$

Рис. 9: Фейнмановский график для диаграммы "петля в петле" (lil). Обозначения те же что и на Рис. 8. График на Рис. 9 (с) показывает, что только разрез II даёт вклад в двухфотонную ширину $\Gamma_n^{2\gamma}$.

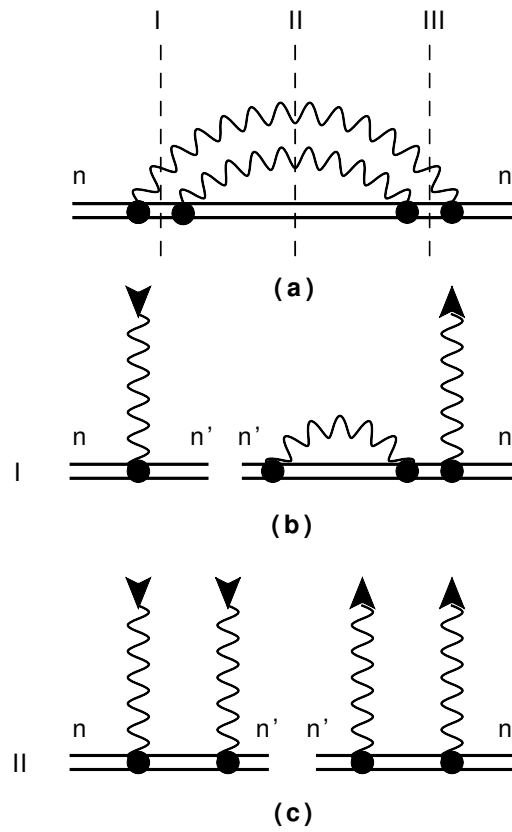
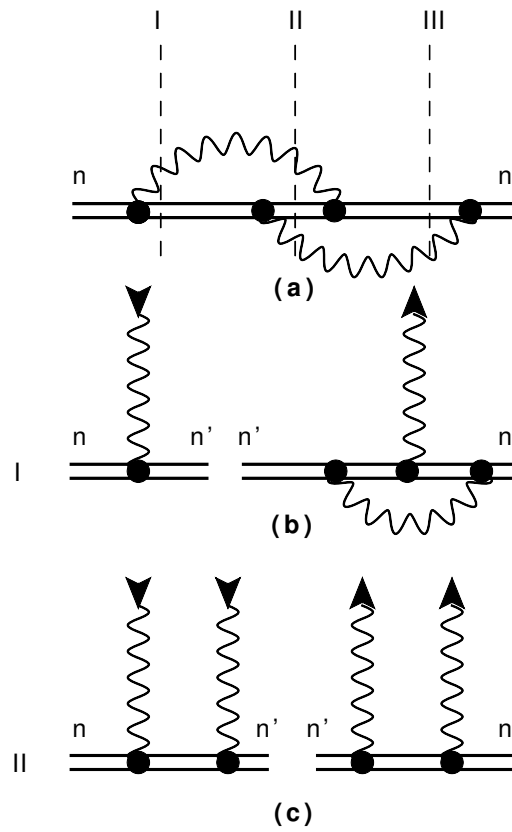


Рис. 10: Фейнмановский график для диаграммы "скрещенные петли" (c1). Обозначения те же что и на Рис. 8. График на Рис. 10 (c) показывает, что только разрез II даёт вклад в двухфотонную ширину $\Gamma_n^{2\gamma}$.



Здесь $D_{\mu\nu}(x_1x_2)$ обозначает фотонный пропагатор в фейнмановской калибровке

$$D_{\mu\nu}(x_1x_2) = \frac{\delta_{\mu\nu}}{2\pi i r_{12}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega(t_1-t_2)+i|\omega|r_{12}} d\omega. \quad (4.9)$$

Подставляя выражения (2.12) и (4.9) для электронного и фотонного пропагаторов в (4.7), (4.8) и интегрируя по времени и частоте с учётом (4.5), (4.6) находим

$$U_A^{(4)lil} = e^4 \sum_{nmk} \left(\frac{\delta_{\mu_1\mu_4}}{r_{14}} \frac{\delta_{\mu_2\mu_3}}{r_{23}} I_{nmkA}^{lil}(r_{14}r_{23}) \right)_{Anmk}, \quad (4.10)$$

$$I_{nmkA}^{lil}(r_{14}r_{23}) = \left(\frac{1}{2\pi i} \right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega_1 \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega_3 \times \quad (4.11)$$

$$\frac{e^{i|\omega_1|r_{14}} e^{i|\omega_3|r_{23}}}{(E_A - \omega_1 - E_n(1-i0))(E_A - \omega_1 - \omega_3 - E_k(1-i0))(E_A - \omega_1 - E_m(1-i0))},$$

$$U_A^{(4)cl} = e^4 \sum_{nmk} \left(\frac{\delta_{\mu_1\mu_3}}{r_{13}} \frac{\delta_{\mu_2\mu_4}}{r_{24}} I_{nmkA}^{cl}(r_{13}r_{24}) \right)_{Anmk}, \quad (4.12)$$

$$I_{nmkA}^{cl}(r_{13}r_{24}) = \left(\frac{1}{2\pi i} \right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega_1 \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega_3 \times \quad (4.13)$$

$$\frac{e^{i|\omega_1|r_{13}} e^{i|\omega_3|r_{24}}}{(E_A - \omega_1 - E_n(1-i0))(E_A - \omega_1 - \omega_3 - E_k(1-i0))(E_A - \omega_3 - E_m(1-i0))}.$$

Как уже упоминалось выше, радиационные поправки к вероятности однофотонного излучения связаны с полюсами крайних энергетических знаменателей в выражениях (4.11), (4.13), в то время как двухфотонная ширина обусловлена полюсами центрального энергетического знаменателя. Для дальнейших вычислений представим интегралы содержащие $e^{i|\omega|r}$ следующим образом:

$$\text{Re} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i|\omega|r}}{E_A - E_s(1-i0) - \omega} = -\frac{\pi}{2} \left(1 + \frac{E_s}{|E_s|} \right) \left(1 + \frac{\beta_{As}}{|\beta_{As}|} \right) \sin(\beta_{As}r), \quad (4.14)$$

где $\beta_{As} = E_A - E_s$. Выполняя интегрирование по ω_3 при помощи выражения (4.14) находим, что двухфотонные вклады выражений (4.11), (4.13) сводятся к

$$I_{nmkA}^{il,2\gamma}(r_{14}, r_{23}) = \frac{e^4}{2\pi} \left(1 + \frac{E_k}{|E_k|}\right) \int_0^{\beta_{Ak}} d\omega_1 \frac{\sin(\omega_1 r_{23}) e^{i(\beta_{Ak} - \omega_1) r_{14}}}{(E_A + \omega_1 - E_n(1 - i0))(E_A - \omega_1 - E_m(1 - i0))}, \quad (4.15)$$

$$I_{nmkA}^{cl,2\gamma}(r_{13}, r_{24}) = \frac{e^4}{2\pi} \left(1 + \frac{E_k}{|E_k|}\right) \int_0^{\beta_{Ak}} d\omega_1 \frac{\sin(\omega_1 r_{23}) e^{i(\beta_{Ak} - \omega_1) r_{14}}}{(E_A + \omega_1 - E_n(1 - i0))(E_A - \omega_1 - E_m(1 - i0))}, \quad (4.16)$$

где $E_A > E_{n(m)} > E_k$. Собирая все вклады вместе, учитывая определение (4.2) и вводя фейнмановские инфинитезимальные параметры $i0 \rightarrow i\varepsilon$ в знаменателях получаем

$$\Gamma_A^{2\gamma} = \frac{e^4}{2\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \text{Re} \left(\sum_{\substack{nk m \\ E_A > E_{n(m)} \\ > E_k}} \int_0^{\beta_{Ak}} \left(1 + \frac{E_k}{|E_k|}\right) \left\{ \frac{\left(\frac{(1 - \vec{\alpha}_2 \vec{\alpha}_4) \sin(\omega r_{24})}{r_{24}}\right)_{nmkA} \left(\frac{(1 - \vec{\alpha}_1 \vec{\alpha}_3) \sin((\beta_{Ak} - \omega) r_{13})}{r_{13}}\right)_{Akmn}}{((E_k - E_n)(1 - i\varepsilon) + \omega)(E_A - \omega - E_m(1 - i\varepsilon))} \right. \right. \quad (4.17)$$

$$\left. \left. \frac{\left(\frac{(1 - \vec{\alpha}_2 \vec{\alpha}_3) \sin(\omega r_{23})}{r_{23}}\right)_{AmnA} \left(\frac{(1 - \vec{\alpha}_1 \vec{\alpha}_4) \sin((\beta_{Ak} - \omega) r_{14})}{r_{14}}\right)_{nkkm}}{(E_A - \omega - E_n(1 - i\varepsilon))(E_A - \omega - E_m(1 - i\varepsilon))} \right\} d\omega .$$

Матричный элемент в (4.17) $(F(12))_{abcd}$ должен пониматься как $(F(12))_{a(1)b(2)c(1)d(2)}$ где 1, 2 порядковые номера переменных и $\vec{\alpha}_i$ матрицы Дирака, действующие на соответствующие волновые функции $\psi(i)$. Первый член в квадратных скобках выражения (4.17) соответствует вкладу фейнмановской диаграммы "петля в петле", а второй член соответствует диаграмме "скрещенные петли".

Для того чтобы представить выражение (4.17) как сумму парциальных ширин для двухфотонных переходов $A \rightarrow k + 2\gamma$ используем равенство [60]

$$\beta_{Ak} \sum_{\vec{e}} \int d\vec{v} \left| \left((\vec{e} \vec{\alpha}) e^{-i\beta_{nA}(\vec{v} \vec{r})} \right)_{kA} \right|^2 = -\pi \left(\frac{1 - \vec{\alpha}_1 \vec{\alpha}_2}{r_{12}} \sin(\beta_{Ak} r_{12}) \right)_{AkkA}. \quad (4.18)$$

Тогда

$$\Gamma_A^{2\gamma} = \sum_{E_A > E_{n(m)} > E_k} \Gamma_{Ak}^{2\gamma}, \quad (4.19)$$

$$\Gamma_{Ak}^{2\gamma} = e^4 \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \operatorname{Re} \int_0^{\beta_{Ak}} \left(\frac{\omega(\beta_{Ak} - \omega)}{2^4 \pi^3} \int d\vec{v} d\vec{v}' \sum_{\vec{e} \vec{e}'} \sum_n \left\{ \frac{((\vec{e}'^* \vec{\alpha}) e^{-i\vec{k}'\vec{r}})_{kn} ((\vec{e}^* \vec{\alpha}) e^{-i\vec{k}\vec{r}})_{nA}}{E_A - \omega - E_n(1 - i\varepsilon)} + \right. \right. \quad (4.20)$$

$$\left. \left. + \frac{((\vec{e}'^* \vec{\alpha}) e^{-i\vec{k}'\vec{r}})_{kn} ((\vec{e}^* \vec{\alpha}) e^{-i\vec{k}\vec{r}})_{nA}}{(E_k - E_n)(1 - i\varepsilon) + \omega} \right\} \times \right.$$

$$\left. \sum_m \left\{ \frac{((\vec{e}'^* \vec{\alpha}) e^{-i\vec{k}'\vec{r}})_{km}^* ((\vec{e}^* \vec{\alpha}) e^{-i\vec{k}\vec{r}})_{mA}^*}{E_A - \omega - E_m(1 - i\varepsilon)} + \frac{((\vec{e}'^* \vec{\alpha}) e^{-i\vec{k}'\vec{r}})_{km}^* ((\vec{e}^* \vec{\alpha}) e^{-i\vec{k}\vec{r}})_{mA}^*}{(E_k - E_m)(1 - i\varepsilon) + \omega} \right\} \right) d\omega .$$

Важно отметить, что в выражении (4.20) не появляется квадрат модуля. Это факт позволяет обойти сингулярности возникающие при интегрировании по ω в (4.17) когда $n(m) = A, k$, методом предложенным в работах [39]- [40]. Согласно [39]- [40] процедура регуляризации выполняется с применением равенства

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \operatorname{Re} \int_0^1 d\omega \left(\frac{1}{a - \omega + i\varepsilon} \right)^2 = \frac{1}{a(a-1)}. \quad (4.21)$$

Равенство (4.21) выполняется при следующих условиях:

- 1) необходимо сохранить инфинитезимальные параметры $i\varepsilon$ в обоих энергетических знаменателях выражения (4.17) и приравнять их друг другу.
- 2) в выражении (4.21) сначала проводится интегрирование по частоте ω и только затем берётся предел $\varepsilon \rightarrow 0$. Доказательство необходимости этих условий представлено в §4.2.

Перейдём к нерелятивистскому пределу выражения (4.17). После интегрирования по направлениям вылета фотонов и суммированию по поляризациям получаем окончательное выражение для двухфотонной ширины

$$\Gamma_{Ak}^{2\gamma} = e^4 \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \operatorname{Re} \int_0^{\beta_{Ak}} \frac{\omega^3 (\beta_{Ak} - \omega)^3}{2^4 \pi^3} \sum_n \left\{ \frac{(\vec{r})_{kn} (\vec{r})_{nA}}{E_A - \omega - E_n(1 - i\varepsilon)} + \frac{(\vec{r})_{kn} (\vec{r})_{nA}}{(E_k - E_n)(1 - i\varepsilon) + \omega} \right\} \times \quad (4.22)$$

$$\sum_m \left\{ \frac{(\vec{r})_{km}^* (\vec{r})_{mA}^*}{E_A - \omega - E_m(1 - i\varepsilon)} + \frac{(\vec{r})_{km}^* (\vec{r})_{mA}^*}{(E_k - E_m)(1 - i\varepsilon) + \omega} \right\} d\omega ,$$

где $(..)_{ab}$ - матричный элемент со Шредингеровскими волновыми функциями ψ_a^*, ψ_b . Выражение (4.22) записано в форме "длины". Полусной вклад в (4.22) понимается в смысле равенства (4.21). Следуя работам [39]- [40] были проведены численные расчёты ширин $\Gamma_{Ak}^{2\gamma}$ для значений индексов A, k пробегающих набор nl состояний: для A $n(m) = 2, ..5, l = 0, 1, 2, 3$, и для k $n(m) = 1, ..4, l = 0, 1, 2$. Результаты представлены в Таблице. Важным выводом является то, что ширины $\Gamma_{Ak}^{2\gamma}$ не могут рассматриваться как вероятности "чистого" двухфотонного перехода и представляют собой радиационную поправку к полной ши-

рине уровня. Кроме того величины $\Gamma_{Ak}^{2\gamma}$ в некоторых случаях становятся отрицательными (смотри Таблицу 5), что не позволяет рассматривать их как вероятности переходов. Вычисления в Таблице выполнялись тремя различными методами: 1) прямым суммированием спектра водорода в выражении (4.22) с применением точных аналитических выражений матричных элементов в форме "длины" 2) прямым суммированием спектра водорода с применением точных аналитических выражений матричных элементов в форме "скорости" 3) с использованием нерелятивистской кулоновской функции Грина. Результаты полученные различными способами, совпадают с точностью от 3 до 6 знаков.

4.2 Двухфотонная ширина в формализме адиабатической S -матрицы Гелл-Манна-Лоу-Сьючера

В параграфе §4.1 выражения (4.5), (4.6) для сдвига энергии были применены для вычисления двухфотонной ширины $\Gamma_A^{2\gamma}$ состояния A , как мнимой части полного сдвига энергии ΔE_A . Как было отмечено ранее, применимость выражений (4.5), (4.6) для радиационных поправок, описываемых неприводимыми фейнмановскими диаграммами была доказана в [60]. Это доказательство основано на теории адиабатической S -матрицы Гелл-Манна и Лоу [75] доработанной Сьючером [76].

В предыдущем параграфе было показано, что мнимая часть неприводимых фейнмановских диаграмм на Рис. 9 и 10 из которых извлекается вклад двухфотонной ширины, содержит сингулярные знаменатели. Эти сингулярности регуляризуются равенством (4.21). Существует также иной подход для вывода выражения для двухфотонной ширины не основанный на применении выражений (4.5), (4.6). Этот метод предполагает применение формализма адиабатической S -матрицы Гелл-Манна-Лоу-Сьючера и рассматривается в этом параграфе. Выводы представленные в этом параграфе в основном следуют работе [26], но исправляют и уточняют проделанные там выкладки. Исправленные результаты представлены в нашей работе [73].

Метод адиабатической S -матрицы рассматривался в [26] при расчёте вероятностей одно- и двухфотонных вероятностей переходов при наличии каскадов. Общий подход к описанию однофотонных переходов в [26] в рамках этого формализма не вызывает нареканий, однако описание двухфотонных переходов при наличии каскадов требует пересмотра. Формула Гелл-Манна-Лоу-Сьючера для сдвига энергии ΔE_A электрона в атоме

или одноэлектронном ионе выглядит следующим образом

$$\Delta E_A = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{2} i\eta \frac{e^{\frac{\partial}{\partial e}} \langle A | \widehat{S}_\eta | A \rangle}{\langle A | \widehat{S}_\eta | A \rangle}, \quad (4.23)$$

Адиабатическая S -матрица S_η отличается от обыкновенной S -матрицы наличием адиабатического экспоненциального множителя $e^{-\eta|t|}$ в каждой вершине. Энергетический сдвиг рассматривается относительно невозмущённой энергии E_A^0 . Сдвиг может быть вызван радиационными поправками или поправками на межэлектронное взаимодействие в многоэлектронных атомах. Мнимая часть сдвига энергии обусловленного радиационными поправками соответствует радиационной ширине уровня, в то время как мнимая часть поправок второго порядка на межэлектронное взаимодействие соответствуют Оже ширине. Использование выражения (4.23) позволяет не требовать выполнения условия 1) в §4.1.

Для одноэлектронного атома (иона) в состоянии $|A\rangle$ взаимодействующего с фотонным вакуумом поправки энергии ΔE_A содержит только диагональные матричные элементы S матрицы чётного порядка. Разложение выражения (4.20) до членов 4 порядка по e выглядит следующим образом [77]

$$\Delta E_A = \lim_{\eta \rightarrow 0} i\eta \left[\langle A | \widehat{S}_\eta^{(2)} | A \rangle + 2 \langle A | \widehat{S}_\eta^{(4)} | A \rangle - \langle A | \widehat{S}_\eta^{(2)} | A \rangle^2 \right]. \quad (4.24)$$

Разделяя вещественную и мнимую части матричного элемента $\langle A | \widehat{S}_\eta^{(i)} | A \rangle$ и используя выражения (4.2) и (4.24) находим [26]

$$\Gamma_A = - \lim_{\eta \rightarrow 0} \eta \left[\text{Re} \langle A | \widehat{S}_\eta^{(2)} | A \rangle + 2 \text{Re} \langle A | \widehat{S}_\eta^{(4)} | A \rangle + |\langle A | \widehat{S}_\eta^{(2)} | A \rangle|^2 - 2 \left(\text{Re} \langle A | \widehat{S}_\eta^{(2)} | A \rangle \right)^2 \right]. \quad (4.25)$$

Выражение (4.25) верно для членов порядка e^4 включительно. Для дальнейшего использования выражения (4.25) в [26] предлагалось применить оптическую теорему. Эта теорема является следствием унитарности S -матрицы. Формулировка оптической теоремы даётся через определением T -матрицы

$$\widehat{S} = 1 + i\widehat{T}. \quad (4.26)$$

Тогда оптическая теорема имеет вид

$$i(\widehat{T} - \widehat{T}^+) = -\widehat{T}^+ \widehat{T} = -\widehat{T} \widehat{T}^+. \quad (4.27)$$

В терминах матричных элементов оптическая теорема (4.27) выглядит следующим образом

$$2\text{Im}\langle I|\hat{T}|I\rangle = \sum_F |\langle F|\hat{T}|I\rangle|^2, \quad (4.28)$$

где волновая функция $|I\rangle$ соответствует начальному возбуждённому состоянию атомного электрона и фотонного вакуума. Суммирование в (4.28) проходит по всем состояниям $|F\rangle$, соответствующие конечному (не обязательно основному) состоянию атомный электрон + поле фотонов (один или два фотона в нашем случае). Применяя оптическую теорему в форме (4.28) и соотношения между матричными элементами

$$\text{Re}\langle I|\hat{S}^{(i)}|I\rangle = -\text{Im}\langle I|\hat{T}^{(i)}|I\rangle, \quad (4.29)$$

где $i = 1, 2, \dots$, получим следующее равенство [26]

$$-2\text{Re}\langle I|\hat{S}^{(2i)}|I\rangle = \sum_F |\langle F|\hat{S}^{(i)}|I\rangle|^2 + \sum_F \sum_{j<i} 2\text{Re}\langle I|\hat{S}^{(2j)}|F\rangle \langle F|\hat{S}^{(2i-j)}|I\rangle \quad (4.30)$$

Для матричного элемента четвёртого порядка по из (4.30) следует, что

$$-2\text{Re}\langle I|\hat{S}^{(4)}|I\rangle = \sum_F |\langle F|\hat{S}^{(2)}|I\rangle|^2 + \sum_F \sum_{j<i} 2\text{Re}\langle I|\hat{S}^{(1)}|F\rangle \langle F|\hat{S}^{(3)}|I\rangle. \quad (4.31)$$

Последний член в (4.31) представляет радиационную поправку к однофотонной ширине посчитанную Барбиери и Сьючером в [29]. Так как для нас она не представляет интерес, будем рассматривать только члены связанные с двухфотонной шириной.

Вообще говоря адиабатическая S -матрица не унитарна и использование оптической теоремы может быть затруднено, однако, после перехода к пределу по адиабатическому параметру её применение становится возможным и приводит к верным результатам. Некоторые примеры таких вычислений были рассмотрены в [26].

Из выражения (4.25), для состояния $I = A, 0_\gamma$ (возбуждённое состояние атома, фотоны отсутствуют) приходим к определению двухфотонной ширины

$$\Gamma_A^{2\gamma} = \lim_{\eta \rightarrow 0} \eta \left\{ 2 \sum_{F \neq A, 0_\gamma} \left| \langle F|\hat{S}_\eta^{(2)}|A, 0_\gamma\rangle \right|^2 + 4 \left(\text{Re}\langle A, 0_\gamma|\hat{S}_\eta^{(2)}|A, 0_\gamma\rangle \right)^2 \right\}. \quad (4.32)$$

Важно отметить, что нефизическое состояние $F = A, 2\gamma$ формально присутствует в сумме по F в выражении (4.32). Перепишем (4.32) в форме

$$\Gamma_A^{2\gamma} = \lim_{\eta \rightarrow 0} \eta \left\{ 2 \sum_{\substack{F \neq A, 0\gamma \\ F \neq A, 2\gamma}} \left| \langle F | \widehat{S}_\eta^{(2)} | A, 0\gamma \rangle \right|^2 + 2 \left| \langle A, 2\gamma | \widehat{S}_\eta^{(2)} | A, 0\gamma \rangle \right|^2 + 4 \left(\text{Re} \langle A, 0\gamma | \widehat{S}_\eta^{(2)} | A, 0\gamma \rangle \right)^2 \right\}. \quad (4.33)$$

Второй член в выражении (4.33) соответствует нефизическому переходу $A \rightarrow A + 2\gamma$ сокращаемому последним членом в (4.33) [26]. Суммирование по F в (4.32) подразумевает также интегрирование по волновым векторам фотонов и суммирование по поляризациям.

Отметим, что анализ выражения (4.33) отличается от приведённого в [26]. Ниже будет показано, что вывод выражения для двухфотонной ширины представленный в этом параграфе приводит к результатам параграфа 4.1.

Подстановка соответствующих матричных элементов в (4.33) и интегрирование по частоте одного из фотонов (частота второго фотона будет фиксирована законом сохранения энергии) приводят к

$$\Gamma_A^{2\gamma} = \sum_F \Gamma_{AF}^{2\gamma} = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{e^4}{2^4 \pi^3} \sum_F \left\{ \sum_{e e'} \int dv dv' \int_0^{\omega_0} d\omega \omega(\omega_0 - \omega) \sum_n \left| \frac{\left((\vec{e}' * \vec{\alpha}) e^{-i\vec{k}'\vec{r}} \right)_{Fn} \left((\vec{e} * \vec{\alpha}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} \right)_{nA}}{E_n - E_A + \omega + i\eta} \right. \right. \quad (4.34)$$

$$\left. \left. + \frac{\left((\vec{e} * \vec{\alpha}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} \right)_{Fn} \left((\vec{e}' * \vec{\alpha}) e^{-i\vec{k}'\vec{r}} \right)_{nA}}{E_n - E_F - \omega + i\eta} \right|^2 \right\}$$

где ω_0 - энергия перехода.

Для того чтобы наглядно продемонстрировать эквивалентность выражений (4.34) и (4.17) при наличии каскадов (при отсутствии каскадов, это очевидно так как амплитуда перехода вещественна), рассмотрим в качестве примера переход $3s \rightarrow 1s + 2\gamma$ ($A = 3s$, $F = 1s$)

$$\Gamma_{3s,1s}^{2\gamma} = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{e^4}{2^4 \pi^3} \sum_{e e'} \int_0^{\omega_0} dv dv' \int d\omega \omega(\omega_0 - \omega) \sum_n \left| \frac{\left((\vec{e}' * \vec{\alpha}) e^{-i\vec{k}'\vec{r}} \right)_{1sn} \left((\vec{e} * \vec{\alpha}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} \right)_{n3s}}{E_n - E_{3s} + \omega + i\eta} \right. \quad (4.35)$$

$$\left. + \frac{\left((\vec{e} * \vec{\alpha}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} \right)_{1sn} \left((\vec{e}' * \vec{\alpha}) e^{-i\vec{k}'\vec{r}} \right)_{n3s}}{E_n - E_{1s} - \omega + i\eta} \right|^2.$$

Резонансные члены при $n = 2p$ в выражении (4.35) выглядят следующим образом

$$\Gamma_{3s-2p-1s}^{2\gamma, res.1} = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{e^4}{2^4 \pi^3} \sum_{e e'} \int dv dv' \int d\omega \omega(\omega_0 - \omega) \left| \left((\vec{e}' * \vec{\alpha}) e^{-i\vec{k}'\vec{r}} \right)_{1s2p} \left((\vec{e} * \vec{\alpha}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} \right)_{2p3s} \right|^2 \quad (4.36)$$

$$\times \left| \frac{1}{E_{2p} - E_{3s} + \omega + i\eta} \right|^2$$

и

$$\Gamma_{3s-2p-1s}^{2\gamma, res.2} = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{e^4}{2^4 \pi^3} \sum_e \int dv dv' \int d\omega \omega(\omega_0 - \omega) \left| \left((\vec{e}' * \vec{\alpha}) e^{-i\vec{k}'\vec{r}} \right)_{1s2p} \left((\vec{e} * \vec{\alpha}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} \right)_{2p3s} \right|^2 \quad (4.37)$$

$$\times \left| \frac{1}{E_{2p} - E_{1s} - \omega + i\eta} \right|^2.$$

Параметр η в выражениях (4.36) и (4.37) один и тот же. Предельный переход $\eta \rightarrow 0$ в адиабатической теории выполняется только после всех интегрирований. Это оправдывает предположения сделанные в предыдущем параграфе. Равенство

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^1 d\omega \left| \frac{1}{a - \omega + i\varepsilon} \right|^2 = \frac{\pi}{\varepsilon} + \frac{1}{a(a-1)} + O(\varepsilon^2) \quad (4.38)$$

введённое в работе [39], применённое к (4.37) приводит к положительному вкладу $+\frac{\pi}{\eta}$ в то время как для (4.37) оно даёт $-\frac{\pi}{\eta}$. Таким образом, эти сингулярные члены сокращают друг друга в (4.35) после применения равенства (4.38). Учитывая выражение (4.21) выпишем цепочку равенств для двух резонансных членов в выражении (4.35)

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \int_0^1 d\omega \left| \frac{1}{a - \omega + i\eta} \right|^2 + \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_0^1 d\omega \left| \frac{1}{a' - \omega - i\eta} \right|^2 = \frac{\pi}{\eta} + \frac{1}{a(a-1)} - \frac{\pi}{\eta} + \frac{1}{a'(a'-1)} + O(\eta^2) = \quad (4.39)$$

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \operatorname{Re} \int_0^1 d\omega \left(\frac{1}{a - \omega + i\eta} \right)^2 + \lim_{\eta \rightarrow 0} \operatorname{Re} \int_0^1 d\omega \left(\frac{1}{a' - \omega + i\eta} \right)^2.$$

Подставляя (4.39) в (4.35) окончательно приходим к выражению

$$\Gamma_{3s,1s}^{2\gamma} = e^4 \lim_{\eta \rightarrow 0} \operatorname{Re} \int_0^{\omega_0} \left(\frac{\omega(\omega_0 - \omega)}{2^4 \pi^3} \int d\vec{v} d\vec{v}' \sum_{\vec{e}} \sum_{\vec{e}'} \sum_n \left\{ \frac{\left((\vec{e}' * \vec{\alpha}) e^{-i\vec{k}'\vec{r}} \right)_{1sn} \left((\vec{e} * \vec{\alpha}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} \right)_{n3s}}{E_n - E_{3s} + \omega + i\eta} + \right. \quad (4.40)$$

$$\left. + \frac{\left((\vec{e} * \vec{\alpha}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} \right)_{1sn} \left((\vec{e}' * \vec{\alpha}) e^{-i\vec{k}'\vec{r}} \right)_{n3s}}{E_n - E_{1s} - \omega + i\eta} \right\} \times$$

$$\sum_m \left\{ \frac{\left((\vec{e} * \vec{\alpha}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} \right)_{1sm}^* \left((\vec{e}' * \vec{\alpha}) e^{-i\vec{k}'\vec{r}} \right)_{m3s}^*}{E_m - E_{3s} + \omega + i\eta} + \frac{\left((\vec{e}' * \vec{\alpha}) e^{-i\vec{k}'\vec{r}} \right)_{1sm}^* \left((\vec{e} * \vec{\alpha}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} \right)_{m3s}^*}{E_m - E_{1s} - \omega + i\eta} \right\} d\omega.$$

Как видно это выражение для двухфотонной ширины $\Gamma_{3s,1s}^{2\gamma}$ полученное в рамках теории адиабатической S -матрицы полностью совпадает с (4.20) для $A = 3s$, $k = 1s$.

Подход представленный в этом параграфе может быть применён и для вычисления вероятности перехода $W_{3s,1s}^{2\gamma}$ через S -матрицу, однако, в этом случае сингулярные члены в выражении (4.40) не сократят друг друга. Каждый электронный пропагатор, входящий

Таблица 6: Значения величин $\Gamma_{Ak}^{2\gamma}$ для атома водорода. Символ (*) - обозначает значения, посчитанные также ранее в работах [39]- [40].

Состояния		n'			
nl	n'l	1	2	3	4
2s	n's	8.229355 8.229352 *	-	-	-
3s	n's	2.083086 2.082853 *	0.064531	-	-
3d	n's	1.042708 1.042896 *	0.000776	-	-
4s	n's	0.699717 0.698897 *	0.016843	0.002925	-
4s	n'd	-	-	9.69×10^{-6}	-
4p	n'p	-	0.015623	0.002503	-
4d	n's	0.598406 0.598798 *	-0.007319	0.000030	-
4d	n'd	-	-	0.001685	-
4f	np	-	0.031754	0.000044	-
5s	n's	0.288117 0.287110 *	0.081741	0.000704	0.000298
5s	n'd	-	-	-0.000028	1.82×10^{-6}

в амплитуду двухфотонного распада содержит инфинитезимальный параметр ε , пределы по которым должны браться независимо. Таким образом сингулярности остаются в каскадных членах в выражении для вероятности двухфотонного перехода и должны быть регуляризованы введением ширин в энергетический знаменатель (см. Главу 2). Численные расчёты двухфотонных ширин в атоме водорода представлены в таблице 6. Как уже упоминалось в параграфе 4.1 эти величины, соответствующие переходам с каскадами, не могут рассматриваться как вклад "чистого" излучения в вероятность двухфотонного распада и представляют собой радиационную поправку к однофотонной ширине и могут принимать в некоторых случаях отрицательные значения, что подтверждается расчётами.

Глава 5. Спин-Статистические Правила Отбора для многофотонных переходов в атомах

5.1 Обобщение теоремы Ландау-Янга на двухфотонные переходы в атомах

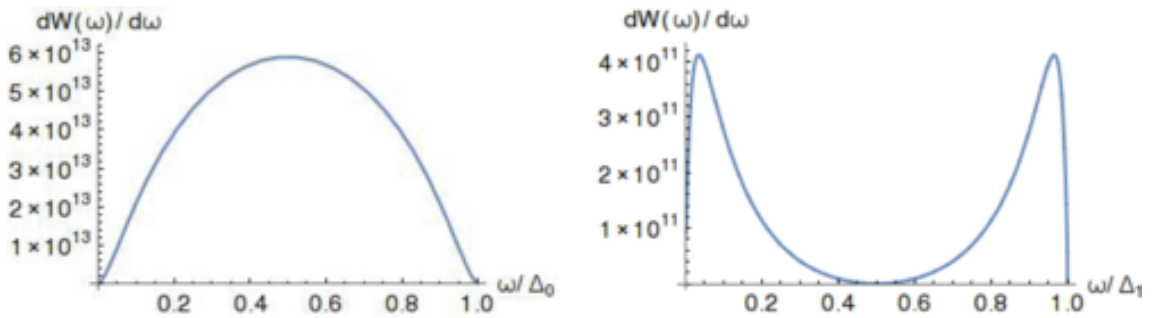
Теорема Ландау-Янга [35], [36] наравне с конденсатом Бозе-Эйнштейна - одно из наиболее ярких подтверждений статистики Бозе-Эйнштейна для частиц с целочисленным спином. Эта теорема запрещает двум фотонам находиться в квантовомеханическом состоянии с полным моментом равным единице.

Одним из примеров в физике высоких энергий является невозможность двухфотонного распада Z^0 бозона (нейтральная частица со спином 1). Ещё одним проявлением теоремы Ландау-Янга является запрет на двухфотонный аннигиляционный распад ортопозитрония (также частица со спином 1). Однако оба этих процесса прежде всего запрещены законом сохранения зарядовой чётности. Так как позитроний представляет истинно нейтральную частицу (совпадает сама с собой при зарядовом сопряжении), он имеет определённую зарядовую чётность [66], связанную со значением полного спина S : парапозитроний ($S = 0$) зарядово положительный, ортопозитроний ($S = 1$) зарядово отрицательный. Так как зарядовая чётность системы N_γ фотонов эквивалентна $(-1)^{N_\gamma}$ [28], парапозитроний не может распадаться на чётное число фотонов. Z^0 как зарядово отрицательная частица также не может распадаться на чётное число фотонов.

Похожая ситуация возникает и в атомной физике. Расчёты двухфотонных распадов в гелиеподобных ионах, показывают, что переходы из синглета $2^1S_0 \equiv (1s2s)^1S_0$ и триплета $2^3S_1 \equiv (1s2s)^3S_1$ в основное $1^1S_0 \equiv (1s)^2^1S_0$ состояние имеют существенное различие функций распределения излучаемых фотонов по частоте [78], [79]. Вероятность двухфотонного распада из триплёта обращается в ноль, когда частоты излучённых фотонов равны (см. Рис. 11). Релятивистские расчёты этих переходов были выполнены в работе [20].

В отличие от позитрония двухэлектронные ионы не имеют определённой зарядовой чётности. Атом гелия также не является истинно нейтральной частицей и не имеет зарядовой чётности. Поэтому, только спин-статистические свойства системы ответственны за специфические правила отбора в этом случае. Их связь с теоремой Ландау-Янга и статистикой Бозе-Эйнштейна впервые была рассмотрена в работе [37], где был установлен предел на нарушение Спин-Статистической теоремы. Недавно этот предел был улучшен

Рис. 11: Функция распределения по частоте для двухфотонных переходов $(1s2s)^1S_0 \rightarrow (1s)^2^1S_0 + 2\gamma(E1)$ (левый график) и $(1s2s)^3S_1 \rightarrow (1s)^2^1S_0 + 2\gamma(E1)$ (правый график) в гелиеподобном уране ($Z = 92$). Вероятность перехода $\frac{dW}{d\omega}$ отложена в с^{-1} , частота ω в единицах ω/Δ_0 и ω/Δ_1 . Значения Δ_0 , Δ_1 определяются энергиями перехода $\Delta_0 = E(2^1S_0) - E(1^1S_0)$ и $\Delta_1 = E(2^3S_1) - E(1^1S_0)$, соответственно. Расчеты выполнены полностью релятивистски с дираковскими одноэлектронными волновыми функциями и релятивистскими выражениями для электромагнитных векторных потенциалов (фотонных волновых функций). Были использованы волновые функции Дирака для ядра описываемого распределением Ферми. Межэлектронным взаимодействием полностью пренебрегается; ожидаемая ошибка о $1/Z$ т.е. порядка 1% для $Z = 92$. Волновые функции состояний 1^1S_0 , 2^1S_0 и 2^3S_1 построены как Слейтеровский детерминант на одноэлектронных волновых функциях. Для суммирования по промежуточным состояниям применён метод В-сплайнов [49]. Вычисления проведены в двух калибровках.



в [38]. Проверка Спин-Статистических Правил Отбора (ССПО) в атомной физике для двухфотонных переходов с эквивалентными фотонами была проведена в [41]. Было показано, что распределение по частоте для перехода $2^3S_1 \rightarrow 1^1S_0 + 2\gamma$ с излучением $2E1$, $2M1$, $2E2$ фотонов имеет форму изображённую на Рис. 11 (правая часть), в то время как распределение для того же перехода с излучением имеет форму изображённую на Рис. 11 (левая часть). Также в работах [80], [81] было показано, что для двухфотонных переходов, подавленных Спин-Статистическими Правилами отбора, открываются дополнительные каналы распада обусловленные сверхтонким расщеплением или внешним магнитным полем. Сверхтонкое расщепление изменяет полное значение углового момента J_e электрона в атоме, а в магнитном поле угловой момент вообще не сохраняется. Поэтому в обоих случаях запрет на переход $J_e = 1 \rightarrow J_e = 0$ с излучением двух эквивалентных фотонов становится нестрогим.

В нашей работе [82] были сформулированы следующие ССПО для многофотонных переходов в атомах с излучением эквивалентных фотонов:

1) ССПО-1: Два эквивалентных фотона, участвующих в любом атомном переходе, могут иметь только чётные значения полного углового момента J

2) ССПО-2: Три эквивалентных дипольных фотона, участвующих в любом атомном переходе, могут иметь только нечётные значения полного углового момента $J = 1, 3,$

3) ССПО-3: Четыре эквивалентных дипольных фотона, участвующих в любом атомном переходе, могут иметь только чётные значения полного углового момента $J = 0, 2, 4.$

Теорема Ландау-Янга в случае атомных переходов соответствует ССПО-1 для двух фотонов $N_\gamma = 2$ мультипольности $j = 1$, т.е. для переходов $J_e = 1 \rightarrow J_e = 0$ или $J_e = 0 \rightarrow J_e = 1$ с излучением или поглощением двух фотонов. Оригинальная теорема Ландау-Янга не требует, чтобы фотоны были эквивалентны. Подразумевается, только что они распространяются не в одном и том же направлении. Тогда можно выбрать такую систему отсчёта в которой центр инерции системы двух фотонов покоится.

Кроме того, оригинальная теорема Ландау-Янга применена к процессам, когда начальная частица исчезает после распада и превращается в два фотона. Из закона сохранения энергии-импульса следует, что направления фотонов должны быть коллинеарными (противоположно направленными) и иметь одинаковую частоту. Полный угловой момент и пространственная чётность для этих фотонов определяются в системе покоя центра инерции двух фотонов. Эта система совпадает с системой покоя для исчезающей или аннигилирующей частицы. Для формулирования ССПО для двухфотонных переходов в атомах удобно использовать другую систему. Определим эквивалентные фотона как фотоны имеющие одинаковую частоту, угловой момент и чётность в системе покоя атома. В атомных процессах, излучающая частица (атом) не исчезает, происходит переход из одного состояния в другое, поэтому система покоя атома не совпадает с системой покоя центра инерции излучённых фотонов. Различие в определении полного углового момента и пространственной чётности в обеих системах будет важно в дальнейшем. Значение орбитального момента фотона, и соответственно значение полного углового момента зависит от выбора системы отсчёта.

По этим причинам ССПО-1, доказательство которого будет представлено ниже, для двухфотонных переходов, не совпадает полностью с оригинальной теоремой Ландау-Янга. В оригинальной формулировке двухфотонная система, после распада исходной (исчезающей), может принимать любые значения углового момента J кроме $J = 1.$

Результаты полученные в системе покоя центра инерции двух фотонов не могут быть применены к двухфотонным переходам в гелиеподобных ионах. Согласно ССПО-1 все нечётные значения полного углового момента системы двух эквивалентных фотонов за-

прецессы. Таким образом ССПО-1 накладывает более широкие ограничения чем обычная формулировка теоремы Ландау-Янга.

Кроме того теорема Ландау-Янга не применима к лазерным фотонам. Такие фотоны коллинеарны и сонаправлены и следовательно система покоя центра инерции для них не существует. В предлагаемом нами подходе можно рассматривать поглощение лазерных фотонов в системе покоя атома или иона. Хотя налетающие лазерные фотоны не имеют определённого полного момента для одного кванта в системе покоя поглощающего атома, фиксирование частоты излучения определяет начальное и конечное состояние в процессе поглощения. Полный электронный угловой момент J_e начального и конечного состояний определяет полный угловой момент фотона поглощаемого в переходе. В случае многофотонного поглощения полный угловой момент системы фотонов определяется векторной схемой сложения.

Перейдём к общему доказательству ССПО-1. Будем описывать фотон поглощённый и излучённый атомом волновыми функциями в импульсном пространстве $\vec{A}_{\omega jm}^{(s)*}(\vec{k})$ и $\vec{A}_{\omega jm}^{(s)}(\vec{k})$ соответственно [66]. Здесь ω частота фотона, jm - угловой момент и его проекция, \vec{k} - момент импульса, s - тип фотона - электрический ($s = E$) или магнитный ($s = M$). Угловой момент и тип фотона определяют его чётность P : $P = (-1)^j$ для $s = E$ и $P = (-1)^{j+1}$ для $s = M$. Введём также обозначение для векторной компоненты волновой функции фотона - $(\vec{A}_{\omega jm}^{(s)})_i$, где индекс i принимает значения $i = 1, 2, 3$. Для реальных поперечных E, M фотонов индекс i принимает два значения $i = 1, 2$, в то время как $i = 3$ соответствует продольной компоненте, которая для E, M фотонов отсутствует. Каждая компонента этих волновых функций является собственным состоянием оператора полного углового момента одного фотона

$$\hat{j}^2 (\vec{A}_{\omega jm}^{(s)})_i = j(j+1) (\vec{A}_{\omega jm}^{(s)})_i, \quad (5.1)$$

$$\hat{j}_z (\vec{A}_{\omega jm}^{(s)})_i = m (\vec{A}_{\omega jm}^{(s)})_i. \quad (5.2)$$

Волновая функция системы двух фотонов с одинаковой частотой может быть построена как симметризованное тензорное произведение

$$\begin{aligned} \left(\Phi_{\omega JM}^{s_1 s_2}(\vec{k}_1 \vec{k}_2) \right)_{i_1, i_2} = N \sum_{m_1 m_2} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{JM} \left[\left(\vec{A}_{\omega j_1 m_1}^{(s_1)}(\vec{k}_1) \right)_{i_1} \left(\vec{A}_{\omega j_2 m_2}^{(s_2)}(\vec{k}_2) \right)_{i_2} \right. \\ \left. + \left(\vec{A}_{\omega j_1 m_1}^{(s_1)}(\vec{k}_2) \right)_{i_2} \left(\vec{A}_{\omega j_2 m_2}^{(s_2)}(\vec{k}_1) \right)_{i_1} \right]. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Здесь индексы 1, 2 обозначают номер фотона (первый или второй), JM - полный угловой моменты и его проекция системы двух фотонов, $C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{JM}$ - коэффициенты Клебша-Гордана. Точное выражение нормировочного множителя N не важно для наших целей. Компоненты тензорной волновой функции (5.3) являются собственными состояниями оператора полного углового момента системы двух фотонов

$$\left(\hat{j}_1 + \hat{j}_2 \right)^2 \left(\Phi_{\omega JM}^{(s_1 s_2)} \right)_{i_1 i_2} = J(J+1) \left(\Phi_{\omega JM}^{(s_1 s_2)} \right)_{i_1 i_2} \quad (5.4)$$

и его проекция

$$\left(\hat{j}_{1z} + \hat{j}_{2z} \right) \left(\Phi_{\omega JM}^{(s_1 s_2)} \right)_{i_1 i_2} = M \left(\Phi_{\omega JM}^{(s_1 s_2)} \right)_{i_1 i_2}. \quad (5.5)$$

Требование статистики Бозе-Эйнштейна уже учтено в выражении (5.3) условием симметричности. Для эквивалентных фотонов положим $j_1 = j_2 = j$ и $s_1 = s_2 = s$. Тогда изменяя обозначения индексов суммирования $m_1 \leftrightarrow m_2$ во втором члене в квадратных скобках в (5.3) получаем следующее выражение

$$\left(\Phi_{\omega JM}^{s s}(\vec{k}_1 \vec{k}_2) \right)_{i_1, i_2} = N \sum_{m_1 m_2} \left(\vec{A}_{\omega j m_1}^{(s)}(\vec{k}_1) \right)_{i_1} \left(\vec{A}_{\omega j m_2}^{(s)}(\vec{k}_2) \right)_{i_2} \left[C_{j m_1 j m_2}^{JM} + C_{j m_2 j m_1}^{JM} \right]. \quad (5.6)$$

Учитывая симметрию коэффициентов Клебша-Гордана (для целых j_1, j_2):

$$C_{j_2 m_2 j_1 m_1}^{JM} = (-1)^{j_1 + j_2 + J} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{JM} \quad (5.7)$$

окончательно находим выражение для волновой функции системы двух эквивалентных фотонов

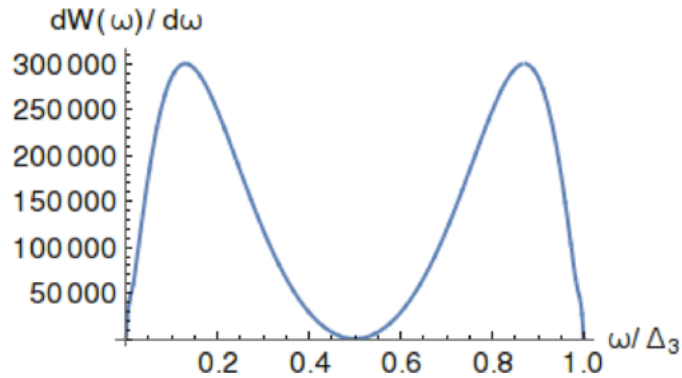
$$\left(\Phi_{\omega JM}^{s s}(\vec{k}_1 \vec{k}_2) \right)_{i_1, i_2} = N \left[1 + (-1)^{2j+J} \right] \sum_{m_1 m_2} C_{j_2 m_2 j_1 m_1}^{JM} \left(\vec{A}_{\omega j m_1}^{(s)}(\vec{k}_1) \right)_{i_1} \left(\vec{A}_{\omega j m_2}^{(s)}(\vec{k}_2) \right)_{i_2}. \quad (5.8)$$

Эта волновая функция обращается в ноль при нечётных значениях J . Таким образом, ССПО-1 запрещает все нечётные значения J для системы двух эквивалентных фотонов и как следствие соответствующие переходы. Согласно выражению (5.8) волновая функция для двух эквивалентных фотонов всегда имеет пространственную чётность $+1$.

ССПО-1 для перехода $2^3S_1 \rightarrow 1^1S_0 + 2\gamma(E1)$ с излучением двух эквивалентных фотонов в гелиеподобных ионах прямо следует из выражения (5.8). Для иллюстрации ССПО-1 и подкрепления аналитического доказательства проведён расчёт двухфотонной вероятности перехода и дифференциальной функции распределения фотонов по частоте для перехода $3^3D_3 \equiv (3d1s)^3D_3 \rightarrow 1^1S_0 + 2\gamma(E2)$ в гелиеподобном уране ($Z = 92$). Эти расчёты полностью аналогичны расчётам для перехода $2^3S_1 \rightarrow 1^1S_0 + 2\gamma(E1)$ (смотри Рис. 11)

Распределение по частоте для $3^3D_3 \rightarrow 1^1S_0 + 2\gamma E(2)$ перехода представлено на Рис 12.

Рис. 12: Функция распределения по частоте для двухфотонного перехода $(1s3d)^3D_3 \rightarrow (1s)^2^1S_0 + 2\gamma(E2)$ в гелиеподобном уране ($Z = 92$). Обозначения те же, что и на Рис. 11. Δ_3 обозначает разницу энергий $\Delta_3 = E(3^3D_3) - E(1^1S_0)$. Полная вероятность перехода $W_{2\gamma}(3^3D_3 - 1^1S_0) = 3.3299 \times 10^4 \text{ s}^{-1}$ для обеих калибровок ("длины" и "скорости").



Из Рис. 12 видно, что ССПО-1 запрещает двум эквивалентным фотонам излучённым в некотором атомном переходе иметь полный угловой момент $J = 3$. Как было отмечено выше, это не соответствует оригинальной формулировке теоремы Ландау-Янга. Эта теорема разрешает данное значение полного углового момента для двухфотонных распадов в которых частица дематериализуется в процессе излучения, что делает возможным применение системы отсчёта связанной с центром инерции системы двух фотонов.

Прежде чем перейти к доказательству ССПО-2 для системы трёх эквивалентных фотонов полезно провести аналогию со Спин-Статистическими Правилами для эквивалентных электронов в атомах. Значения полного электронного момента J_e разрешаются соответствующими ССПО в рамках jj схемы (связи (в этом случае ССПО основываются на статистике Ферми-Дирака)). Пусть $\psi_{n_j e l e m_e}(\vec{r})$ одноэлектронная дираковская волновая функция в координатном пространстве (спинорные индексы опустим), где n главное квантовое число,

j_e, m_e полный угловой момент электрона и его проекция, l_e орбитальный угловой момент, который определяет чётность состояния $P = (-1)^{l_e}$, \vec{r} - вектор координат. Тогда двухэлектронная атомная волновая функция (16-компонентный спинор) с полным электронным угловым моментом J_e и его проекцией M_e может быть представлена следующим образом

$$\psi_{n_1 n_2 J_e M_e}^{(l_{e_1} l_{e_2})}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = N \sum_{m_{e_1} m_{e_2}} C_{j_{e_1} m_{e_1} j_{e_2} m_{e_2}}^{J_e M_e} \left[\psi_{n_1 j_{e_1} l_{e_1} m_{e_1}}(\vec{r}_1) \psi_{n_2 j_{e_2} l_{e_2} m_{e_2}}(\vec{r}_2) - \psi_{n_1 j_{e_1} l_{e_1} m_{e_1}}(\vec{r}_2) \psi_{n_2 j_{e_2} l_{e_2} m_{e_2}}(\vec{r}_1) \right], \quad (5.9)$$

где N нормировочный множитель. Статистика Ферми-Дирака учтена в (5.9) через антисимметризацию волновой функции. Чётность двухэлектронной волновой функции определяется как $P = (-1)^{l_{e_1} + l_{e_2}}$. Для эквивалентных электронов (т.е. для электронов из одной незаполненной оболочки) $n_1 = n_2 = n$, $j_{e_1} = j_{e_2} = j_e$, $l_{e_1} = l_{e_2} = l_e$. Тогда, поступая аналогичным образом как и в случае с волновой функцией системы двух фотонов, находим

$$\psi_{nn J_e M_e}^{(l_e l_e)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = N [1 - (-1)^{2j_e + J_e}] \sum_{m_{e_1} m_{e_2}} C_{j_e m_{e_1} j_e m_{e_2}}^{J_e M_e} \psi_{n j_e l_e m_{e_1}}(\vec{r}_1) \psi_{n j_e l_e m_{e_2}}(\vec{r}_2). \quad (5.10)$$

Чётность этой функции всегда +1 как и для (5.8). Из выражения (5.10) следует, что ССПО разрешают для двух эквивалентных электронов только чётные значения J_e , также как это было в случае фотонов. Такая аналогия возникает благодаря тому что второй член в квадратных скобках выражения (5.10) имеет дополнительный множитель (-1) по сравнению с (5.8), но j_e принимает полуцелые значения в отличие от j .

В случае когда число эквивалентных электронов больше чем 2 полный угловой момент системы J_e может быть определён иным образом. Для этого необходимо выписать все наборы проекций $m_{e_1}, \dots, m_{e_{N_e}}$ которые не запрещены принципом Паули. Тогда для каждого набора должна быть определена полная проекция M_e и все значения M_e должны быть распределены между возможными значениями J_e . Эта длительная процедура (например для $j_e = 7/2$ и $N_e = 4$ будем иметь 70 различных наборов) лишь незначительно может быть упрощена применением теории групп. Результаты таких расчётов приведены в [83] и представлены в таблице 7.

Строго говоря, все значения в этой таблице следуют из принципа Паули. Однако, если использовать ССПО-1, ССПО-2 и т.д. для определения разрешённых значений J_e будет видно, что эти правила работают только до $j_e = 7/2$, $N_e = 4$. Они нарушаются при $J_e = 5$ для $j_e = 7/2$, $N_e = 4$. Таким образом применение ССПО-3 для эквивалентных электронов

Таблица 7: Разрешённые значения полного углового момента J_e для системы N_e эквивалентных электронов с угловым моментом j_e в рамках jj -схемы сложения. Результаты приведены только, для чётного числа N_e для проведения аналогии с системой эквивалентных фотонов. Числа в скобках показывают, сколько раз определенный полный момент J_e встречается среди разрешённых значений.

j_e	N_e	J_e
1/2	2	0
3/2	2	0, 2
5/2	2, 4	0, 2, 4
7/2	2, 6	0, 2, 4, 6
	4	0, 2(2), 4(2), 5, 6, 8

ограничено значением $j_e = 5/2$ для каждого отдельного электрона. Это обстоятельство следует сравнивать с ограничением на мультипольность фотонов $j = 1$ в ССПО-2 и ССПО-3.

5.2 Спин-Статистические Правила Отбора для системы трёх эквивалентных фотонов

В случае числа фотонов $N_\gamma > 2$ ССПО могут быть сформулированы только для дипольных фотонов. Рассмотрим конкретный пример и только затем перейдём к общему доказательству. Прежде всего необходимо получить полностью релятивистское выражение для вероятности трёхфотонного перехода в одно- и двухэлектронных МЗИ удобное для проведения численных расчётов. Ниже будем использовать релятивистские единицы $\hbar = c = 1$.

S -матричный элемент для процесса $i \rightarrow f + 3\gamma$ (i и f означают соответственно начальное и конечное состояние водородоподобного иона) выглядит как [66], [28], [24]

$$S_{fi}^{(3)} = (-ie)^3 \int d^4x_3 d^4x_2 d^4x_1 \bar{\psi}_f(x_3) \gamma_{\mu_3} A_{\mu_3}^{*(\vec{k}_3 \vec{e}_3)}(x_3) S(x_3, x_2) \gamma_{\mu_2} A_{\mu_2}^{*(\vec{k}_2 \vec{e}_2)}(x_2) S(x_2, x_1) \gamma_{\mu_1} A_{\mu_1}^{*(\vec{k}_1 \vec{e}_1)}(x_1) \psi_i(x_1) \quad (5.11)$$

Амплитуда процесса U связана с S -матрицей соотношением

$$S_{fi} = -2\pi i \delta(E_i - E_f - \omega_3 - \omega_2 - \omega_1) U_{fi}. \quad (5.12)$$

Дифференциальная вероятность перехода определяется следующим образом

$$\frac{dW_{i \rightarrow f}^{3\gamma}}{d\omega_3 d\omega_2 d\omega_1} = 2\pi \delta(E_i - E_f - \omega_3 - \omega_2 - \omega_1) \left| U_{fi}^{(3)} \right|. \quad (5.13)$$

Принимая во внимание все возможные перестановки фотонов и интегрируя выражение (5.13) по ω_3 , находим

$$\begin{aligned} \frac{dW_{i \rightarrow f}(\omega_1, \omega_2)}{d\omega_1 d\omega_2} &= \frac{\omega_3 \omega_2 \omega_1}{(2\pi)^5} \sum_{\vec{e}_3, \vec{e}_2, \vec{e}_1} \int d\vec{v}_1 d\vec{v}_2 d\vec{v}_3 \times \quad (5.14) \\ &\left| \sum_{n'n} \frac{(\vec{\alpha} \vec{A}_{\vec{e}_3, \vec{k}_3}^*)_{fn'}}{(E_{n'} - E_f - \omega_3)(E_n - E_f - \omega_3 - \omega_2)} + \sum_{n'n} \frac{(\vec{\alpha} \vec{A}_{\vec{e}_3, \vec{k}_3}^*)_{fn'}}{(E_{n'} - E_f - \omega_3)(E_n - E_f - \omega_3 - \omega_1)} + \right. \\ &\sum_{n'n} \frac{(\vec{\alpha} \vec{A}_{\vec{e}_1, \vec{k}_1}^*)_{fn'}}{(E_{n'} - E_f - \omega_1)(E_n - E_f - \omega_1 - \omega_3)} + \sum_{n'n} \frac{(\vec{\alpha} \vec{A}_{\vec{e}_1, \vec{k}_1}^*)_{fn'}}{(E_{n'} - E_f - \omega_1)(E_n - E_f - \omega_1 - \omega_2)} + \\ &\left. \sum_{n'n} \frac{(\vec{\alpha} \vec{A}_{\vec{e}_2, \vec{k}_2}^*)_{fn'}}{(E_{n'} - E_f - \omega_2)(E_n - E_f - \omega_2 - \omega_3)} + \sum_{n'n} \frac{(\vec{\alpha} \vec{A}_{\vec{e}_2, \vec{k}_2}^*)_{fn}}{(E_{n'} - E_f - \omega_2)(E_n - E_f - \omega_2 - \omega_1)} \right|^2, \end{aligned}$$

где $\omega_3 = E_i - E_f - \omega_2 - \omega_1$. Полная вероятность перехода определяется следующим образом

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{1}{3!} \frac{1}{2^{j_{ei} + 1}} \sum_{m_{ei}, m_{ef}} \iint \frac{dW_{i \rightarrow f}(\omega_1, \omega_2)}{d\omega_1 d\omega_2} d\omega_1 d\omega_2. \quad (5.15)$$

Используя разложение плоских волн по сферическим гармоникам в выражении (5.14), суммируя по поляризациям и интегрируя по направлениям вылета фотонов находим

$$\begin{aligned} \frac{dW_{i \rightarrow f}(\omega_1, \omega_2)}{d\omega_1 d\omega_2} &= \frac{\omega_3 \omega_2 \omega_1}{(2\pi)^5} \sum_{\lambda_3 \lambda_2 \lambda_1} \sum_{j_3 j_2 j_1} \sum_{m_3 m_2 m_1} \quad (5.16) \\ &\left| \sum_{n'n} \frac{(Q_{j_3 m_3 \omega_3}^{(\lambda_3)})_{fn'}}{(E_{n'} - E_f - \omega_3)(E_n - E_f - \omega_3 - \omega_2)} + \sum_{n'n} \frac{(Q_{j_3 m_3 \omega_3}^{(\lambda_3)})_{fn'}}{(E_{n'} - E_f - \omega_3)(E_n - E_f - \omega_3 - \omega_1)} + \right. \\ &\sum_{n'n} \frac{(Q_{j_1 m_1 \omega_1}^{(\lambda_1)})_{fn'}}{(E_{n'} - E_f - \omega_1)(E_n - E_f - \omega_1 - \omega_3)} + \sum_{n'n} \frac{(Q_{j_1 m_1 \omega_1}^{(\lambda_1)})_{fn'}}{(E_{n'} - E_f - \omega_1)(E_n - E_f - \omega_1 - \omega_2)} + \\ &\left. \sum_{n'n} \frac{(Q_{j_2 m_2 \omega_2}^{(\lambda_2)})_{fn'}}{(E_{n'} - E_f - \omega_2)(E_n - E_f - \omega_2 - \omega_3)} + \sum_{n'n} \frac{(Q_{j_2 m_2 \omega_2}^{(\lambda_2)})_{fn'}}{(E_{n'} - E_f - \omega_2)(E_n - E_f - \omega_2 - \omega_1)} \right|^2, \end{aligned}$$

где матричные элементы для интегралов в числителе записывается следующим образом [6], [84]

$$\begin{aligned} \left(Q_{j_\gamma m_\gamma \omega}^{(\lambda)} \right)_{n_\alpha j_{e\alpha} l_{e\alpha} m_{e\alpha}, n_\beta j_{e\beta} l_{e\beta} m_{e\beta}} &= (-1)^{j_{e\alpha} - m_{e\alpha}} \begin{pmatrix} j_{e\alpha} & j_\gamma & j_{e\beta} \\ -m_{e\alpha} & m_\gamma & m_{e\beta} \end{pmatrix} \times \quad (5.17) \\ (-i)^{j_\gamma + \lambda - 1} (-1)^{j_{e\alpha} - 1/2} \left(\frac{4\pi}{2j_\gamma + 1} \right)^{1/2} &[(2j_{e\alpha} + 1)(2j_{e\beta} + 1)]^{1/2} \begin{pmatrix} j_{e\alpha} & j_\gamma & j_{e\beta} \\ 1/2 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} \overline{M}_{n_\alpha l_{e\alpha} n_\beta l_{e\beta}}^{(\lambda, j_\gamma)}(\omega). \end{aligned}$$

Здесь j_γ , m_γ полный угловой момент фотона и его проекция, λ характеризует тип фотона: $\lambda = 1$ соответствует электрическому и $\lambda = 0$ соответствует магнитному фотонам. Индексы $n_\alpha, j_{e\alpha}, l_{e\alpha}, m_{e\alpha}$ представляют набор соответствующих дираковских квантовых чисел. Радиальные интегралы $\overline{M}_{n_\alpha l_{e\alpha} n_\beta l_{e\beta}}^{(\lambda, j_\gamma)}$ определяются следующим образом

$$\begin{aligned} \overline{M}_{n_\alpha l_{e\alpha} n_\beta l_{e\beta}}^{(1, j_\gamma)} &= \left[\left(\frac{j_\gamma}{j_\gamma + 1} \right)^{1/2} [(\kappa_\alpha - \kappa_\beta) I_{j_\gamma + 1}^+ + (j_\gamma + 1) I_{j_\gamma + 1}^-] - \left(\frac{j_\gamma + 1}{j_\gamma} \right)^{1/2} [(\kappa_\alpha - \kappa_\beta) I_{j_\gamma - 1}^+ - j_\gamma I_{j_\gamma - 1}^-] \right] \quad (5.18) \\ &\quad - G \left[(2j_\gamma + 1) J_{j_\gamma} + (\kappa_\alpha - \kappa_\beta) (I_{j_\gamma + 1}^+ - I_{j_\gamma - 1}^+) - j_\gamma I_{j_\gamma - 1}^- + (j_\gamma + 1) I_{j_\gamma + 1}^- \right], \end{aligned}$$

$$\overline{M}_{n_\alpha l_{e\alpha} n_\beta l_{e\beta}}^{(0, j_\gamma)} = \frac{2j_\gamma + 1}{[j_\gamma(j_\gamma + 1)]^{1/2}} (\kappa_\alpha + \kappa_\beta) I_{j_\gamma}^+, \quad (5.19)$$

$$I_{j_\gamma}^\pm = \int_0^\infty (g_\alpha f_\beta \pm f_\alpha g_\beta) j_{j_\gamma}(\omega r) dr, \quad (5.20)$$

$$J_{j_\gamma} = \int_0^\infty (g_\alpha g_\beta + f_\alpha f_\beta) j_{j_\gamma}(\omega r) dr, \quad (5.21)$$

g_α и f_α большая и малая компоненты радиальной Дираковской волновой функции [84], κ угловое квантовое число, ω частота фотона, j_{j_γ} - сферическая функция Бесселя, G калибровочный параметр электромагнитного потенциала. В наших расчётах применяются две различных формы электромагнитного потенциала соответствующие значениям $G = 0$ и $G = \sqrt{\frac{j_\gamma + 1}{j_\gamma}}$ [23]. Дальнейшие вычисления могут быть упрощены суммированием по всем проекциям. С этой целью введём определение радиальной части для заданной комбинации

фотонных мультиполей

$$S^{j_{n'}j_n}(i, j, k) = \sum_{l_{en'}, l_{en}} \sum_{n, n'} \frac{\overline{M}_{f, n'}^{(\lambda_i, j_{\gamma_i})}(\omega_i) \overline{M}_{n', n}^{(\lambda_j, j_{\gamma_j})}(\omega_j) \overline{M}_{n, i}^{(\lambda_k, j_{\gamma_k})}(\omega_k)}{\left(E_{n'j_{en'}l_{en'}} - E_{nfj_{ef}l_{ef}} - \omega_k - \omega_j\right) \left(E_{nj_{en}l_{en}} - E_{nfj_{ef}l_{ef}} - \omega_k\right)} \times \quad (5.22)$$

$$\Delta^{j_{en'}, j_{en}} \pi_f^{l_{en'}}(i) \pi_{n'}^{l_{en}}(j) \pi_n^{l_{ei}}(k),$$

где

$$\pi_k^l(t) = \begin{cases} 1 & \text{if } l_k + l + j_{\gamma_t} + \lambda_t = \text{odd} \\ 0 & \text{if } l_k + l + j_{\gamma_t} + \lambda_t = \text{even} \end{cases}, \quad (5.23)$$

$$\Delta^{j_{en'}, j_{en}}(i, j, k) = \frac{4\pi [j_{ef}, j_{en'}, j_{en}, j_{ei}]^{1/2}}{[j_{\gamma_i}, j_{\gamma_j}, j_{\gamma_k}]^{1/2}} \begin{pmatrix} j_{ef} & j_{\gamma_i} & j_{en'} \\ 1/2 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{en'} & j_{\gamma_j} & j_{en} \\ 1/2 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} \quad (5.24)$$

$$\times \begin{pmatrix} j_{en} & j_{\gamma_k} & j_{ei} \\ 1/2 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} \Theta(i, j, k)$$

и

$$\Theta(i, j, k) = [j_{en'}, j_{en}]^{1/2} \sum_{m_{en'}, m_{en}} (-1)^{m_{ei} + m_{ef} + 1} \begin{pmatrix} j_{ef} & j_{\gamma_i} & j_{en'} \\ -m_{ef} & m_{\gamma_i} & m_{en'} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{en'} & j_{\gamma_j} & j_{en} \\ -m_{en'} & m_{\gamma_j} & m_{en} \end{pmatrix} \quad (5.25)$$

$$\times \begin{pmatrix} j_{en} & j_{\gamma_k} & j_{ei} \\ -m_{en} & m_{\gamma_k} & m_{ei} \end{pmatrix}.$$

Здесь индексы i, j, k означают порядковый номер фотона, каждый из которых может принимать значения 1, 2, 3. Квадратная скобка $[j, k, \dots]$ есть сокращённое обозначение для $(2j + l)(2k + 1) \dots$

Окончательное выражение для вероятности трёхфотонного перехода в одноэлектронном ионе выглядит следующим образом

$$\frac{dW_{i \rightarrow f}(\omega_1, \omega_2)}{d\omega_1 d\omega_2} = \frac{\omega_3 \omega_2 \omega_1}{(2\pi)^5} \sum_{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3} \sum_{j_{\gamma_1}, j_{\gamma_2}, j_{\gamma_3}} \sum_{m_{\gamma_1}, m_{\gamma_2}, m_{\gamma_3}} \left| \sum_{j_{en}, j_{en'}} S^{j_{en'}, j_{en}}(1, 2, 3) + (5 \text{ перестановок}) \right|^2 \quad (5.26)$$

Перестановки в выражении (5.26) понимаются как перестановки индексов 1, 2, 3. Суммирование по всем проекциям в (5.26) может быть выполнено численно, для каждого значения соответствующего углового момента.

Перейдём к выводу выражения для вероятности трёхфотонного перехода в двухэлектронных ионах в приближении невзаимодействующих электронов. В таком приближении двухэлектронная волновая функция может быть представлена в виде детерминанта Слейтера

$$\Psi_{J_e M_e}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{m_{e_1}, m_{e_2}} C_{J_{e_1} m_{e_1} J_{e_2} m_{e_2}}^{J_e M_e} \begin{vmatrix} \psi_{n_{e_1} j_{e_1} l_{e_1} m_{e_1}}(\vec{r}_1) & \psi_{n_{e_1} j_{e_1} l_{e_1} m_{e_1}}(\vec{r}_2) \\ \psi_{n_{e_2} j_{e_2} l_{e_2} m_{e_2}}(\vec{r}_1) & \psi_{n_{e_2} j_{e_2} l_{e_2} m_{e_2}}(\vec{r}_2) \end{vmatrix}. \quad (5.27)$$

Тогда двухэлектронный матричный элемент может быть сведен к одноэлектронному [47]

$$\begin{aligned} & \langle n_{1\alpha} n_{2\alpha} J_{e\alpha} M_{e\alpha} | Q_{j_\gamma m_\gamma}^{(\lambda)} | n_{1\beta} n_{2\beta} J_{e\beta} M_{e\beta} \rangle = (-1)^{J_{e\alpha} - M_{e\alpha} + j_{e_1\alpha} + j_{e_2\alpha}} \quad (5.28) \\ & \times [J_{e\alpha} J_{e\beta}]^{1/2} \begin{pmatrix} J_{e\alpha} & j_\gamma & J_{e\beta} \\ -M_{e\alpha} & m_\gamma & M_{e\beta} \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} J_{e\alpha} & j_\gamma & J_{e\beta} \\ j_{e_1\alpha} & j_{e_2} & j_{e_1\beta} \end{Bmatrix} \langle n_{1\alpha} j_{e_1\alpha} || Q_{j_\gamma \omega}^{(\lambda)} || n_{1\beta} j_{e_1\beta} \rangle, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle n_{1\alpha} j_{e_1\alpha} || Q_{j_\gamma \omega}^{(\lambda)} || n_{1\beta} j_{e_1\beta} \rangle &= (-i)^{j_\gamma + \lambda - 1} (-1)^{j_{e_1\alpha} - 1/2} \left(\frac{4\pi}{2j_\gamma + 1} \right)^{1/2} [j_{e_1\alpha}, j_{e_1\beta}]^{1/2} \quad (5.29) \\ & \times \begin{pmatrix} j_{e_1\alpha} & j_\gamma & j_{e_1\beta} \\ 1/2 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} \overline{M}_{\alpha\beta}^{(\lambda, j_\gamma)}(\omega). \end{aligned}$$

Окончательно выражение для вероятности трёхфотонного перехода в двухэлектронном ионе имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{dW_{if}}{d\omega_2 d\omega_1} &= \frac{\omega_3 \omega_2 \omega_1}{(2\pi)^5} \sum_{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3} \sum_{j_{\gamma_1}, j_{\gamma_2}, j_{\gamma_3}} \sum_{m_{\gamma_1}, m_{\gamma_2}, m_{\gamma_3}} \quad (5.30) \\ & \times \left| \sum_{J_{e_{n'}}, J_{e_n}} \sum_{j_{e_1 n'}, j_{e_1 n}} S^{J_{e_{n'}}, J_{e_n} j_{e_1 n'} j_{e_1 n}}(1, 2, 3) + (5 \text{ перестановок}) \right|^2, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} & S^{J_{e_{n'}}, J_{e_n} j_{e_1 n'} j_{e_1 n}}(i, j, k) = \quad (5.31) \\ & \sum_{l_{e_1 n'}, l_{e_1 n}} \sum_{n, n'} \frac{\overline{M}_{f, n'}^{(\lambda_i, j_{\gamma_i})}(\omega_i) \overline{M}_{n', n}^{(\lambda_j, j_{\gamma_j})}(\omega_j) \overline{M}_{n, i}^{(\lambda_k, j_{\gamma_k})}(\omega_k)}{\left(E_{n' j_{e_1 n'} l_{e_1 n'}} - E_{n f j_{e_1 f} l_{e_1 f}} - \omega_k - \omega_j \right) \left(E_{n j_{e_1 n} l_{e_1 n}} - E_{n f j_{e_1 f} l_{e_1 f}} - \omega_k \right)} \\ & \quad \times \Delta^{J_{e_{n'}}, J_{e_n} j_{e_1 n'} j_{e_1 n}}(i, j, k) \pi_f^{l_{e_1 n'}}(i) \pi_n^{l_{e_1 n}}(j) \pi_n^{l_{e_1 i}}(k), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta^{J_{e_{n'}}, J_{e_n}, j_{e_1 n'}, j_{e_1 n}}(i, j, k) &= \frac{(4\pi)^{3/2} [j_{e_1 f}, j_{e_1 n'}, j_{e_1 n}, j_{e_1 i}]^{1/2}}{[j_{\gamma_i}, j_{\gamma_j}, j_{\gamma_k}]^{1/2}} \begin{pmatrix} j_{e_1 f} & j_{\gamma_i} & j_{e_1 n'} \\ 1/2 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} \\ &\times \begin{pmatrix} j_{e_1 n'} & j_{\gamma_j} & j_{e_1 n} \\ 1/2 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{e_1 n} & j_{\gamma_k} & j_{e_1 i} \\ 1/2 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} [j_{e_1 n'}, j_{e_1 n}]^{1/2} [J_{e_{n'}}, J_{e_n}]^{1/2} \begin{Bmatrix} J_{e_f} & j_{\gamma_i} & J_{e_{n'}} \\ j_{e_1 n'} & j_{e_2} & j_{e_1 f} \end{Bmatrix} \\ &\times \begin{Bmatrix} J_{e_{n'}} & j_{\gamma_j} & J_{e_n} \\ j_{e_1 n} & j_{e_2} & j_{e_1 n'} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J_{e_n} & j_{\gamma_k} & J_{e_i} \\ j_{e_1 i} & j_{e_2} & j_{e_1 n} \end{Bmatrix} \Theta(i, j, k) \end{aligned} \quad (5.32)$$

и

$$\begin{aligned} \Theta(i, j, k) &= [J_{e_{n'}}, J_{e_n}]^{1/2} \sum_{M_{e_{n'}}, M_{e_n}} (-1)^{M_{e_f} + M_{e_{n'}} + M_{e_n}} \begin{pmatrix} J_{e_f} & j_{\gamma_i} & J_{e_{n'}} \\ -M_{e_f} & m_{\gamma_i} & M_{e_{n'}} \end{pmatrix} \\ &\times \begin{pmatrix} J_{e_{n'}} & j_{\gamma_j} & J_{e_n} \\ -M_{e_{n'}} & m_{\gamma_j} & M_{e_n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_{e_n} & j_{\gamma_k} & J_{e_i} \\ -M_{e_n} & m_{\gamma_k} & M_{e_i} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (5.33)$$

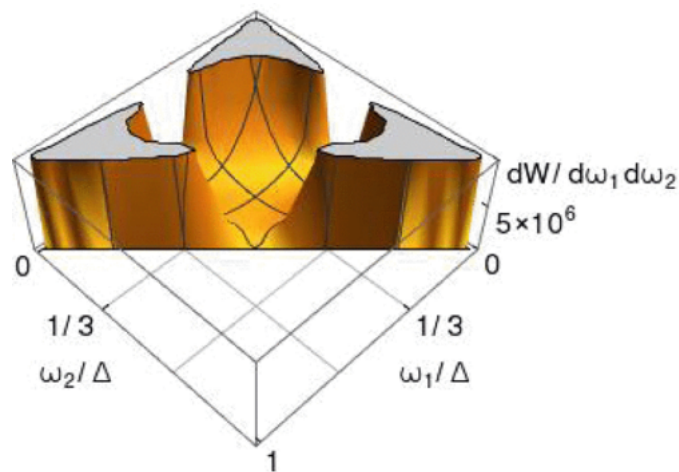
Таким образом в приближении невзаимодействующих электронов задача свелась к вычислению одноэлектронных матричных элементов.

В качестве примера, демонстрирующего ССПО-2 для трёх эквивалентных фотонов, рассмотрим переход $2^3P_2 \rightarrow 1^1S_0 + 3\gamma(E1)$ в гелиеподобном ионе и покажем, что значение полного углового момента $J = 2$ запрещено для трёх одинаковых дипольных фотонов. Это переход проходит по трём каналам распада. Рассмотрим каждый в отдельности: 1) $2^3P_2 \rightarrow n^3S_1 + \gamma(E1) \rightarrow n^3P_1 [n^1P_1] + 2\gamma(E1) \rightarrow 1^1S_0 + 3\gamma(E1)$; этот канал запрещён так как двухфотонный переход $n^3S_1 \rightarrow 1^1S_0 + 2\gamma(E1)$ невозможен по ССПО-1, 2) $2^3P_2 \rightarrow n^3D_1 + \gamma(E1) \rightarrow n^3P_1 [n^1P_1] + 2\gamma(E1) \rightarrow 1^1S_0 + 3\gamma(E1)$; это канал также запрещён в силу ССПО-1 в переходе $n^3D_1 \rightarrow 1^1S_0 + 2\gamma(E1)$ 3) $2^3P_2 \rightarrow n^3D_2 [n^1D_2] + \gamma(E1) \rightarrow n^3P_1 [n^1P_1] + 2\gamma(E1) \rightarrow 1^1S_0 + 3\gamma(E1)$. Состояния примешанные спин-орбитальным взаимодействием выделены квадратными скобками. Третий канал также обращается в ноль для трёх эквивалентных фотонов, однако это не так очевидно как в случае первых двух.

Тем не менее, используя точное аналитическое выражение для вероятности трёхфотонного перехода (5.30) можно установить, что для трёх дипольных фотонов одинаковой частоты ($\omega_1 = \omega_2 = \omega_3$) вероятность обращается в ноль. Это можно проделать аналитически, однако более наглядным может послужить численный расчёт для конкретного МЗИ. Дифференциальная плотность вероятности для перехода $2^3P_2 \rightarrow 1^1S_0 + 3\gamma(E1)$ в гелиеподобном уране $Z = 92$ представлена на Рис. 13. Важно отметить, что в канале 1) есть резонанс (ситуация, когда один из энергетических знаменателей обращается в ноль). Наличие про-

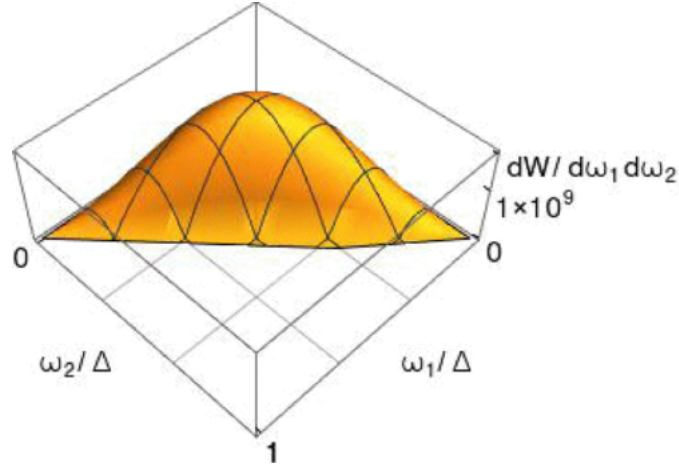
межуточного резонансного состояния 2^3S_1 в сумме по всем промежуточным состояниям в выражении для вероятности (5.31) приводит к появлению узкого "гребня" с пиками в распределении по частоте $\frac{dW(\omega_1, \omega_2)}{d\omega_1 d\omega_2}$ начинающегося в точке $\omega_1 = E(2^3P_2) - E(2^3S_1)$ по оси ω_1 и тянущегося параллельно оси ω_2 ; так как амплитуда процесса симметрична относительно перестановки частот фотонов, то можно сказать, что этот "гребень" также начинается из точки $\omega_2 = E(2^3P_2) - E(2^3S_1)$ и тянется параллельно оси ω_1 . Этот "гребень" не влияет на ССПО-2, так как он не соответствует случаю трёх эквивалентных фотонов. На Рис. 13 можно видеть характерный провал до нуля в распределении по частоте в точке $(\omega_1 = \omega_2 = \omega_3)$, являющийся следствием ССПО-2. Для сравнения на Рис. 14 представлено дифференциальное распределение вероятности для перехода $2^3P_1 \rightarrow 1^1S_0 + 3\gamma(E1)$ в гелиеподобном уране не запрещённого по ССПО-2. Максимум распределения приходится, в отличие от Рис. 13 на точку $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3$. В этом переходе полный угловой момент $J = 1$ не запрещён для трёх эквивалентных фотонов.

Рис. 13: Трёхмерная функция распределения по частоте для перехода $2^3P_2 \rightarrow 1^1S_0 + 3\gamma(E1)$ в гелиеподобном уране ($Z = 92$). По вертикальной оси отложена вероятность перехода $\frac{dW}{d\omega_1 d\omega_2}$ в с^{-1} ; по горизонтальным осям отложены частоты фотонов в единицах $\omega_1/\Delta_2, \omega_2/\Delta_2$ где Δ_2 обозначает разницу энергий $\Delta_2 = E(2^3P_2) - E(1^1S_0)$. Точка, в которой вероятность обращается в ноль имеет координаты $\omega_1/\Delta_2 = \omega_2/\Delta_2 = 1/3$, что соответствует ССПО-2. Межэлектронное взаимодействие не учитывалось



Аналогичным образом (используя выражение (5.30)) можно проверить ССПО-2 для перехода $3^3D_2 \rightarrow 1^1S_0 + 3\gamma(M1)$. Однако, как уже упоминалось ранее, значение полного углового момента $J = 2$ не является запрещённым для перехода $3^3D_2 \rightarrow 1^1S_0 + 3\gamma(E2)$. Также не запрещено значение $J = 4$ для $4^3F_4 \rightarrow 1^1S_0 + 3\gamma(M2)$. Всё это касается и перехода $2^1S_0 \rightarrow 1^1S_0 + 3\gamma(E2)$ так как значение $J = 0$ разрешено для трёхфотонных систем. Во всех этих случаях значение полного углового момента системы фотонов J фиксируется начальным

Рис. 14: Трёхмерная функция распределения по частоте для перехода $2^3P_1 \rightarrow 1^1S_0 + 3\gamma(E1)$ в гелиеподобном уране ($Z = 92$). По вертикальной оси отложена вероятность перехода $\frac{dW}{d\omega_1 d\omega_2}$ в s^{-1} ; по горизонтальным осям отложены частоты фотонов в единицах ω_1/Δ_1 , ω_2/Δ_1 , где Δ_1 обозначает разницу энергий $\Delta_2 = E(2^3P_1) - E(1^1S_0)$. Межэлектронное взаимодействие не учитывалось. Полная вероятность перехода $W_{3\gamma}(2^3P_1 - 1^1S_0) = 13.825270 \times 10^6 s^{-1}$, $W_{3\gamma}(2^3P_1 - 1^1S_0) = 13.825246 \times 10^6 s^{-1}$ в калибровках "длины" и "скорости" соответственно.



J_{e_i} и конечным J_{e_f} значениями полного электронного углового момента. Все эти примеры подтверждают ССПО-2 для дипольных фотонов.

В некоторых случаях, например в переходе $2^1S_0 \rightarrow 1^1S_0 + 3\gamma(E1)$, значение $J = 0$ запрещено не в силу ССПО-1: согласно ССПО-1 два одинаковых электрических дипольных фотона $E1$ могут иметь только полный угловой момент 0, 2. Добавляя угловой момент 1 третьего фотона $E1$ к первым двум, невозможно получить полный угловой момент $J = 0$ для системы трёх фотонов. Рассмотрим ситуацию с тремя квадрупольными фотонами. Добавляя третий фотон $E2$ с угловым моментом 2 к первым двум можно получить значение $J = 0$ полного углового момента системы трёх фотонов. Прямая проверка выражения для вероятности перехода для случая $J = 0$ также показывает, что $J = 0$ не запрещено в этом случае.

Перейдём теперь к наиболее общему доказательству ССПО-2, не связанным с прямым вычислением амплитуд вероятностей перехода. С этой целью будем использовать уравнения на гениалогические коэффициенты, обычно применяемые в случае статистики Ферми-Дирака для построения волновых функций системы эквивалентных электронов (смотри [83]).

Рассмотрим систему трёх фотонов одинаковой частоты ω , с одинаковым угловым моментом $j_1 = j_2 = j_3 = j$ и одного и того же типа $s_1 = s_2 = s_3 = s$. На первых этапах доказательства будем различать эти наборы квантовых чисел и и положим их равными другу другу позже. Выберем возможную схему сложения моментов фотонов, в которой сперва

рассматривается пара фотонов с индексами $i = 1, 2$ и затем к ней добавляется третий фотон с индексом $i = 3$. Волновая функция пары фотонов $i = 1, 2$ строится согласно выражению (5.8) и затем третий фотон $i = 3$ добавляется согласно стандартной схеме сложения моментов с целью получить волновую функцию системы трёх фотонов с полным моментом J и проекцией M . Обозначим эту волновую функцию как $\Phi_{\omega JM}(j_1 j_2 [J'] j_3)$, где угловой момент J' в квадратных скобках принимает одно из возможных промежуточных значений углового момента для системы двух фотонов. Волновая функция $\Phi_{\omega JM}(j_1 j_2 [J'] j_3)$ симметризована относительно перестановки индексов 1, 2 и поэтому для эквивалентных фотонов J' принимает только значения разрешённые ССПО-1. Разложим эту волновую функцию по волновым функциям, соответствующим другой схеме сложения моментов $\Phi_{\omega JM}(j_2 j_3 [J'] j_1)$. Последняя волновая функция не симметризована относительно перестановки фотонов 2, 3. Такое разложение имеет вид

$$\Phi_{\omega JM}(j_1 j_2 [J'] j_3) = \sum_{J''} (j_2 j_3 [J''] j_1 J | j_1 j_2 [J'] j_3 J) \Phi_{\omega JM}(j_2 j_3 [J''] j_1), \quad (5.34)$$

где $(j_2 j_3 [J''] j_1 J | j_1 j_2 [J'] j_3 J)$ коэффициенты Рака, связанные с 6j-символом соотношением

$$(j_2 j_3 [J''] j_1 J | j_1 j_2 [J'] j_3 J) = (-1)^{j_1 + j_2 + j_3 + J} \sqrt{(2J' + 1)(2J'' + 1)} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J' \\ j_3 & J & J'' \end{Bmatrix}. \quad (5.35)$$

Суммирование в (5.34) проходит по всем значениям J'' разрешённым векторной схемой сложения двух угловых моментов j_2, j_3 . Чтобы восстановить симметрию волновой функции относительно переменных 2, 3, согласно ССПО-1, необходимо оставить только чётные значения J'' в этом разложении. Для этого заменим волновую функцию (5.34) линейной комбинацией

$$\Phi_{\omega JM}(j_1 j_2 j_3) = \sum_{J'} (j_1 j_2 [J'] j_3 J | j_1 j_2 j_3 J) \Phi_{\omega JM}(j_1 j_2 [J'] j_3), \quad (5.36)$$

где $(j_1 j_2 [J'] j_3 J | j_1 j_2 j_3 J)$ - гениалогический коэффициент, определяемый из условия необходимости обращения в ноль всех членов с нечётным значением J'' в разложении

$$\Phi_{\omega JM}(j_1 j_2 j_3) = \sum_{J'} (j_1 j_2 [J'] j_3 J | j_1 j_2 j_3 J) \sum_{J''} (j_2 j_3 [J''] j_1 J | j_1 j_2 [J'] j_3 J) \Phi_{\omega JM}(j_2 j_3 [J''] j_1). \quad (5.37)$$

Так как наличие нечётных значений J'' в волновой функции (5.34) противоречит требованиям симметрии относительно перестановки 2, 3, отсутствие этих членов полностью восстанавливает нужную симметрию. Легко проверить, что любая функция трёх переменных 1, 2, 3, симметричная относительно переменных 1, 2 и 2, 3, будет также симметрична относительно 1, 3. Таким образом, отсутствие нечётных значений J'' в разложении (5.37) делает волновую функцию $\Phi_{\omega JM}(j_1 j_2 j_3)$ полностью симметричной относительно перестановки всех фотонов.

Условие отсутствия нечётных значений J'' в разложении (5.37) сводится к системе уравнений

$$\sum_{J'} (j_1 j_2 [J'] j_3 J) (j_1 j_2 j_3 J) (j_2 j_3 [J''] j_1 J) (j_1 j_2 [J'] j_3 J) = 0 \quad (5.38)$$

для всех возможных нечётных значений J'' . Суммирование в (5.38) проходит по всем возможным чётным значениям J' для системы двух фотонов. Полагая теперь $j_1 = j_2 = j_3 = j$ перепишем эту систему следующим образом

$$\sum_{J'} (jj[J']jJ) (jjjJ) (jj[J'']jJ) (jj[J']jJ) = 0. \quad (5.39)$$

Для удобства введём краткое обозначение для генеалогических коэффициентов

$$(jj[J']jJ) (jjjJ) \equiv C_{J' J}^j. \quad (5.40)$$

Принимая во внимание (5.35), уравнение (5.39) сводится к

$$\sum_{J'} C_{J' J}^j \sqrt{2J'+1} \begin{Bmatrix} j & j & J' \\ j & J & J'' \end{Bmatrix} = 0. \quad (5.41)$$

Положим для дипольных фотонов $j = 1$ и согласно ССПО-1 имеем возможные значения $J' = 0, 2$, $J'' = 1$. Это приводит к уравнению на генеалогические коэффициенты

$$C_{0 J}^1 \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & J & 1 \end{Bmatrix} + C_{2 J}^1 \sqrt{5} \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & J & 1 \end{Bmatrix} = 0. \quad (5.42)$$

В этом случае имеем 1 уравнение для двух коэффициентов $C_{0 J}^1$ и $C_{2 J}^1$. Вообще говоря условие нормировки для (5.36) будет давать ещё одно уравнение, но оно не является необ-

ходимым для наших целей. Первый $6j$ -символ в выражении (5.42) равен

$$\left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & J & 1 \end{matrix} \right\} = (-1)^J \frac{1}{\sqrt{3(2J+1)}} \delta_{J1}. \quad (5.43)$$

Согласно правилам сложения углового момента, возможные значения углового момента J системы трёх дипольных фотонов $J = 1, 2, 3$. Если положить $J = 1$, выражение (5.42) будет всегда иметь решение с не равными нулю коэффициентами C_{01}^1, C_{21}^1 . Однако, полагая $J = 2$ приходим к равенству

$$C_{22}^1 \sqrt{5} \left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{matrix} \right\} = 0. \quad (5.44)$$

Так как $6j$ -символ в (5.44) не равен нулю, следует, что $C_{22}^1 = 0$. Это означает, что для $J = 2$ в волновой функции (5.37) значение $J' = 2$ для двухфотонной подсистемы должно отсутствовать. Это противоречит ССПО-1 и следовательно наличие значения $J = 2$ для полного углового момента системы трех фотонов, не согласуется с ССПО-1 для системы двух фотонов. Таким образом, значение $J = 2$ запрещено для системы трех эквивалентных дипольных фотонов. Остаётся рассмотреть случай $J = 3$. Для $J = 3$ выражение (5.42) принимает вид

$$C_{23}^1 \sqrt{5} \left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 3 & 1 \end{matrix} \right\} = 0. \quad (5.45)$$

Однако,

$$\left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 3 & 1 \end{matrix} \right\} = 0 \quad (5.46)$$

и коэффициенты C_{23}^1 отличны от нуля, но произвольны. Это не противоречит ССПО-1 и значение $J = 3$ для полного углового момента системы трёх эквивалентных дипольных фотонов допускается. Таким образом ССПО-2 доказаны.

5.3 Спин-Статистические Правила Отбора для системы четырёх эквивалентных фотонов

Особую важность имеет проверка ССПО для 4-фотонных переходов и особенно для высших значений J , так как фермионный аналог для ССПО нарушается, как было показано в §5.1, для 4-электронных систем при $J_e = 5$. Поступая таким же образом, как и в случае доказательства ССПО-2, рассмотрим две схемы связи для построения волновой функции системы 4-х фотонов. Первая схема соответствует волновой функции

$$\Phi_{\omega JM}(j_1 j_2 [J_{12}] j_3 j_4 [J_{34}] JM), \quad (5.47)$$

где первая пара моментов складывается в промежуточный момент J_{12} , затем вторая пара $j_3 j_4$ в промежуточный момент J_{34} и окончательно два промежуточных момента J_{12} и J_{34} складываются в полный угловой момент системы 4-х фотонов J с проекцией M . Будем полагать, что волновая функция (5.47) симметрична относительно перестановки переменных 1, 2 и 3, 4. Тогда согласно ССПО-1 моменты J_{12} и J_{34} могут принимать только чётные значения. Другая схема сложения может быть представлена волновой функцией

$$\Phi_{\omega JM}(j_1 j_3 [J_{13}] j_2 j_4 [J_{24}] JM). \quad (5.48)$$

В этой волновой функции мы не предполагаем симметричность относительно перестановки переменных 1, 3 и 2, 4. Разложим волновую функцию (5.47) по функциям (5.48):

$$\Phi_{\omega JM}(j_1 j_2 [J_{12}] j_3 j_4 [J_{34}] JM) = \sum_{J_{13} J_{24}} (j_1 j_3 [J_{13}] j_2 j_4 [J_{24}] J | j_1 j_2 [J_{12}] j_3 j_4 [J_{34}] J) \Phi_{\omega JM}(j_1 j_3 [J_{13}] j_2 j_4 [J_{24}] JM) \quad (5.49)$$

где $(j_1 j_3 [J_{13}] j_2 j_4 [J_{24}] J | j_1 j_2 [J_{12}] j_3 j_4 [J_{34}] J)$ коэффициенты Фано, связанные с $9j$ -символами соотношением

$$(j_1 j_2 [J_{12}] j_3 j_4 [J_{34}] J | j_1 j_3 [J_{13}] j_2 j_4 [J_{24}] J) = \sqrt{(2J_{12} + 1)(2J_{34} + 1)(2J_{13} + 1)(2J_{24} + 1)} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{Bmatrix}. \quad (5.50)$$

В (5.49) в разложении по J_{13} , J_{24} разрешены все значения угловых моментов J_{13} J_{24} . Чтобы симметризовать волновую функцию уравнения (5.49) по отношению к перестановке

переменных 1,3 и по отношению к перестановке 2,4, мы должны заменить её линейной комбинацией

$$\begin{aligned} \Phi_{\omega JM}(j_1 j_2 j_3 j_4) &= \sum_{J_{12} J_{34}} (j_1 j_2 [J_{12}] j_3 j_4 [J_{34}] J) \Phi_{\omega JM}(j_1 j_2 [J_{12}] j_3 j_4 [J_{34}] JM) = \\ &\sum_{J_{12} J_{34}} \sum_{J_{12} J_{34}} (j_1 j_2 [J_{12}] j_3 j_4 [J_{34}] J) (j_1 j_3 [J_{13}] j_2 j_4 [J_{24}] J) j_1 j_2 [J_{12}] j_3 j_4 [J_{34}] J \times \\ &\Phi_{\omega JM}(j_1 j_3 [J_{13}] j_3 j_4 [J_{24}] JM), \end{aligned} \quad (5.51)$$

где $(j_1 j_2 [J_{12}] j_3 j_4 [J_{34}] J) j_1 j_2 j_3 j_4 J$ генеалогические коэффициенты для системы четырёх частиц (бозонов). Для симметризации волновой функции уравнения (5.51) по отношению к перестановке переменных 1,3 и по отношению к перестановке 2,4 необходимо потребовать, чтобы члены с нечётными значениями J_{13} , J_{24} отсутствовали при суммировании по J_{13} , J_{24} в уравнении (5.51). Это требование приводит к системе уравнений для генеалогических коэффициентов:

$$\sum_{J_{13} J_{24}} (j_1 j_2 [J_{12}] j_3 j_4 [J_{34}] J) j_1 j_2 j_3 j_4 J (j_1 j_3 [J_{13}] j_2 j_4 [J_{24}] J) j_1 j_2 [J_{12}] j_3 j_4 [J_{34}] J = 0, \quad (5.52)$$

где J_{13} , J_{24} принимают только нечётные значения, а суммирование распространяется на чётные значения J_{13} , J_{24} . Когда эти уравнения выполняются, мы можем рассматривать волновую функцию (5.51), как симметричную относительно перестановок переменных 1,3 (друг с другом) и переменных 2,4 (друг с другом). Примем следующее утверждение: если любая функция 4 переменных симметрична по отношению к перестановкам пар (1,2), (3,4), (1,3) и (2,4), то она полностью симметрична. В самом деле, зафиксируем например переменную 4 и рассмотрим перестановки в группе переменных 1,2,3. Если функция симметрична относительно перестановки 1,2 и перестановки 1,3 она будет симметричным также по отношению к перестановке 2,3, как это следует из симметризации функций трёх переменных. Так, мы можем доказать симметрию по отношению к любой паре переменных. Таким образом, волновая функция четырёх фотонов, построенных, как описано выше, будет полностью симметрична, то есть будет подчиняться статистике Бозе-Эйнштейна.

Полагая для эквивалентных фотонов $j_1 = j_2 = j_3 = j_4 = j$ и используя сокращённые обозначения для генеалогических коэффициентов

$$(jj[J_{12}]jj[J_{34}]J)jjjjJ \equiv G_{J_{12}, J_{34}, J}^j \quad (5.53)$$

находим

$$\sum_{J_{12}, J_{34}} G_{J_{12}, J_{34}}^j \sqrt{(2J_{12} + 1)(2J_{34} + 1)} \begin{Bmatrix} j & j & J_{12} \\ j & j & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{Bmatrix} = 0. \quad (5.54)$$

Переходя к дипольным фотонам ($j = 1$) распространим суммирование в (5.54) по значениям $J_{12} = 0, 2$ и $J_{34} = 0, 2$. В левой части выражения (5.54) необходимо положить $J_{13} = 1$, $J_{24} = 0, 2$ или $J_{13} = 0, 2$, $J_{24} = 1$ или $J_{13} = J_{24} = 1$. Все эти случаи должны быть исключены из суммирования по J_{13} , J_{24} в (5.51). Уравнение (5.54) теперь имеет вид

$$\sum_{J_{12}, J_{34}} G_{J_{12}, J_{34}}^1 \sqrt{(2J_{12} + 1)(2J_{34} + 1)} \begin{Bmatrix} 1 & 1 & J_{12} \\ 1 & 1 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{Bmatrix} = 0. \quad (5.55)$$

Для фиксированного значения J есть 5 уравнений для 4 коэффициентов $G_{0,0,J}^1$, $G_{2,0,J}^1$, $G_{0,2,J}^1$ и $G_{2,2,J}^1$. Однако, два из этих уравнений для случая $J_{13} = 1$, $J_{24} = 0, 2$ совпадают с другими двумя уравнениями при $J_{13} = 0, 2$, $J_{24} = 1$ из-за инвариантности $9j$ -символа в (5.54) при перестановке двух первых строк. Тогда система уравнений выглядит так

$$G_{0,0,J}^1 \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & J \end{Bmatrix} + G_{0,2,J}^1 \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 2 \\ 1 & 0 & J \end{Bmatrix} \sqrt{5} + G_{2,0,J}^1 \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & J \end{Bmatrix} \sqrt{5} + G_{2,2,J}^1 \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 2 \\ 1 & 0 & J \end{Bmatrix} = 0, \quad (5.56)$$

$$G_{0,0,J}^1 \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & J \end{Bmatrix} + G_{0,2,J}^1 \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & J \end{Bmatrix} \sqrt{5} + G_{2,0,J}^1 \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & J \end{Bmatrix} \sqrt{5} + G_{2,2,J}^1 \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & J \end{Bmatrix} = 0, \quad (5.57)$$

$$G_{0,0,J}^1 \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & J \end{Bmatrix} + G_{0,2,J}^1 \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & J \end{Bmatrix} \sqrt{5} + G_{2,0,J}^1 \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & J \end{Bmatrix} \sqrt{5} + G_{2,2,J}^1 \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & J \end{Bmatrix} = 0. \quad (5.58)$$

Выражение (5.56) соответствует случаю $J_{13} = 1$, $J_{24} = 0$, выражение (5.57) соответствует случаю $J_{13} = 1$, $J_{24} = 2$ и (5.58) выполняется при $J_{13} = J_{24} = 1$. Проанализируем систему

уравнений (5.56)-(5.58) при $J = 1$. Из выражения (5.56), видно, что все $9J$ -символы в левой части уравнения (5.56), кроме последнего равны нулю [85]. Последний $9J$ - символ отличен от нуля только для $J = 1$:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 2 \\ 1 & 0 & J \end{pmatrix} = -\frac{1}{\sqrt{15}} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 1 \end{pmatrix} \delta_{J1}. \quad (5.59)$$

Это означает, что при $J = 1$ $G_{2,2,1}^1 = 0$, и значение $J = 1$ для полного углового момента системы 4-фотонов не соответствует ССПО-1, которое разрешает значение $J = 2$ для двух-электронной системы (условие $G_{2,2,1}^1 = 0$ означает, что значение $J = 2$, не допускается для двухфотонной подсистемы системы 4-фотонов). Все другие возможные значения $J = 0, 2, 3, 4$ для системы 4-х дипольных фотонов не запрещены по формуле (5.56). Продолжая этот анализ, мы находим, что в выражении (5.57) для $J = 0$ все $9J$ -символы обращаются в ноль, так что это уравнение имеет решение при произвольных генеалогических коэффициентах и значение $J = 0$ не запрещено для системы 4-х эквивалентных фотонов. Для $J = 1$ в (5.57) все $9j$ -символы кроме последнего равны нулю. Тогда $G_{2,2,1}^1 = 0$, что противоречит ССПО-1 и значение $J = 1$ запрещено. Для $J = 2$ только первый $9j$ -символ в выражении (5.57) равен нулю, так что (5.57) имеет ненулевые решения для генеалогических коэффициентов и значение $J = 2$ разрешено. Для $J = 3$ все $9j$ -кроме последнего равны нулю, так что $G_{2,2,3}^1 = 0$, что противоречит ССПО-1 и значение $J = 3$ запрещено. Таким же образом находим, что выражение (5.58) запрещает только значение $J = 1$. Для $J = 4$ все $9j$ -символы в (5.57) (также как и в выражениях (5.56), (5.58)) равны нулю. Тогда генеалогические коэффициенты с $J = 4$ абсолютно произвольны и значение $J = 4$ разрешено для четырёхфотонной системы. В общей сложности, наш анализ показывает, что для системы четырёх эквивалентных дипольных фотонов значения полного углового момента системы могут принимать значения $J = 0, 2, 4$, а значения $J = 1, 3$ запрещены.

Для подкрепления общего доказательства, используя тот же КЭД подход, что и в случае 3-х фотонных переходов, были проверены ССПО-3 для переходов $2^3S_1 \rightarrow 1^1S_0 + 4\gamma(E1)$ и $3^3D_3 \rightarrow 1^1S_0 + 4\gamma(E1)$. В обоих случаях вероятность перехода обращаются в нуль при равных частотных фотонов $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = \omega_4$. Можно проследить аналитически из выражения, аналогичного (5.30), что значение $J = 1$ запрещено для эквивалентных фотонов в первом переходе и значение $J = 3$ запрещено во втором переходе. Таким образом, ССПО-3 для 4-фотонных переходов полностью доказаны.

Глава 6. Возможность экспериментальной проверки ССПО

6.1 Общая идея проверки

В Главе 5 были сформулированы Спин-Статистические Правила Отбора (ССПО) для многофотонных атомных процессов, которые основываются на фундаментальных свойствах частиц с целочисленным спином, подчиняющихся статистике Бозе-Эйнштейна. В некотором смысле, эти правила могут рассматриваться как принцип запрета для бозонов (фотонов), так как они запрещают некоторые квантовомеханические состояния для системы эквивалентных частиц. Это сходство подкрепляется сравнением со свойствами эквивалентных электронов в атомной физике рассмотренными в §5.1.

Однако ССПО сформулированы исключительно для атомных процессов, то есть для излучения или поглощения фотонов атомными системами (атомы, ионы). ССПО относятся к квантовым числам характеризующим полный момент системы, в которые включены также орбитальные моменты фотонов. Последние зависят от выбора системы отсчета, в случае ССПО это система покоя атома, излучающего или поглощающего фотоны.

В этом заключается различие с теоремой Ландау-Янга, которая говорит, что система из двух фотонов не может иметь полный момент, равный единице. Это утверждение формулируется в системе покоя для центра инерции двух фотонов. В этой системе отсчета два фотона коллинеарны (противоположно направленные) и имеют равные частоты. Различный выбор системы отсчета по сравнению с ССПО приводит к различным результатам, когда речь идёт о высших мультипольностях, т.е. определение орбитального углового момента становится важным. Таким образом ССПО можно рассматривать как расширение теоремы Ландау-Янга для многофотонных переходов в атомных процессах.

Важным является вопрос: в каких экспериментах можно наблюдать влияние ССПО на атомные процессы. Естественно предположить использование лазеров и рассматривать процессы многофотонного поглощения. Предложим следующую схему: пусть луч лазерного источника распространяется через атомный пар с частотой излучения ω_a соответствующей какому-либо атомному переходу между двумя уровнями. Основным преимуществом лазерного источника является то, что все фотоны имеют одинаковую частоту. Если поделить эту частоту на целое число N_γ и подстроить частоту лазера ω_l так чтобы $\omega_l = \omega_a/N_\gamma$, то тогда число поглощаемых фотонов будет N_γ , т.е. строго зафиксировано. Значения полного

момента J для N_γ фотонной системы могут быть установлены путем выбора соответствующих значений J_{e_i} и J_{e_f} для начального и конечного (вышележащего) состояний в процессе поглощения. Например, если выбрать $J_{e_i} = 0$, $J_{e_f} = 2$ и $N_\gamma = 3$, то таким образом можно проверить ССПО-2 для $N_\gamma = 3, J = 2$. Однако мы не можем зафиксировать мультипольность фотонов в лазерном пучке, т.е. полный угловой момент j отдельного фотона, так как пучок содержит фотоны всех мультипольностей. Это означает, что вместе с переходом с поглощением $E1E1E1$ фотонов все фотоны с той же общей чётностью, т.е. $E1M1E2$, $E1E1M2$ и т.д. также будут поглощаться в этом же переходе. Однако процессы с поглощением фотонов высших мультипольностей обычно сильно подавлены в атомах, поэтому поглощение $E1E1E1$ фотонов будет доминирующим. Таким образом регистрируя поглощение на частоте $\omega_l = \omega_a/N_\gamma$ можно установить выполнение ССПО для конкретного перехода: атомный пар должен быть прозрачен для лазерного пучка на частоте $\omega_l = \omega_a/N_\gamma$. Отметим также, что в отличие от спонтанного излучения, которое очень слабое для многофотонных переходов, многофотонное поглощение зависит от интенсивности лазера и может хорошо наблюдаться в экспериментах. Аналогичные эксперименты по поиску ограничения на вероятность возникновения антисимметричных двухфотонных состояний проводились в работе [37]. Позже результаты были улучшены в работе [41]

Рассмотренные в Главе 5 трёхфотонные переходы в гелиеподобном уране представляют интерес только в качестве наглядной иллюстрации ССПО. Так как частоты переходов в этом случае лежат в рентгеновском спектре, экспериментальная проверка на существующих лазерах сильно затруднена. Наиболее подходящим источником поглощаемых фотонов могут служить лазеры оптического диапазона (0.857 эВ - 3.27 эВ). В качестве атомной системы подходящей для проведения такого эксперимента по проверке ССПО может служить атом гелия. Однако, в отличие от случая гелиеподобного урана ($Z = 92$), где межэлектронным взаимодействием при расчёте вероятностей переходов можно было пренебречь без существенной потери точности, расчёты в нейтральном атоме гелия ($Z = 2$) требуют полного учёта межэлектронной корреляции.

В качестве ещё одной системы, которая может быть пригодна для проверки ССПО в экспериментах с лазерами оптического диапазона, могут служить водородоподобные ионы. В §6.2 представлены расчёты трёхфотонных переходов в атоме водорода и водородоподобных ионах для различных значений Z в диапазоне $1 \leq Z \leq 95$. Кроме того проведены расчёты трёхфотонных переходов между компонентами тонкой структуры с учётом сверхтонкого расщепления для водородоподобных ионов с ядерным спином $I = 3/2$, пред-

ставляющих непосредственный интерес для экспериментальной проверки ССПО-2. Эти расчёты представлены в нашей работе [86].

6.2 Трёхфотонные переходы в водородоподобных МЗИ

Общее релятивистское выражение (5.26) для расчёта вероятностей трёхфотонных переходов в водородоподобных ионах было получено в §5.2. Результаты численных расчётов для переходов $2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2} + 3\gamma(E1)$ и $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2} + 3\gamma(E2)$ для различных значений Z в диапазоне $1 \leq Z \leq 95$ представлены в таблицах 8 и 9 соответственно. Вычисления проведены для калибровок "скорости" и "длины". Интегрирование по частоте выполнено на гауссовой сетке из 32 узлов. Для суммирования по промежуточным состояниям в (5.26) используется метод В-сплайнов [49].

Таблица 8: Вероятности переходов $2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2} + 3\gamma(E1)$ и $2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2} + \gamma(E1)$ в с^{-1} для различных Z . Степени 10 указаны в скобках. Энергия перехода в эВ представлена в последнем столбце.

Z	$W_{vel.}^{3\gamma}$	$W_{len.}^{3\gamma}$	$W^{1\gamma}$	ΔE
1	1.168620(-8)	1.168632(-8)	6.268(8)	10.204393
5	4.561173(-3)	4.561219(-3)	6.918(11)	2.551846(2)
10	1.164659	1.164670	6.272(12)	1.021675(3)
20	2.950782(2)	2.950754(2)	1.005(14)	4.101827(3)
30	7.430658(3)	7.430721(3)	5.106(14)	9.287031(3)
40	7.237156(4)	7.237208(4)	1.621(15)	1.665912(4)
50	4.170711(5)	4.170735(5)	3.980(15)	2.634226(4)
60	1.717285(6)	1.717293(6)	8.310(15)	3.851493(4)
70	5.579235(6)	5.579255(6)	1.552(16)	5.342837(4)
80	1.514879(7)	1.514883(7)	2.671(16)	7.144008(4)
90	3.554091(7)	3.554098(7)	4.316(16)	9.305821(4)
95	5.1821200(7)	5.1821200(7)	5.380(16)	1.054361(5)

Для расчёта трёхфотонных переходов между компонентами тонкой структуры с учётом сверхтонкого расщепления в водородоподобных ионах с ненулевым ядерным спином I необходимо модифицировать исходное выражение (5.26). Это означает, что мы будем фиксировать определенное сверхтонкое подсостояние тонкой структуры, не вводя в явном виде сверхтонкое расщепление уровня. Матричный элемент между состояниями с полным

Таблица 9: Вероятности переходов $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2} + 3\gamma(E2)$ и $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2} + 2\gamma(E1)$ в с^{-1} для различных Z . Степени 10 указаны в скобках. Энергия перехода в эВ представлена в последнем столбце.

Z	$W_{vel.}^{3\gamma}$	$W_{len.}^{3\gamma}$	$W^{2\gamma}$	ΔE
1	1.284270(-27)	1.284254(-27)	8.229063	10.204393
5	7.833773(-18)	7.833681(-18)	1.284705(5)	2.551846(3)
10	1.281043(-13)	1.284925(-13)	8.200646(6)	1.021674(3)
20	2.082775(-9)	2.087035(-9)	5.195127(8)	4.101829(3)
30	6.001701(-7)	6.008097(-7)	5.821090(9)	9.287046(3)
40	3.306380(-5)	3.307976(-5)	3.198616(10)	1.665919(4)
50	7.335633(-4)	7.337452(-4)	1.186615(11)	2.634252(4)
60	9.129899(-3)	9.131310(-3)	3.426453(11)	3.851581(4)
70	7.601921(-2)	7.602718(-2)	8.305995(11)	5.343122(4)
80	0.470047	0.470080	1.767273(12)	7.144853(4)
90	2.304994	2.305110	3.393473(12)	9.308396(4)
95	4.744875	4.745083	4.551134(12)	1.054819(5)

УГЛОВЫМ МОМЕНТОМ F_α и F_β (где $|j_e - I| \leq F \leq j_e + I$) может быть приведён к виду [85]:

$$\langle n_\alpha F_\alpha M_\alpha \left| Q_{j_\gamma m_\gamma \omega}^{(\lambda)} \right| n_\beta F_\beta M_\beta \rangle = \quad (6.1)$$

$$(-1)^{F_\alpha - M_\alpha + j_{e\alpha} + I} [F_\alpha F_\beta]^{1/2} \begin{pmatrix} F_\alpha & j_\gamma & F_\beta \\ -M_\alpha & m_\gamma & M_\beta \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} F_\alpha & j_\gamma & F_\beta \\ j_{e\beta} & I & j_{e\alpha} \end{Bmatrix} \langle n_\alpha j_{e\alpha} \left\| \left\| Q_{j_\gamma \omega}^{(\lambda)} \right\| \right\| n_\beta j_{e\beta} \rangle,$$

$$\langle n_\alpha j_{e\alpha} \left\| \left\| Q_{j_\gamma \omega}^{(\lambda)} \right\| \right\| n_\beta j_{e\beta} \rangle = (-i)^{j_\gamma + \lambda - 1} (-1)^{j_{e\alpha} - 1/2} \left(\frac{4\pi}{2j_\gamma + 1} \right)^{1/2} [j_{e\alpha}, j_{e\beta}]^{1/2} \begin{pmatrix} j_{e\alpha} & j_\gamma & j_{e\beta} \\ 1/2 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} \overline{M}_{\alpha\beta}^{(\lambda, j_\gamma)}(\omega) \quad (6.2)$$

Тогда вероятность перехода равна

$$\frac{dW_{if}}{d\omega_2 d\omega_1} = \frac{\omega_3 \omega_2 \omega_1}{(2\pi)^5} \sum_{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3} \sum_{j_{\gamma 1}, j_{\gamma 2}, j_{\gamma 3}} \sum_{m_{\gamma 1}, m_{\gamma 2}, m_{\gamma 3}} \left| \sum_{F_{e_{n'}}, F_{e_n}} \sum_{j_{e_{n'}}, j_{e_n}} S^{F_{n'} F_n j_{e_{n'}} j_{e_n}}(1, 2, 3) + (5 \text{ перестановок}) \right|^2 \quad (6.3)$$

где

$$S^{F_{n'} F_n j_{e_{n'}} j_{e_n}}(i, j, k) = \sum_{l_{e_{n'}}, l_{e_n}} \sum_{n, n'} \frac{\overline{M}_{f, n'}^{(\lambda_i, j_{\gamma i})}(\omega_i) \overline{M}_{n', n}^{(\lambda_j, j_{\gamma j})}(\omega_j) \overline{M}_{n, i}^{(\lambda_k, j_{\gamma k})}(\omega_k)}{(E_{n'} j_{e_{n'}} l_{e_{n'}} - E_n j_{e_n} l_{e_n} - \omega_k - \omega_j) (E_n j_{e_n} l_{e_n} - E_{n'} j_{e_{n'}} l_{e_{n'}} - \omega_k)} \times \quad (6.4)$$

$$\Delta^{F_{n'}, F_n, j_{e_{n'}}, j_{e_n}}(i, j, k) \pi_f^{l_{e_{n'}}}(i) \pi_n^{l_{e_n}}(j) \pi_n^{l_{e_i}}(k),$$

$$\Delta^{F_{n'}, F_n, j_{en'}, j_{en}}(i, j, k) = \frac{(4\pi)^{3/2} [j_{ef}, j_{en'}, j_{en}, j_{ei}]^{1/2}}{[j_{\gamma_i}, j_{\gamma_j}, j_{\gamma_k}]^{1/2}} \begin{pmatrix} j_{ef} & j_{\gamma_i} & j_{en'} \\ 1/2 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{en'} & j_{\gamma_j} & j_{en} \\ 1/2 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} \quad (6.5)$$

$$\times \begin{pmatrix} j_{en} & j_{\gamma_k} & j_{ei} \\ 1/2 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} [j_{en'}, j_{en}]^{1/2} [F_{n'}, F_n]^{1/2} \left\{ \begin{matrix} F_f & j_{\gamma_i} & F_{n'} \\ j_{en'} & I & j_{ef} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} F_{n'} & j_{\gamma_j} & F_n \\ j_{en} & I & j_{en'} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} F_n & j_{\gamma_k} & F_i \\ j_{ei} & I & j_{en} \end{matrix} \right\} \Theta(i, j, k)$$

и

$$\Theta(i, j, k) = [F_{n'}, F_n]^{1/2} \sum_{M_{n'}, M_n} (-1)^{M_f + M_{n'} + M_n} \begin{pmatrix} F_f & j_{\gamma_i} & F_{n'} \\ -M_f & m_{\gamma_i} & M_{n'} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_{n'} & j_{\gamma_j} & F_n \\ -M_{n'} & m_{\gamma_j} & M_n \end{pmatrix} \quad (6.6)$$

$$\times \begin{pmatrix} F_n & j_{\gamma_k} & F_i \\ -M_n & m_{\gamma_k} & M_i \end{pmatrix}.$$

В выражении (6.3) мы пренебрегли сдвигом энергии из-за сверхтонкого расщепления, так как он мал по отношению к общей разности энергий. В таблице 10 представлены численные результаты для вероятностей переходов $2p_{3/2}(F=0) \rightarrow 2s_{1/2}(F=2) + 3\gamma(E1)$ в водородоподобных ионах для произвольного ядерного заряда Z и ядерного $I=3/2$. В двух последних столбцах таблицы 10 приведены коэффициенты сверхтонкого расщепления $A(\alpha Z)$ для состояний $2p_{3/2}$ и $2s_{1/2}$ для соответствующих Z . Эти коэффициенты рассчитаны согласно [87] и позволяют оценить величину сверхтонкого расщепления, необходимую для оценки разрешимости при лазерном возбуждении

$$\Delta E_\mu = A(\alpha Z) \frac{F(F+1) - I(I+1) - j_e(j_e+1)}{2Ij_e(j_e+1)(2l_e+1)}, \quad (6.7)$$

$$A(\alpha Z) = \alpha(\alpha Z)^3 \frac{\mu}{\mu_N} \frac{m_e}{m_p} \frac{(2l_e+1)\kappa [2\kappa(\gamma+n_r) - N]}{N^4\gamma(4\gamma^2-1)}. \quad (6.8)$$

Здесь I спин ядра, $\kappa = (-1)^{j_e+l_e+1/2}(j_e+1/2)$ релятивистское угловое квантовое число, n_r радиальное квантовое число ($n_r = n - |\kappa|$), $\gamma = \sqrt{\kappa^2 - (\alpha Z)^2}$, $N = \sqrt{n_r^2 + 2n_r\gamma + \kappa^2}$ и μ магнитный момент ядра выраженный в единицах ядерного магнетона $\mu_N = |e|\hbar/(2m_p c)$, m_e и m_p массы электрона и протона соответственно. Значения I , μ также приведены в таблице 10.

Рассмотренные переходы представляют интерес для возможной экспериментальной проверки ССПО. В таблице 10 представлены вероятности трёхфотонных переходов ($N_\gamma = 3$) только для тех водородоподобных ионов, для которых частота каждого фотона $\omega_i = \omega_a/N_\gamma$ находится в оптическом диапазоне (0.857 эВ - 3.27 эВ). Энергетические интерва-

лы для состояний $2p_{3/2}(F = 0)$ и $2s_{1/2}(F = 2)$ для $Z = 16, 17, 19$ представлены в восьмом столбце таблицы 10. Ядра рассмотренных ионов стабильны [88]. Важно отметить, что для $Z = 16, 17, 19$ сверхтонкое расщепление состояний $2p_{3/2}$ и $2s_{1/2}$ разрешимо, т.е. переходы $2s_{1/2}(F = 2) \rightarrow 2p_{3/2}(F = 0)$ могут быть разделены. Вероятность $3E1$ переходов в 10^{13} меньше чем вероятность соответствующего однофотонного $M2$ перехода. Однако подстройка частоты лазера на одну треть частоты перехода исключает поглощение одного фотона. Таким образом, распределение частот, изображенное на Рис. 15 (и его двумерный разрез, Рис. 16) должно наблюдаться в экспериментах такого типа.

Рис. 15: Трёхмерная функция распределения для перехода $2p_{3/2}(F = 0) \rightarrow 2s_{1/2}(F = 2) + 3\gamma(E1)$ в водородоподобном ионе с $Z = 19$. Ядерный спин $I = 3/2$. По вертикальной оси отложена вероятность $\frac{dW}{d\omega_1 d\omega_2}$ в с^{-1} ; по горизонтальным осям отложены частоты фотонов в единицах ω_1/Δ , ω_2/Δ , где Δ означает разницу энергий $\Delta = E(2p_{3/2}) - E(2s_{1/2})$. Вероятность обращается в ноль в точке с координатами $\omega_1/\Delta = \omega_2/\Delta = 1/3$.

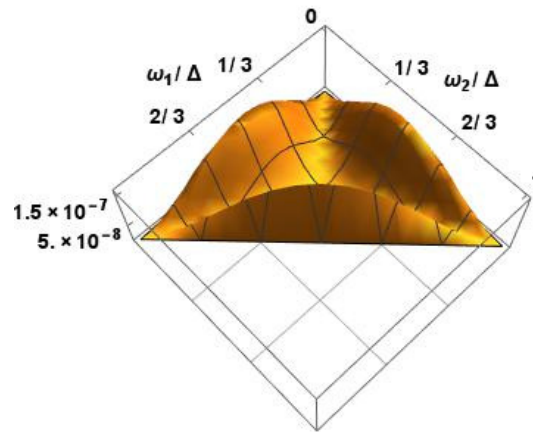
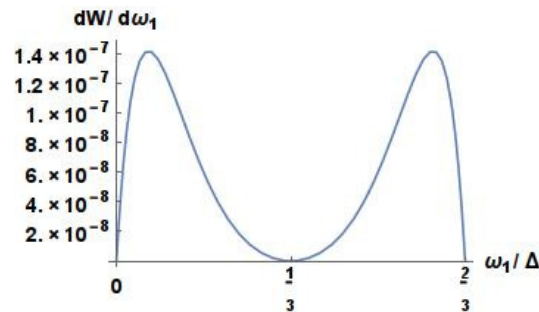
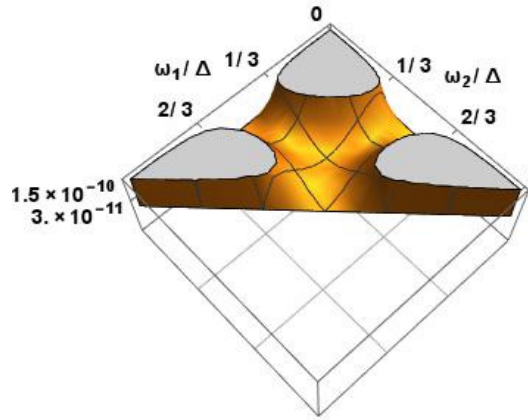


Рис. 16: Двумерный разрез Рис. 15 на частоте $\omega_2/\Delta = 1/3$. Обозначения те же, что и на Рис. 15. Вероятность перехода обращается в ноль в точке с координатами $\omega_1/\Delta = 1/3$.



Такая же картина возникает для переходов $1s_{1/2}(F = 0) \rightarrow 2p_{3/2}(F = 0) + 3\gamma(E1)$ в нейтральном атоме водорода ($Z = 1$) с ядерным спином $I = 1/2$ и магнитным моментом ядра $\mu = 2.793$ (смотри Рис. 17). В этом случае $\omega_l = 3.40148$ эВ. В этом переходе виртуальные

Рис. 17: Трёхмерная функция распределения для перехода $2p_{3/2}(F = 2) \rightarrow 1s_{1/2}(F = 0) + 3\gamma(E1)$ в атоме водорода ($Z = 1$). Разница энергий $2p_{3/2}(F = 2)$ и $1s_{1/2}(F = 0)$ состояний равна 10.204435 эВ и $\omega_l = 3.40148$ эВ. Обозначения те же, что и на Рис. 15. Здесь $\Delta = E(2p_{3/2}) - E(1s_{1/2})$. Вероятность обращается в ноль в точке с координатами $\omega_1/\Delta = \omega_2/\Delta = 1/3$.



состояния $ns_{1/2}(F = 1)$ и $np_{1/2}(F = 1)$ в сумме по всем состояниям в (6.3) при $n = 2$ лежат между начальным $2p_{3/2}(F = 2)$ и $1s_{1/2}(F = 0)$ и конечным энергетическими уровнями. Это приводит к резонансу, который однако, несущественен для предлагаемой проверки, так как не соответствует трём эквивалентным фотонам. Аналогичная ситуация возникала ранее в Главе 5 для перехода $2^3P_2 \rightarrow 1^1S_0 + 3\gamma(E1)$ в гелиеподобном уране ($Z = 92$).

Таблица 10: Вероятности переходов $2p_{3/2}(F=0) \rightarrow 2s_{1/2}(F=2) + 3\gamma(E1)$ и $2p_{3/2}(F=0) \rightarrow 2s_{1/2}(F=2) + \gamma(M2)$ в с^{-1} для различных водородоподобных ионов с ядерным спином $I = 3/2$. Степени 10 указаны в скобках. Энергии переходов и коэффициенты сверхтонкого расщепления A (выражение (6.8)) в эВ представлены в трёх последних столбцах.

Ион	Распространённость %	μ	I	$W_{vel.}^{3\gamma}$	$W_{len.}^{3\gamma}$	$W^{1\gamma}$	ΔE	$A_{2p_{3/2}}$	$A_{2s_{1/2}}$
$^{33}\text{S}^{15+}$	0.75	0.64382	$\frac{3}{2}$	8.944609×10^{-20}	8.944608×10^{-20}	6.406678×10^{-6}	2.992524	2.61179×10^{-4}	2.67850×10^{-4}
$^{35}\text{Cl}^{16+}$	93.3	0.82187	$\frac{3}{2}$	3.404860×10^{-19}	3.404860×10^{-19}	1.917035×10^{-5}	3.817932	4.00118×10^{-4}	4.11687×10^{-4}
$^{39}\text{K}^{18+}$	75.8	0.39147	$\frac{3}{2}$	3.963697×10^{-18}	3.963697×10^{-18}	1.434485×10^{-4}	5.971640	5.59230×10^{-4}	5.79554×10^{-4}

6.3 Трёхфотонные переходы в атоме гелия

В предыдущем параграфе были рассмотрены трёхфотонные переходы в ряде водородо-подобных ионов удобных для проверки ССПО в экспериментах с оптическими лазерами. Однако более естественной системой для такого рода экспериментов является атом гелия. Расчёты в атоме гелия затруднены тем, что необходимо полностью учитывать межэлектронное взаимодействие в отличие от случая гелиеподобного урана ($Z = 92$) рассмотренного в §5.2.

Атом гелия представляет собой классическую задачу трёх тел: два взаимодействующих электрона в кулоновском поле ядра. Уравнение Шрёдингера для трёхчастичной системы, состоящей из ядра с зарядом Ze массой M и двумя электронами с зарядом $-e$ и массой m_e , записывается следующим образом

$$\left[\frac{1}{2M} P_N^2 + \frac{1}{2m_e} \sum_{i=1,2} P_i^2 + V(\vec{R}_N, \vec{R}_i) \right] \Psi = E \Psi, \quad (6.9)$$

где $\vec{P}_i = (\hbar/i)\nabla_i$ и

$$V(\vec{R}_N, \vec{R}_i) = -\frac{Ze^2}{|\vec{R}_N - \vec{R}_i|} - \frac{Ze^2}{|\vec{R}_1 - \vec{R}_2|} + \frac{e^2}{|\vec{R}_1 - \vec{R}_2|}. \quad (6.10)$$

Вводя относительные координаты $\vec{r}_i = \vec{R}_i - \vec{R}_N$ перепишем (6.9) в виде

$$\left[\frac{1}{2\mu} \sum_{i=1,2} p_i^2 + \frac{1}{M} \vec{p}_1 \cdot \vec{p}_2 + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right] \Psi = E \Psi, \quad (6.11)$$

где $\mu = \frac{m_e M}{m_e + M}$ - приведённая масса, $H_{mp} = \frac{1}{M} \vec{p}_1 \cdot \vec{p}_2$ так называемый оператор поляризации массы. Для численных расчётов удобно перейти к расстоянию и энергии выражаемых в единицах $a_\mu = (m_e/\mu) a_0$ и $e^2/a_\mu = 2(\mu/m_e) R_\infty$ соответственно. Таким образом, уравнение (6.11) в безразмерной форме принимает вид

$$\left[-\frac{1}{2} \sum_{i=1,2} \nabla_{\rho_i}^2 - \frac{\mu}{M} \nabla_{\rho_1} \cdot \nabla_{\rho_2} + V(\vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2) \right] \Psi = \varepsilon \Psi, \quad (6.12)$$

где $\vec{\rho}_i = \vec{r}_i/a_\mu$, $\varepsilon = E/(e^2/a_\mu)$, и

$$V(\vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2) = -\frac{Z}{\rho_1} - \frac{Z}{\rho_2} + \frac{1}{|\vec{\rho}_1 - \vec{\rho}_2|}. \quad (6.13)$$

Предельный переход $\mu/M \rightarrow 0$ определяет задачу на нахождение собственного значения ε_0 и волновой функции Ψ_0 в приближении ядра бесконечной массы. Если оператор поляризации массы рассматривать как малое возмущение, тогда полная энергия может быть представлена в виде

$$E = \left[\varepsilon_0 + \frac{\mu}{M} \varepsilon_1 + \left(\frac{\mu}{M} \right)^2 \varepsilon_2 + \dots \right] \frac{\mu}{m_e} \frac{e^2}{a_0} \quad (6.14)$$

где $\varepsilon_1 = \langle \Psi_0 | \nabla_{\rho_1} \cdot \nabla_{\rho_2} | \Psi_0 \rangle$ поправка на изотопический сдвиг первого порядка, ε_2 поправка второго порядка и т.д.

Наиболее прецизионным методом расчёта спектроскопических характеристик в лёгких двухэлектронных атомах является вариационный принцип Рэля-Ритца. Он заключается в том, что для любой нормируемой затравочной волновой функции Ψ_{tr} величина

$$E_{\text{tr}} = \frac{\langle \Psi_{\text{tr}} | H | \Psi_{\text{tr}} \rangle}{\langle \Psi_{\text{tr}} | \Psi_{\text{tr}} \rangle} \quad (6.15)$$

удовлетворяет неравенству $E_{\text{tr}} \geq E_1$, где E_1 точная энергия основного состояния. Основная идея вариационных вычислений заключается в выборе затравочной волновой функции с вариационными параметрами и последующей их оптимизацией для достижения минимального значения E_{tr} . Задача оптимизации в случае линейных вариационных коэффициентов может быть решена алгебраически. В качестве, примера рассмотрим, базис Хиллераасовского типа [59]

$$\chi_p(\alpha, \beta) = r_1^i r_2^j r_{12}^k e^{-\alpha r_1 - \beta r_2}, \quad (6.16)$$

где p представляет собой индекс обозначающий набор неотрицательных целочисленных значений для степеней $\{i, j, k\}$, и α и β являются фиксированными величинами (в общем случае комплексными), определяющие шкалу расстояний. Если выбрать затравочную волновую функцию в виде разложения по базису (6.16)

$$\Psi_{\text{tr}} = \sum_{p=1}^N c_p \chi_p(\alpha, \beta), \quad (6.17)$$

тогда решение системы уравнений $\partial E_{\text{tr}}/\partial c_p = 0$, $p = 1, \dots, N$ эквивалентно решению обобщённой задачи на собственные значения

$$\mathbf{H}\mathbf{c} = \lambda\mathbf{O}\mathbf{c} \quad (6.18)$$

где \mathbf{c} - вектор-столбец коэффициентов c_p , матрицы \mathbf{H} и \mathbf{O} имеют матричные элементы $H_{pq} = \langle \chi_p | H | \chi_q \rangle$ и $O_{pq} = \langle \chi_p | \chi_q \rangle$ соответственно, $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N$ - N собственных значений, нижнее из которых λ_1 определяет верхнюю границу E_1 .

Для проведения численных расчетов трёхфотонных переходов в двух электронных атомах будем использовать в качестве затравочных вариационных функций волновые функции с нелинейными квазислучайными параметрами [89]. Волновая функция состояния с орбитальным угловым моментом L_e , его проекцией M_e и пространственной чётностью $\pi_e = (-1)^{L_e}$ представляется в виде

$$\Psi_{L_e M_e}(\vec{r}_1 \vec{r}_2) = \sum_{l_{e1} + l_{e2} = L_e} \left[Y_{l_{e1} l_{e2}}^{L_e M_e}(\vec{n}_1, \vec{n}_2) G_{l_{e1} l_{e2}}^{L_e \pi_e}(r_1, r_2) \pm (1 \leftrightarrow 2) \right], \quad (6.19)$$

где $G_{l_{e1} l_{e2}}^{L_e \pi_e}$ радиальная часть, соответствующая определенной биполярной гармонике $Y_{l_{e1} l_{e2}}^{L_e M_e}$ [85]. Эти функции находятся с помощью вариационного метода, разработанного в [89]-[90], который заключается в разложении $G_{l_{e1} l_{e2}}^{L_e \pi_e}$ по экспоненциальному базисному набору размера N с комплексными параметрами α_i , β_i и γ_i полученными квазислучайным образом [90]

$$G_{l_{e1} l_{e2}}^{L_e \pi_e}(r_1, r_2) = \sum_{i=1}^N \{ U_i \operatorname{Re} [\exp(-\alpha_i r_1 - \beta_i r_2 - \gamma_i r_{12})] + W_i \operatorname{Im} [\exp(-\alpha_i r_1 - \beta_i r_2 - \gamma_i r_{12})] \}, \quad (6.20)$$

где $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$, U_i и W_i линейные параметры, требующие оптимизации.

Так как мы заинтересованы в переходах между состояниями с полным угловым моментом $\vec{J}_e = \vec{L}_e + \vec{S}_e$, то необходимо использовать $L_e S_e J_e M_e$ схему сложения, где \vec{S}_e - полный спин электронов [66, 85]. Тогда

$$\begin{aligned} (r^{m_\gamma})_{n' L'_e S'_e J'_e M'_e n L_e S_e J_e M_e} &= \delta_{S'_e S_e} (-1)^{J'_e - M'_e} \begin{pmatrix} J'_e & 1 & J_e \\ -M'_e & m_\gamma & M_e \end{pmatrix} \\ &\times \sqrt{(2J'_e + 1)(2J_e + 1)} (-1)^{L'_e + S'_e + J_e + 1} \begin{Bmatrix} L'_e & J'_e & S'_e \\ J_e & L_e & 1 \end{Bmatrix} \langle n' L'_e || r || n L_e \rangle \end{aligned} \quad (6.21)$$

Основные выражения для вычисления матричных элементов (6.21) на волновых функция Хиллераасовского типа представлены в работе [91].

В качестве иллюстрации ССПО-2 для трёх фотонов рассмотрим переход $2^3P_2 \rightarrow 1^1S_0 + 3\gamma(E1)$ в атоме гелия и покажем, что значение полного углового момента $J = 2$ для эквивалентных дипольных фотонов запрещено. Переход $2^3P_2 \rightarrow 1^1S_0 + 3\gamma(E1)$ в отличие $2^1P_1 \rightarrow 1^1S_0 + 3\gamma(E1)$ происходит только за счёт спин-орбитального смешивания промежуточных состояний. Следуя [79, 92] представим полные волновые функции P и D состояний в виде

$$|n' \ ^3P_1\rangle_{\text{true}} = |n' \ ^3P_1\rangle + \sum_{n''=2}^{\infty} \epsilon_{n'n''}^{(P)} |n'' \ ^1P_1\rangle, \quad (6.22)$$

$$|n' \ ^1P_1\rangle_{\text{true}} = |n' \ ^1P_1\rangle - \sum_{n''=2}^{\infty} \epsilon_{n'n''}^{(P)} |n'' \ ^3P_1\rangle, \quad (6.23)$$

$$|n' \ ^3D_2\rangle_{\text{true}} = |n' \ ^3D_2\rangle + \sum_{n''=3}^{\infty} \epsilon_{n'n''}^{(D)} |n'' \ ^1D_2\rangle, \quad (6.24)$$

$$|n' \ ^1D_2\rangle_{\text{true}} = |n' \ ^1D_2\rangle - \sum_{n''=3}^{\infty} \epsilon_{n'n''}^{(D)} |n'' \ ^3D_2\rangle, \quad (6.25)$$

где

$$\epsilon_{n'n''}^{(P)} = \frac{\langle n' \ ^3P_1 | H_3 | n'' \ ^1P_1 \rangle}{E(n' \ ^3P) - E(n'' \ ^1P)}, \quad (6.26)$$

$$\epsilon_{n'n''}^{(D)} = \frac{\langle n' \ ^3D_2 | H_3 | n'' \ ^1D_2 \rangle}{E(n' \ ^3D) - E(n'' \ ^1D)} \quad (6.27)$$

и H_3 - оператор спин-орбитального взаимодействия [58]. При отсутствии внешних электрических и магнитных полей, спинзависимая релятивистская поправка низшего порядка H_3 состоит из спин-орбитального члена (в атомных единицах)

$$H_{\text{so}} = \frac{Z}{2c^2} \sum_i \left[\frac{\vec{r}_i \times \vec{p}_i}{r_i^3} \right] \cdot \hat{s}_i \quad (6.28)$$

и члена "спин-чужая-орбита"

$$H_{\text{soo}} = \frac{1}{2c^2} \sum_{i \neq j} \left[\frac{\vec{r}_{ij} \times \vec{p}_i}{r_{ij}^3} \right] \cdot (\hat{s}_i + 2 \hat{s}_j). \quad (6.29)$$

Матричные элементы выражений (6.28) и (6.29) приводятся к виду [93, 94]

$$\langle L_e S'_e J_e M_e | H_{\text{so}} | L_e S_e J_e M_e \rangle = \frac{2}{c^2} (-1)^{L_e + S'_e + J_e} \begin{Bmatrix} J_e & S'_e & L_e \\ 1 & L_e & S_e \end{Bmatrix} \left\langle L_e \left\| \frac{\vec{r}_1 \times \vec{p}_1}{r_1^3} \right\| L_e \right\rangle \langle S'_e || \hat{s}_1 || S_e \rangle, \quad (6.30)$$

$$\langle L_e S'_e J_e M_e | H_{\text{soo}} | L_e S_e J_e M_e \rangle = \frac{1}{c^2} (-1)^{L_e + S'_e + J_e} \begin{Bmatrix} J_e & S'_e & L_e \\ 1 & L_e & S_e \end{Bmatrix} \left\langle L_e \left\| \frac{\vec{r}_{12} \times \vec{p}_1}{r_{12}^3} \right\| L_e \right\rangle \langle S'_e || \hat{s}_1 + 2\hat{s}_2 || S_e \rangle \quad (6.31)$$

Основные формулы для вычисления редуцированных матричных элементов (6.30)-(6.31) представлены в работе [79].

Для вычисления вероятности трёхфотонных переходов в атоме гелия сделаем нерелятивистский переход в выражении (5.16). Оператор излучения в матричном элементе числителя в (5.16) имеет вид

$$Q_{j_\gamma m_\gamma \omega}^{(0)} = \vec{\alpha} \vec{A}_{j_\gamma m_\gamma}^{(0)}(\vec{r}), \quad (6.32)$$

$$Q_{j_\gamma m_\gamma \omega}^{(1)} = \vec{\alpha} \vec{A}_{j_\gamma m_\gamma}^{(1)}(\vec{r}) + G_\gamma A_{j_\gamma m_\gamma}^{(-1)}(\vec{r}), \quad (6.33)$$

где $\vec{A}_{j_\gamma m_\gamma}^{(0)}(\vec{r})$, $\vec{A}_{j_\gamma m_\gamma}^{(1)}(\vec{r})$ - магнитный и электрический векторные потенциалы, $A_{j_\gamma m_\gamma}^{(-1)}(\vec{r})$ - скалярный потенциал

$$\vec{A}_{j_\gamma m_\gamma}^{(0)}(\vec{r}) = i^{j_\gamma} g_{j_\gamma}(\omega r) \vec{Y}_{j_\gamma j_\gamma m_\gamma}^*(\vec{n}), \quad (6.34)$$

$$\begin{aligned} \vec{A}_{j_\gamma m_\gamma}^{(1)}(\vec{r}) = i^{j_\gamma+1} & \left\{ \sqrt{\frac{j_\gamma}{2j_\gamma+1}} g_{j_\gamma+1}(\omega r) \vec{Y}_{j_\gamma j_\gamma+1 m_\gamma}^*(\vec{n}) - \sqrt{\frac{j_\gamma+1}{2j_\gamma+1}} g_{j_\gamma-1}(\omega r) \vec{Y}_{j_\gamma j_\gamma-1 m_\gamma}^*(\vec{n}) \right. \\ & \left. + G_{j_\gamma} \left(\sqrt{\frac{j_\gamma+1}{2j_\gamma+1}} g_{j_\gamma+1}(\omega r) \vec{Y}_{j_\gamma j_\gamma+1 m_\gamma}^*(\vec{n}) + \sqrt{\frac{j_\gamma}{2j_\gamma+1}} g_{j_\gamma-1}(\omega r) \vec{Y}_{j_\gamma j_\gamma-1 m_\gamma}^*(\vec{n}) \right) \right\}, \quad (6.35) \end{aligned}$$

$$A_{j_\gamma m_\gamma}^{(-1)}(\vec{r}) = i^{j_\gamma} g_{j_\gamma}(\omega r) Y_{j_\gamma m_\gamma}^*(\vec{n}). \quad (6.36)$$

$$g_{j\gamma} = 4\pi j_{j\gamma}(\omega r) \quad (6.37)$$

Здесь использованы те же обозначения, что в §5.2. В нерелятивистском пределе ($kr \ll 1$) $G_{j\gamma} = \sqrt{\frac{j\gamma+1}{j\gamma}}$ и $j_\gamma = 1$. Таким образом в дипольном приближении выражение для оператора излучения (6.33) принимает вид

$$Q_{1m\gamma\omega}^{(1)} = i \frac{4\sqrt{2}}{3} \pi \omega r Y_{1m\gamma}^*(\vec{n}), \quad (6.38)$$

Используя определение сферических компонент вектора \vec{r}

$$r_1^m = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} |\vec{r}| Y_{1m}^*(\vec{n}), \quad (6.39)$$

выражение (6.38) переписывается в форме

$$Q_{1m\gamma\omega}^{(1)} = i \sqrt{\frac{8\pi}{3}} \omega r_1^m. \quad (6.40)$$

Подставляя выражение (6.40) в выражение для дифференциальной вероятности перехода (5.16) находим

$$\begin{aligned} \frac{dW_{i \rightarrow f}(\omega_1, \omega_2)}{d\omega_1 d\omega_2} &= \frac{16}{27\pi^2} (\omega_3 \omega_2 \omega_1)^3 \sum_{m\gamma_3 m\gamma_2 m\gamma_1} \quad (6.41) \\ &\left| \sum_{n'n} \frac{(r^{m\gamma_3})_{fn'} (r^{m\gamma_2})_{n'n} (r^{m\gamma_1})_{ni}}{(E_{n'} - E_f - \omega_3)(E_n - E_f - \omega_3 - \omega_2)} + \sum_{n'n} \frac{(r^{m\gamma_3})_{fn'} (r^{m\gamma_1})_{n'n} (r^{m\gamma_2})_{ni}}{(E_{n'} - E_f - \omega_3)(E_n - E_f - \omega_3 - \omega_1)} + \right. \\ &\sum_{n'n} \frac{(r^{m\gamma_1})_{fn'} (r^{m\gamma_3})_{n'n} (r^{m\gamma_2})_{ni}}{(E_{n'} - E_f - \omega_1)(E_n - E_f - \omega_1 - \omega_3)} + \sum_{n'n} \frac{(r^{m\gamma_1})_{fn'} (r^{m\gamma_2})_{n'n} (r^{m\gamma_3})_{ni}}{(E_{n'} - E_f - \omega_1)(E_n - E_f - \omega_1 - \omega_2)} + \\ &\left. \sum_{n'n} \frac{(r^{m\gamma_2})_{fn'} (r^{m\gamma_3})_{n'n} (r^{m\gamma_1})_{ni}}{(E_{n'} - E_f - \omega_2)(E_n - E_f - \omega_2 - \omega_3)} + \sum_{n'n} \frac{(r^{m\gamma_2})_{fn'} (r^{m\gamma_1})_{n'n} (r^{m\gamma_3})_{ni}}{(E_{n'} - E_f - \omega_2)(E_n - E_f - \omega_2 - \omega_1)} \right|^2. \end{aligned}$$

В N_e -электронном атоме $r^{m\gamma} = \sum_{i=1}^{N_e} r_i^{m\gamma}$, где $r_i^{m\gamma}$ сферические компоненты радиус-вектора для i -того электрона. Тогда полная вероятность определяется как

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{1}{3!} \frac{1}{2j_{ei} + 1} \sum_{m_{ei}, m_{ef}} \iint \frac{dW_{i \rightarrow f}(\omega_1, \omega_2)}{d\omega_1 d\omega_2} d\omega_1 d\omega_2. \quad (6.42)$$

Для интеркомбинационных трёхфотонных переходов, которые проходят только за счёт спин-орбитального смешивания состояний выражение (6.41) с учётом (6.22)-(6.25) прини-

мает вид

$$\frac{dW_{i \rightarrow f}(\omega_1, \omega_2)}{d\omega_1 d\omega_2} = \frac{16}{27\pi^2} (\omega_3 \omega_2 \omega_1)^3 \sum_{m\gamma_3 m\gamma_2 m\gamma_1} \left| \sum_{n'' n' n} \{ (U_{n'' n' n}^{\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3} + D_{n'' n' n}^{\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3}) + 5 \text{ перестановок} \} \right|^2 \quad (6.43)$$

$$U_{n'' n' n}^{\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3} = (r^{m\gamma_3})_{1^1 S_0 n''} \epsilon_{n'' n'}^{ST} (r^{m\gamma_2})_{n' n} (r^{m\gamma_1})_n {}_{2^3 P_2} \times \quad (6.44)$$

$$\left\{ \frac{1}{(E_{n''}^S - E_f - \omega_3)(E_n^T - E_f - \omega_3 - \omega_2)} - \frac{1}{(E_{n'}^T - E_f - \omega_3)(E_n^T - E_f - \omega_3 - \omega_2)} \right\},$$

$$D_{n'' n' n}^{\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3} = (r^{m\gamma_3})_{1^1 S_0 n''} (r^{m\gamma_2})_{n'' n'} \epsilon_{n' n}^{ST} (r^{m\gamma_1})_n {}_{2^3 P_2} \times \quad (6.45)$$

$$\left\{ \frac{1}{(E_{n''}^S - E_f - \omega_3)(E_{n'}^S - E_f - \omega_3 - \omega_2)} - \frac{1}{(E_{n''}^S - E_f - \omega_3)(E_n^T - E_f - \omega_3 - \omega_2)} \right\}.$$

Здесь E_n^S и E_n^T энергии синглетных и триплетных n -состояний соответственно. Под перестановками в (6.43) понимаются перестановки индексов 1, 2, 3. Из выражения (6.43) видно, что трёхфотонный интеркомбинационный распад $2^3 P_2$ состояния подавлен дополнительной малостью спин-орбитального взаимодействия.

6.4 Результаты вариационных расчётов в атоме гелия

Вероятности трёхфотонных переходов полученные с помощью выражения (6.42) проверялись на сходимость при различной длине набора базисных состояний N . Результаты вычислений при $N = 30, 50, 100, 150$ для переходов $2^3 P_2 \rightarrow 2^1 S_0 + 3\gamma(E1)$ и $2^1 P_1 \rightarrow 2^1 S_0 + 3\gamma(E1)$ представлены в таблице 11 (также см. [95]). Соответствующий график распределения по частоте $2^3 P_2 \rightarrow 2^1 S_0 + 3\gamma(E1)$ представлен на Рис. 18. Однако для наглядности ССПО-2 этот график удобно представить двумерный разрезе Рис. 19 при фиксированной частотой третьего фотона $\omega_3 = \Delta/3$, где $\Delta = E(2^3 P_2) - E(2^1 S_0)$. Аналогичные двумерные разрезы для переходов $2^3 P_2 \rightarrow 1^1 S_0 + 3\gamma(E1)$ и $2^1 P_1 \rightarrow 1^1 S_0 + 3\gamma(E1)$ представлены на Рис. 20 и 21. Основное различие между Рис. и , возникает в точке с координатами $\omega_1 = \omega_2 = \Delta/3$. Для перехода $2^3 P_2 \rightarrow 1^1 S_0 + 3\gamma(E1)$ вероятность перехода обращается в ноль. Эти два перехода в основное состояние не подходят для экспериментов предложенных в §6.1 так как лежат не в оптическом диапазоне и представлены в качестве дополнительной демонстрации ССПО-2.

Интегрирование по частоте проводилось методом Гаусса-Лежандра с сеткой из 32 точек. Значения матричных элементов (6.30) и (6.31) для некоторых низколежащих P и D состояний представлены в таблице 12 и находятся в хорошем соответствии со значениями

Рис. 18: Трёхмерная функция распределения для перехода $2^3P_2 \rightarrow 2^1S_0 + 3\gamma(E1)$ в атоме гелия. По вертикальной оси отложена вероятность $\frac{dW}{d\omega_1 d\omega_2}$ в с^{-1} ; по горизонтальным осям отложены частоты в единицах ω_1/Δ , ω_2/Δ , где Δ обозначает разницу энергий $E(2^3P) - E(2^1S)$. Вероятность перехода обращается в ноль в точке с координатами $\omega_1/\Delta = \omega_2/\Delta = 1/3$.

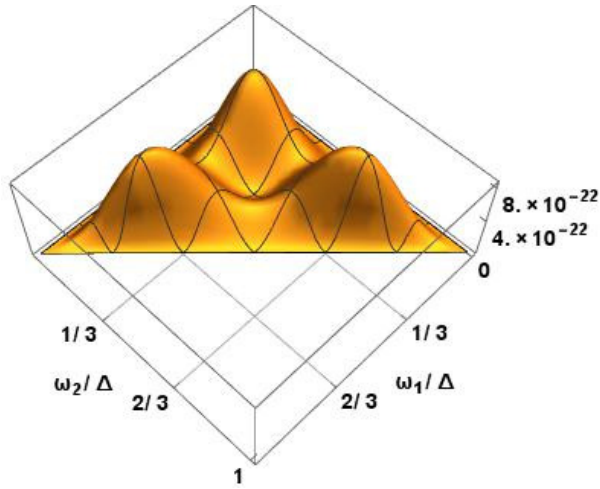


Рис. 19: Двумерный разрез функции распределения по частоте для перехода $2^3P_2 \rightarrow 2^1S_0 + 3\gamma(E1)$ в атоме гелия. Обозначения те же, что и на Рис. 18. Частота ω_2 зафиксирована на значении $\omega_2/\Delta = 1/3$. Вероятность перехода обращается в ноль в точке с координатами $\omega_1/\Delta = \omega_2/\Delta = 1/3$.

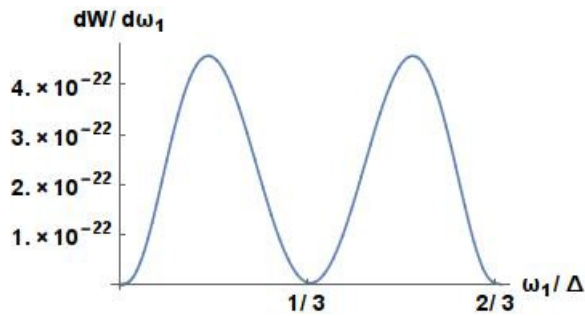


Рис. 20: Двумерный разрез функции распределения по частоте для перехода $2^3P_2 \rightarrow 1^1S_0 + 3\gamma(E1)$ в атоме гелия. Обозначения те же, что и на Рис. 18. $\Delta = E(2^3P) - E(1^1S)$. Частота ω_2 зафиксирована на значении $\omega_2/\Delta = 1/3$. Вероятность перехода обращается в ноль в точке с координатами $\omega_1/\Delta = \omega_2/\Delta = 1/3$.

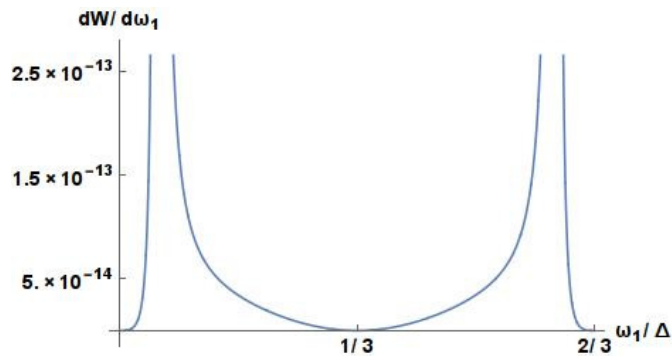
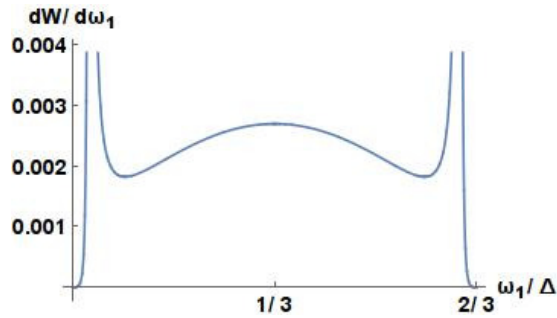


Рис. 21: Двумерный разрез функции распределения по частоте для перехода $2^1P_1 \rightarrow 1^1S_0 + 3\gamma(E1)$ в атоме гелия. Обозначения те же, что и на Рис. 18. $\Delta = E(2^1P) - E(1^1S)$. Частота ω_2 зафиксирована на значении $\omega_2/\Delta = 1/3$.



посчитанными ранее в работах [93, 94]. Нерелятивистские энергии связанных состояний, полученные и использованные в ходе вычислений, представлены в таблице 13.

Численные расчёты вероятностей переходов $2^3P_2 \rightarrow 2^1S_0 + 3\gamma(E1)$ и $2^1P_1 \rightarrow 2^1S_0 + 3\gamma(E1)$ представлены также приведены в таблице 11. Эти переходы являются наиболее подходящими для экспериментальной проверки ССПО-2 так как находятся в соответствующем частотном диапазоне (после деления на N_γ) - оптическом или инфракрасном.

Соответствующие однофотонные переходы, также представлены и находятся в хорошем согласии с предыдущими расчётами [96, 97] (смотри таблицу 11). Результаты для однофотонных переходов совпадают с расчётами в [97] до 4 значащих цифр, что означает точность 0.01%.

Из разницы энергий, также представленной в таблице 11 видно, что предлагаемые переходы подходят для проверки ССПО-2 так как каждый излучённый (поглощённый) фотон находится в оптическом или инфракрасном диапазоне. Как было отмечено ранее, соответствующей однофотонной распад подавлен на частоте ω_l . Отметим, что разности энергий между триплетными и синглетными P состояниями в атоме гелия разрешимы для лазерного источника.

Таблица 11: Вероятности трёхфотонных $2^3P_2 \rightarrow 2^1S_0 + 3\gamma(E1)$, $2^1P_1 \rightarrow 2^1S_0 + 3\gamma(E1)$ и однофотонных $2^3P_2 \rightarrow 2^1S_0 + 1\gamma(M2)$, $2^1P_1 \rightarrow 2^1S_0 + 1\gamma(E1)$ переходов в s^{-1} . Степени 10 указаны в скобках. Энергия перехода ΔE в эВ представлена в двух последних столбцах

N	$W_{2^3P_2-2^1S_0}^{3\gamma(E1)}$	$W_{2^1P_1-2^1S_0}^{3\gamma(E1)}$	$W_{2^3P_2-2^1S_0}^{1\gamma(M2)}$	$W_{2^1P_1-2^1S_0}^{1\gamma(E1)}$	$\Delta E_{2^3P-2^1S}$	$\Delta E_{2^1P-2^1S}$
30	3.727(-27)	4.430(-15)				
50	3.763(-27)	6.651(-15)				
100	3.763(-27)	6.575(-15)			0.35	0.60
150	3.764(-27)	6.573(-15)				
500	—	—	1.1953(-8) 1.1952(-8) [96], [97]	1.9746(6)		

Таблица 12: Величины синглет-триплетного смешивания (ST) для матричных элементов "спин-орбита" и "спин-чужая-обита" сосчитанные на базисе $N = 500$ (в а.е.). Значения помеченные * и ** посчитаны в работах [94] и [93] соответственно.

Состояние	$\langle H_{so} \rangle_{ST}$	$\langle H_{soo} \rangle_{ST}$
$2P$	-0.000 001 9049679	-0.000 000 688 044
	-0.000 001 907 *	-0.000 000 689 *
	-0.000 001 904968 **	-0.000 000 688043 **
$3P$	-0.000 000 558 930	-0.000 000 191 302
	-0.000 000 5604 *	-0.000 000 192 6 *
	-0.000 000 558 929 **	-0.000 000 191 301 **
$4P$	-0.000 000 234 46	-0.000 000 078 773
	-0.000 000 234 6 *	-0.000 000 079 3 *
	-0.000 000 234 440 **	-0.000 000 078 772 **
$3D$	-0.000 000 162 89	-0.000 000 080
	-0.000 000 162 70 *	-0.000 000 079 96 *
	-0.000 000 162 750 **	-0.000 000 079 992 **

Таблица 13: Нерелятивистские энергии связанных состояний атома гелия при разной длине базиса N (в а.е.)

Состояние/ N	30	50	100	150	500	Точные энергии [59]
1^1S	-2.903 701	-2.903 722	-2.903 724 357	-2.903 724 371 62	-2.903 724 377 034 044	-2.903 724 377 034 119 5
2^3S	-2.175 178	-2.175 225	-2.175 229 365	-2.175 229 377 45	-2.175 229 378 236 739	-2.175 229 378 236 791 30
2^1S	-2.144 864	-2.145 681	-2.145 973 79	-2.145 973 98	-2.145 974 046 042	-2.145 974 046 054 419
2^3P	-2.132 72	-2.133 14	-2.133 164	-2.133 164 171	-2.133 164 190 756	-2.133 164 190 779 273
2^1P	-2.123 819	-2.123 839	-2.123 843 017	-2.123 843 067	-2.123 843 086 358	-2.123 843 086 498 093
3^3D	-2.055 521	-2.055 634	-2.055 636	-2.055 636 027	-2.055 636 047	-2.055 636 309 453 261
3^1D	-2.055 553	-2.055 606	-2.055 618 92	-2.055 618 95	-2.055 618 97	-2.055 620 732 852 246

Заключение

Основные положения выносимые на защиту

1. Доказана неразделимость вклада "чистого" двухфотонного излучения и вклада каскадного излучения в полную вероятность двухфотонного распада. Проведены расчёты вероятностей двухфотонных распадов для переходов содержащих $4s \rightarrow 1s + 2\gamma(E1)$ и $3s \rightarrow 1s + 2\gamma(E1)$ в атоме водорода.
2. В рамках квантовой электродинамики проведена регуляризация амплитуд многофотонных процессов с каскадами. Показано что КЭД и феноменологический квантовомеханический подходы приводят к одинаковому результату. Продемонстрировано, что при регуляризации каскадов должны учитываться как ширина начального так и ширина промежуточного состояния.
3. Проведены расчёты вероятностей перепоглощения двух и трёхфотонного излучения на примере системы двух атомов водорода. Представлена модель учёта вклада "чистого" излучения в процессы рекомбинации без выделения каскадных членов, основанная на переизлучении атомом поглощаемых фотонов.
4. Проведены расчёты мнимой части двухпетлевой собственной энергии электрона для атома водорода. Показано, что полученная величина является радиационной поправкой к однофотонной ширине и не может трактоваться как вклад "чистого" излучения в полную вероятность в двухфотонных переходах с каскадами.
5. Представлено аналитическое доказательство Спин-Статистических Правил Отбора для многофотонных переходов в атомах и МЗИ являющиеся расширением теоремы Ландау-Янга для атомных систем.
6. Проведены полностью релятивистские численные расчёты вероятностей трёхфотонных переходов в гелиеподобном уране, нейтральном атоме водорода и водородоподобных ионах между компонентами тонкой структуры с учётом сверхтонкого расщепления.
7. Представлены нерелятивистские расчёты трёхфотонных переходов в атоме гелия на которых реализуются Спин-Статистические Правила Отбора. Вычисления проведены с применением высокоточных вариационных волновых функций. Предложены

переходы для проведения экспериментов на оптических лазерах для проверки Спин-Статистических Правил Отбора.

Автор считает своим приятным долгом выразить глубокую благодарность своему научному руководителю доктору физ.-мат. наук, профессору Лабзовскому Леонтию Нахимовичу, а также к.ф.-м.н. Соловьёву Дмитрию Анатольевичу за постоянное внимание и помощь в работе.

Список литературы

1. M. Göppert-Mayer, Ann. Phys. (Leipzig) **9**, 273 (1931)
2. G. Breit and E. Teller, Astrophys. J. **91**, 215 (1940)
3. G. W. F. Drake, Phys. Rev. A **3**, 908 (1971)
4. S. Klarsfeld, Phys. Lett A **30**, 382 (1969)
5. W. R. Johnson, Phys. Rev. Lett. **29**, 1123 (1972)
6. S. P. Goldman and G. W. F. Drake, Phys. Rev. A **24**, 183 (1981)
7. F. A. Parpia and W. R. Johnson, Phys. Rev. A **26**, 1142 (1982)
8. U. D. Jentschura, Phys. Rev. A **69**, 052118 (2004)
9. M. Niering, R. Holzwarth, J. Reichert, P. Pokasov, Th. Udem, M. Weitz, T. W. Hänsch, P. Lemonde, G. Santarelli, M. Abgrall, P. Laurent, C. Salomon and A. Clairon, Phys. Rev. Lett. **84**, 5496 (2000)
10. Я. Б. Зельдович, В. Г. Курт, Р. А. Сюняев, ЖЭТФ, Т. **55**, С. 278, (1968)
11. P. J. E. Peebles, Astrophys. J. **153**, 1 (1968)
12. E. Peters, D. C. Yost, A. Matveev, T. Hänsch and T. Udem, Ann. Phys. (Berlin), 1-6/DOI: 10.1002/andp. 201300062
13. O. Arnoult, F. Nez, L. Julien and F. Biraben, Eur. Phys. J. D **60**, 243 (2010)
14. V. K. Dubrovich and S. I. Grachev, Astron. Letters **31**, 359 (2005)
15. C. M. Hirata, Phys. Rev. D **78**, 023001 (2008)
16. A. Surzhykov, J. P. Santos, P. Amaro and P. Indelicato, Phys. Rev. A **80**, 052511 (2009)
17. L. N. Labzowsky, A. V. Shonin and D. A. Solovyev, J. Phys. B **38**, 265 (2005)
18. T. Zalialiutdinov, D. Solovyev and L. Labzowsky, J. Phys. B **45**, 165006 (2012)
19. A. Dalgarno, Mon. Not. R. Astron. Soc. **131**, 311 (1966)
20. A. Derevianko and W. R. Johnson, Phys. Rev. A **56**, 1288 (1997)

21. G. W. F. Drake, Nucl. Instr. Meth. B **9**, 465 (1985)
22. I. M. Savukov and W. R. Johnson, Phys. Rev. A **66**, 062507 (2002)
23. L. N. Labzowsky and A. V. Shonin, Phys. Rev. A **69**, 012503 (2004)
24. O. Yu. Andreev, L. N. Labzowsky, G. Plunien and D. A. Solovyev, Phys. Rep. **455**, 135 (2008)
25. F. E. Low, Phys. Rev. **88**, 53 (1952)
26. L. Labzowsky, D. Solovyev, and G. Plunien, Phys. Rev. A **80**, 062514 (2009)
27. T. Zalialiutdinov, D. Solovyev, L. Labzowsky, and G. Plunien, Phys. Rev. A **89**, 052502 (2014)
28. А. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий, *Квантовая электродинамика*, Москва, Наука, (1969)
29. R. Barbieri and J. Sucher, Nucl. Phys. B **134**, 155 (1978)
30. J. Sapirstein and K. T. Cheng, Phys. Rev. A **71**, 022503 (2005)
31. J. Chluba and R. A. Sunyaev, Astronomy and Astrophysics **480**, 629 (2008)
32. J. D. Cresser, A. Z. Tang, G. J. Salamo and F. T. Chan, Phys. Rev. A **33**, 1677 (1986)
33. V. Florescu, I. Schneider and I. N. Mihailescu, Phys. Rev. A **38**, 2189 (1988)
34. D. Solovyev and L. Labzowsky, Phys. Rev. A **81**, 062509 (2010)
35. Л. Д. Ландау, ДАН СССР, **60**, 207 (1948)
36. C. N. Yang, Phys. Rev. **77**, 242 (1950)
37. D. DeMille, D. Budker, N. Derr and E. Deveney, Phys. Rev. Lett. **83**, 3978 (1999)
38. M. G. Kozlov, D. English and D. Budker, Phys. Rev. A **80**, 042504 (2009)
39. U. D. Jentschura, J. Phys. A **40**, F223 (2007)
40. U. D. Jentschura, J. Phys. A **79**, 022510 (2009)
41. R. W. Dunford, Phys. Rev. A **69**, 062502 (2004)

42. G. Hinshaw, M. R.olta, C. L. Bennett et al. ApJS. **170**, 288, (2007)
43. L. Page, G. Hinshaw, E. Komatsu et al, ApJS. **170**, 335, (2007)
44. J. D. Cresser, A. Z. Tang, G. J. Salamo, F. T. Chan. Phys. Rev. A. **33**, 1677, (1986)
45. W. Y. Wong and D. Scott, Mon. Not. Roy, Astron. Soc. **375**, 1441, (2007)
46. В. А. Фок, А. В. Тулуб, Вестник ЛГУ, **16**, (1965)
47. P. Amaro, J. P. Santos, F. Parente, A. Surzhykov and P. Indelicato, Phys. Rev. A. **79**, 062504, (2009)
48. Т. А. Залялютдинов, Д. А. Соловьёв, Л. Н. Лабзовский, Оптика и Спектроскопия, **110**, 362 (2011)
49. W. R. Johnson, S. A. Blundell, and J. Sapirstein, Phys. Rev. A **37**, 307 (1988)
50. V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, V. A Yerokhin, G. Plunien and G. Soff, Phys. Rev. Lett. **93**, 130405 (1990)
51. P. Amaro, A. Surzhykov, F. Parente, P. Indelicato and J. P. Santos, J. Phys. A, **44**, 245302 (2011)
52. S. Salomonson and Öster, Phys. Rev. A **40**, 5548 (1989)
53. S. Salomonson and Öster, Phys. Rev. A **40**, 5559 (1989)
54. L. Hostler, J. Math. Phys. **5**, 591 (1964)
55. Б. А. Зон, Н. Л. Манаков, Л. П. Рапопорт, ЖЭТФ, **55**, 924 (1968)
56. A. Maquet, V. Veinard and T. A. Marian, J. Phys. B **31**, 3743 (1998)
57. L. N. Labzowsky and D. A. Solovyev, In precision Physics of Simple Atomic Systems, Eds. S. E. Karshenboim and V. B. Smirnov, p. 15, Springer (2003)
58. H. A. Bethe, E. E Salpeter, *Quantum Mechanics of One-and-Two-Electron Atoms*, Berlin, Springer, (1957)
59. G. W. F. Drake, in *Atomic, Molecular and Optical Physics Handbook*, edited by G. W. F. Drake (AIP Press, NewYork, 1996)

60. L. Labzowsky, G. Klimchitskaya and Yu. Dmitriev, *"Relativistic Effects in the Spectra of Atomic Systems"*, IOP Publishing. Bristol and Philadelphia (1993)
61. L. Labzowsky, D. Solovyev, G. Plunien, and G. Soff, *Eur. Phys. J. D.* **37**, 335, (2006)
62. V. Florescu, *Phys. Rev. A* **30**, 2441 (1984)
63. T. Zaliutdinov, Yu. Baukina, D. Solovyev, L. Labzowsky, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **47** 115007 (2014)
64. L. Labzowsky, D. Solovyev, G. Plunien and G. Soff, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 143003 (2001)
65. L. Labzowsky, G. Shedrin, D. Solovyev, E. Chernovskaya, G. Plunien and S. Karshenboim, *Phys. Rev. A* **79**, 052506 (2009)
66. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Москва, Наука, (1968)
67. L. Labzowsky, D. Solovyev, G. Plunien, O. Andreev and G. Shedrin, *J. Phys. B* **40**, 525, (2007)
68. V. Weisskopf and E. Wigner, *Z. Phys.* **63**, 54 (1930)
69. W. Heitler, *The Quantum Theory of Radiation*, Oxford 1954
70. D. Solovyev and L. Labzowsky, *Can. J. Phys.* **89**, 123 (2011)
71. D. Solovyev, L. Labzowsky, G. Plunien and V. Sharipov, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **43**, 074005 (2010)
72. S. Seager, D. Sasselov and D. Scott, *ApJS* **128**, 407 (2000)
73. T. Zaliutdinov, D. Solovyev, L. Labzowsky, G. Plunien, *Phys. Rev. A* **91**, 033417 (2015)
74. J. Sapirstein and K. T. Cheng, *Phys. Rev. A* **71**, 022503 (2005)
75. M. Gell-Mann and F. Low, *Phys. Rev.* **84**, 350 (1951)
76. J. Sucher, *Phys. Rev.* **107**, 1448 (1957)
77. Л. Лабзовский, *ЖЭТФ*, **59**, 167 (1970) [*Sov. Phys. JETP* **32**, 94 (1970)]
78. O. Bely, *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **1**, 718 (1968)

79. G. W. F. Drake, G. A. Victor and A. Dalgarno, *Phys. Rev.* **180**, 25 (1969)
80. M. G. Kozlov, D. English and D. Budker, *Phys. Rev. A* **80**, 042504 (2009)
81. D. Angom, K. Bhattacharya, S. D. Rindani, *Int. J. Mod. Phys. A* **22**, 707 (2007)
82. T. Zalialiutdinov, D. Solovyev, L. Labzowsky, G. Plunien, *Phys. Rev. A* **91**, 033417 (2015)
83. I. I. Sobelman, *Theory of Atomic Spectra*, Alpha Science International, (2006)
84. I. P. Grant, *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **7**, 1458 (1974)
85. Д. А. Варшалович, А. Н. Москалев, В. К. Херсонский, *Квантовая теория углового момента*, Наука, (1975)
86. T. Zalialiutdinov, D. Solovyev, L. Labzowsky, accepted in *J. Phys. B.* (2015)
87. V. M. Shabaev, *J. Phys. B* **27**, 5825 (1994)
88. N. J. Stone, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, **90**, pp. 75-176 (2005)
89. V. I. Korobov, *Phys. Rev. A*, **61**, 064503 (2000)
90. V. I. Korobov, D. Bakalov and H.J. Monkhorst, *Phys. Rev. A* **59**, R919-R921 (1999)
91. G. W. F. Drake, *Phys. Rev. A* **18**, 820 (1978)
92. J. S. Mathis, *Astrophys. J.* **125**, 318 (1957)
93. G. W. F. Drake and Z. C. Yan, *Phys. Rev. A* **46**, 2378 (1992)
94. S. A. Alexander, Sumita Datta, and R. L. Coldwell, *Phys. Rev. A* **81**, 032519 (2010)
95. T. Zalialiutdinov, D. Solovyev, L. Labzowsky and G. Plunien, accepted in *Phys. Rev. A* (2015)
96. G. W. F. Drake, *Astrophys. J.* **158**, 1199 (1969)
97. S. A. Alexander, R. L. Coldwell, *International Journal of Quantum Chemistry*, Vol. 111, 2820-2824 (2011)