САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ПЕТЕРБУРГСКИЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ ИМ.Б.П. КОНСТАНТИНОВА НАЦИОНАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЦЕНТРА "КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ"

На правах рукописи

Соловьев Дмитрий Анатольевич

Теоретические аспекты процессов фотонного рассеяния в приложениях к прецизионным спектроскопическим Экспериментам и астрофизике

1.3.3. Теоретическая физика

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени доктора физико-математических наук

НАУЧНЫЙ КОНСУЛЬТАНТ —

доктор физ.-мат. наук, профессор, Л.Н. Лабзовский

Санкт-Петербург — 2024

Оглавление

Введение

1.	Роль асимметрии профиля линии в прецизионной спектро-	
	скопии: обзор существующих подходов	29

2.	Асимметрия контура спектральной линии и нерезонансные			
	эфф	ректы	34	
	2.1.	Амплитуда рассеяния фотона на атоме	35	
	2.2.	КЭД-вывод профиля Лоренца для спектральной линии атома	39	
	2.3.	Нерезонансное продолжение профиля Лоренца спектральной		
		линии	43	
	2.4.	Нерезонансный вклад в красное крыло профиля для Ly _a пе-		
		рехода в расширяющейся Вселенной	46	
3.	Нерезонансные эффекты для полного сечения в случае \mathbf{Ly}_{lpha}			
	pace	сеяния	50	
	3.1.	Нерезонансные вклады в полном сечении рассеяния	50	
	3.2.	Метод функции Грина	53	
	3.3.	"Квадратичная" нерезонансная поправка в полном сечении		
		рассеяния за счет тонкой структуры	56	
	3.4.	Нерезонансная поправка в полном сечении рассеяния за счет		
		частотной зависимости $\Gamma_a(\omega)$	57	
	3.5.	Нерезонансная поправка с учетом сверхтонкой структры (СТС)	58	
	3.6.	Заключение по HP поправкам для Ly_{α} перехода в полном		
		сечении рассеяния	59	

4.	Нерезонансные эффекты в измерениях $1s - 2s$ частоты пе-			
	pex	ода	62	
	4.1.	НР поправки к частоте $1s - 2s$ перехода для спонтанного распада комбинированного с распадом во внешнем электри-		
		ческом поле	63	
	4 2	In и онт КЭЛ формализм	66	
	4.3.	Двухфотонное 1 <i>s</i> -2 <i>s</i> возбуждение с последующим распадом	00	
		во внешнем электрическом поле	69	
	4.4.	Заключение по НР поправкам к частоте двухфотонного 1s –		
		2s возбуждения	74	
5.	Эфе	фект квантовой интерференции (ЭКИ)	77	
	5.1.	Дифференциальное сечение рассеяния: два близких резонанса	77	
	5.2.	Угловые корреляции: эффект квантовой интерференции	81	
	5.3.	Приложение к спектроскопии водорода	84	
	5.4.	Связь между определениями частоты перехода	90	
	5.5.	Участие процесса излучения в определении частоты перехода		
		поглощения	93	
	5.6.	Приложение к спектроскопии мюонного водорода	100	
	5.7.	Применение к спектроскопии изотопа ³ Не	103	
6 .	Дву	хфотонная спектроскопия водорода и гелия	107	
	6.1.	Амплитуда и сечение двухфотонного рассеяния с последую-		
		щим излучением одного фотона	108	
	6.2.	Двухфотонная спектроскопия водорода	112	
	6.3.	Эксперименты по уменьшению заселеннсоти $2s$ состояния .	117	
	6.4.	Двухфотонная спектроскопия гелия	119	
	6.5.	Эффект теплового уширения	123	
	6.6.	Заключение по НР поправкам	125	
	6.7.	Адаптированный метод моментов для определения частоты		
		перехода	127	

	7.1.	Оценки НР поправки во внешнем электрическом поле к ча- стоте Ly линии в П 13	8
	7.2.	"Квадратичная" НР поправка к частоте Lv _a линии линейная	0
		по полю	2
	7.3.	Двухфотонный $1s-2s$ резонанс: Н и $ar{\mathrm{H}}$ атомы во внешнем	
		электрическом поле 14	4
	7.4.	Атомы Н и \overline{H} во внешнем магнитном поле 14	6
8.	Одн	но- и двухфотонные переходы 15	1
	8.1.	Вероятности перехода в различных формах и калибровках . 15	2
	8.2.	Вероятность однофотонного излучения в приближении Паули 15	4
	8.3.	Двухфотонные вероятности распада $2s$ и $2p$ состояний в ато-	
		ме водорода	8
		8.3.1. Вероятность двухфотонного <i>E1E2</i> распада для состо-	
		яния $2p$	9
		8.3.2. Вклад отрицательного спектра энергий в вероятности	
		E1M1 и $E1E2$ $2p-1s$ переходов в калибровке "ско-	
		рости" для малых значений Z	2
		8.3.3. Вероятность двухфотонного $E1M1$ распада для со-	
		стояния 2 <i>р</i> 16	4
		8.3.4. Двухфотонный распад высоковозбужденных состоя-	
		ний в водороде 16	6
	8.4.	Двухфотонный распад возбужденных уровней в водороде:	
		неоднозначность разделения на каскадное и "чистое" двух-	
		фотонное излучение	8
		8.4.1. Двухфотонный распад с наличием каскада: $3s - 2p - 1s17$	0
		8.4.2. Двухфотонный распад $4s - 1s$	6
		8.4.3. Ширина распада в рамках формализма адиабатиче-	
		ской <i>S</i> -матрицы	9
		8.4.4. Ширина однофотонного распада согласно оптической	
		теореме	3
		8.4.5. Ширина двухфотонного бескаскадного распада со-	
		гласно оптической теореме	5

		 8.4.6. Сокращение расходимостей 8.4.7. Ширина двухфотонного распада при наличии каскада 8.4.8. Ширина двухфотонного распада как мнимая часть 	186 188
		двухпетлевой радиационной поправки	189
	8.5.	Двухфотонное приближение в многофотонных процессах распада	192
9.	Bep	оятности излучения во внешнем электрическом поле	199
	9.1.	Вероятность распада уровня 2s в атоме водорода во внешнем	
		электрическом поле	199
	9.2.	Двухфотонный распад 2s и 2p водородных состояний во	
		внешнем электрическом поле	201
	9.3.	Распад высоковозбужденных состояний во внешнем электри-	
		ческом поле	205
	9.4.	Заключение по распадам во внешнем электрическом поле.	215
10	. Ис	кажение профиля линии в многофотонных процессах	:
	астр	рофизические приложения	218
	астр 10.1.	рофизические приложения . Эффект ЭИП: Ξ-схема уровней	218 220
	астр 10.1. 10.2.	рофизические приложения . Эффект ЭИП: Ξ-схема уровней	218 220
	астр 10.1. 10.2.	рофизические приложения . Эффект ЭИП: Ξ-схема уровней	218220224
	астр 10.1. 10.2.	рофизические приложения . Эффект ЭИП: Ξ-схема уровней	 218 220 224 227
	астр 10.1. 10.2. 10.3. 10.4.	рофизические приложения . Эффект ЭИП: Ξ-схема уровней	 218 220 224 227
	астр 10.1. 10.2. 10.3. 10.4.	рофизические приложения . Эффект ЭИП: Ξ-схема уровней	 218 220 224 227 231
	астр 10.1. 10.2. 10.3. 10.4.	рофизические приложения . Эффект ЭИП: Ξ-схема уровней	 218 220 224 227 231 233
	астр 10.1. 10.2. 10.3. 10.4. 10.5. 10.6.	рофизические приложения . Эффект ЭИП: Е-схема уровней	 218 220 224 227 231 233 235
	астр 10.1. 10.2. 10.3. 10.4. 10.5. 10.6. 10.7.	рофизические приложения Эффект ЭИП: Ξ-схема уровней	 218 220 224 227 231 233 235 236
	астр 10.1. 10.2. 10.3. 10.4. 10.5. 10.6. 10.7. 10.8.	рофизические приложения Эффект ЭИП: Е-схема уровней Коэффициент поглощения и вероятность выхода фотона в приближении Соболева Численные результаты: Е-схема уровней Численные результаты: Е-схема уровней Численные результаты: Е-схема уровней Структуры А-схема уровней V-схема уровней Полное заселение 2s состояния Анализ профиля линии поглощения на длине волны 21 см	 218 220 224 227 231 233 235 236
	астр 10.1. 10.2. 10.3. 10.4. 10.5. 10.6. 10.7. 10.8.	рофизические приложения Эффект ЭИП: Е-схема уровней	 218 220 224 227 231 233 235 236 238
	астр 10.1. 10.2. 10.3. 10.4. 10.5. 10.6. 10.7. 10.8.	рофизические приложения Эффект ЭИП: Е-схема уровней	 218 220 224 227 231 233 235 236 238
	астр 10.1. 10.2. 10.3. 10.4. 10.5. 10.6. 10.7. 10.8.	рофизические приложения Эффект ЭИП: Е-схема уровней	 218 220 224 227 231 233 235 236 238 239
	астр 10.1. 10.2. 10.3. 10.4. 10.5. 10.6. 10.7. 10.8.	рофизические приложения Эффект ЭИП: Е-схема уровней Коэффициент поглощения и вероятность выхода фотона в приближении Соболева Численные результаты: Е-схема уровней Численные результаты: Е-схема уровней с учетом тонкой структуры А-схема уровней V-схема уровней водорода Полное заселение 2s состояния Анализ профиля линии поглощения на длине волны 21 см атома водорода в межзвездной среде 10.8.1. Поправка к оптической толщине для трехуровневой Е-схемы 10.8.2. Недоплеровское уширение и сдвиг частоты	 218 220 224 227 231 233 235 236 238 239 242

10.8.4. Анализ результатов	246
Заключение	250
Список иллюстраций	253
Список таблиц	260
Список сокращений и условных обозначений	265
Библиография	267
Список публикаций автора диссертации	302

Введение

Актуальность работы

Диссертационная работа посвящена описанию процессов фотонного рассеяния (и, как следствие, излучения или поглощения) на простых атомных системах. Под простыми системами подразумеваются атом водорода или мюонный водород, легкие водородоподобные ионы, а также атом гелия. Описание процессов одно- и многофотонного рассеяния проводится в рамках квантово-электродинамической (КЭД) теории связанных состояний и, так называемого, формализма S-матрицы. КЭД теория получила широкое распространение, являясь наиболее строгим способом описания процессов излучения и эффектов вызывающих сдвиг энергетических уровней в нейтральных и ионизованных атомных системах. Ставшей «классической» в научных исследованиях такого рода КЭД теория изложена в учебниках предназначенных для студентов старших курсов. В качестве основных книг можно сослаться на такие монографии как [1-4] и др. Изложенная в этих книгах теория предоставила основу для дальнейших исследований, приведших к бурному развитию атомной физики. Теоретические расчеты эффектов, связанных с процессами фотонного рассеяния, неотъемлемо сопровождаются экспериментальными достижениями, направленными на повышение точности измерений и наоборот. Сравнение теоретических и экспериментальных результатов, в свою очередь, стимулирует дальнейшее развтитие теории и методов, позволяющих проводить полномочные исследования такого рода.

С первых дней квантовой механики (KM) изучение характеристик атомов [5,6], таких как энергия связанных состояний, сыграло ключевую роль в развитии современной квантовой теории поля и ее практическом применении в различных областях физики. Последующие экспериментальные наблюдения и их возрастающая точность потребовали расчета не только релятивистских поправок, но и учета более сложных эффектов, таких как, например, различные радиационные КЭД поправки [1–4].

Теоретические расчеты, проводимые в рамках КЭД теории возмущений на основе тех или иных методов и подходов [7–10], обосновываются не только конкурируещими по точности экспериментами. Описание все более «тонких» эффектов в атомах является средством понимания физических процессов, служащих, например, для определения фундаментальных физических констант, см. [11]. При этом эксперименты проводимые с различными атомными системами являются на данный момент наиболее точными. В качестве примера успеха КЭД теории можно привести работы по вычислению и измерению д-фактора электрона в многозарядных ионах (МЗИ) [12–15], позволивших уточнить массу электрона в 13 раз [16]. При этом желательны улучшения для дальнейшего прецизионного тестирования Стандартной модели физики элементарных частиц [17], а также определения значения таких физических констант как постоянная тонкой структуры, α , постоянная Ридберга, R_{∞} , и др. С помощью измерений *g*фактора электрона можно установить также ограничения накладываемые на взаимодействие электрона и легких бозонов, являющимися основанием в поисках «новой физики» [18, 19].

В настоящее время наиболее точные атомные эксперименты можно отнести к измерениям частот переходов в водороде [20, 21] с относительной погрешностью 4.2×10^{-15} , см. также [22], в гелии [23, 24], где экспериментальная точность достигает уровня нескольких долей от 10^{-12} , и в атомных часах с точностью около 10^{-17} относительной величины [25–27]. Такие точные эксперименты потребовали теоретических расчетов КЭД эффектов на уровне $\alpha^6 m^2/M$ и $\alpha^7 m$, см. [11], где α - постоянная тонкой структуры, mи M - массы электрона и ядра соответственно. Помимо точных теоретических расчетов энергий связи в атоме водорода, тонкая структура и изотопический сдвиг низколежащих состояний гелия, как правило, служат независимым инструментом для проверки фундаментальных взаимодействий. Как и в случае хорошо изученных одноэлектронных атомных систем, измеренные частоты переходов следует сравнивать с теоретическими расчетами в поисках возможного несоответствия [28].

Согласование теоретических и экспериментальных исследований выявляет трудности, к решению которых прикладываются значительные усилия. В качестве одной из самых «громких» можно назвать «загадку радиуса протона» [29]. Начиная с 2010г. вопрос о расхождении значений радиуса протона, получаемых путем измерения частот переходов в электронном (H) и мюонном (μ H) атомах водорода, служил поводом для теоретического поиска, выявления и анализа эффектов сопособных устранить имеющееся расхождение. При этом, начиная с работы [29] и последующих работ [30, 31], зарядовый радиус протона извлекаемый из экспериментов с мюонным водородом остается неизменным. В результате загадка была, главным образом, решена после опубликования данных эксперимента [32], согласовывающего значение радиуса протона для электронного и мюонного водорода с хорошей точностью. Соответствие значений было достигнуто путем экспериментального учета эффекта квантовой интерференции (ЭКИ). Последний представляет собой доминирующий вклад нерезонансных (HP) поправок, возникающих при определении частоты перехода из сечения фотонного рассеяния на атомах, см. основополагающие в этом направлении работы [33-43] и последующие работы [44-53].

В качестве другого примера можно привести сравнение теоретических и экспериментальных результатов в таких простых атомных системах как атом позитрония (Ps) и атом гелия (He). В рамках КЭД теории оба атома относятся к одним из наиболее детально изученных объектов. Сравнение экспериментальных данных с теоретическими результатами, однако, выявило значительные расхождения. Поскольку в рамках теории не удается установить источник возможной ошибки вычислений и/или обнаружить (экспериментально и теоретически) эффекты устраняющие такие расхождения, подобные различия в значениях частот переходов используются для построения гипотез о «новой физике» и верификации фундаментальных взаимодействий, см., например, работы [54–57]. В свою очередь, атом позитрония является наиболее привлекательным для теоретиков, представляя собой чисто лептонную связанную систему двух зарядов. Прецизионные эксперименты с атомом Ps можно разделить на измерения времен жизни орто- и пара-позитрония [58], и определение частот переходов тонкого [59] или сверхтонкого расщепления [60]. Сравнительный анализ значений измеренных и вычисленных величин в атоме Ps также обнаруживает имющиеся разногласия теории и эксперимента [59, 61].

Актульаность работы подчеркнута тем, что в одной из частей представленной диссертации будет рассмотрен ряд приложений, которые непосредственно можно отнести к прецизионным спектроскопическим измерениям частот переходов в водородоподобных атомах. За счет приведенных параметрических оценок рассмотренные эффекты могут быть применены к легким водородоподобным ионам. Ограничение на ионы с малым зарядом ядра Z обусловлено используемым в расчетах нерелятивистским пределом. Дополнительно к этому, в работе процесс фотонного рассеяния описывается в рамках дипольного приближения, хотя обсуждение высших мультипольных моментов фотона также будет затронуто. Используемые нерелятивистское и дипольное приближения позволяют провести оценки эффектов в ведущем порядке. Важность полученных результатов обсуждается в каждом соответствующем разделе, но может быть немедленно отмечена тем фактом, что полученные сдвиги частот находятся на уровне экспериментальной погрешности. Таким образом, последующее увеличение точности эксперимента неминуемо столкнется с обсуждаемыми в диссертации вопросами. Выявление подобных эффектов также актуально в связи с проводимыми на основе прецизионных спектроскопических экспериментов исследованиями по поиску темной материи [62–65].

В качестве не менее акутальных вопросов, обсуждаемых в данной диссертации, относятся исследования посвященные детальному сравнению спектров атомов водорода и анти-водорода. Представленные теоретические результаты в этом направлении имеют особую значимость в связи с недавними выдающимися экспериментальными достижениями по синтезу и конфайнменту атомов анти-водорода (\bar{H}) [66]. Последнее позволило провести ряд спектроскопических экспериментов в анти-протонном гелии (один из электронов замещен на анти-протон) [67], стимулировав соответствующие теоретические исследования [68, 69]. Непрерывное развитие экспериментальной техники синтеза атомов анти-водорода [70–72] позволяет проводить прецизионные экспериментальные измерения энергий Лаймана-α, сверхтонких и других переходов [73–75]. Все исследования такого рода, по непосредственному сравнению спектров материи и анти-материи, напрямую связаны с проверкой СРТ-инвариантности (Сзарядовой, Р-пространственной и Т-временной, соответственно) и/или поиску эффектов, нарушающих эту глобальную симметрию.

Другим, не менее интересным, направлением, затронутым в представленной диссертации, является описание процесса фотонного рассеяния (наряду с просто процессами излучения) в приложении к астрофизическим задачам. В частности, рассмотренные эффекты могут быть отнесены к изучению космического микроволнового фона (МКИ). Теория, описывающая МКИ, с необходимостью содержит процессы излучения (поглощения), см., например, [76]. Детальные исследования свойств микроволнового космического фона были начаты достаточно давно [77–79], но лишь недавно теоретические предсказания были подтверждены экспериментально, см. про эксперименты РЕЛИКТ [80] и СОВЕ [81] (за последний была присуждена нобелевская премия 2006 г.).

К моменту начала космологической рекомбинации ранней Вселенной реликтовое излучение было представлено распределением Планка по частотам, а аккуратный учет вкладов связанно-свободных и связанно-связанных переходов в формирующихся атомных системах позволил определить, а затем экспериментально обнаружить, анизотропию МКИ на уровне $10^{-5} - 10^{-6}$. При этом, для описания процессов ионизации/рекомбинации в атоме водорода в работах [77–79] использовалось «трехуровневое» приближение - основное 1s, возбужденное 2s состояния и континуум. Как и в случае лабораторных исследований, эксперименты [80,81] (и последующие на базе космического аппарата WMAP - Wilkinson Microwave Anisotropy Probe), достигнув точности измерений на уровне 1%, стимулировали необходимость развития теоретических методов и сопутствующих расчетов. Детальная теория рекомбинации водорода, однократно ионизованного и нейтрального атома гелия приведена в работе [76], где уже использовалось многоуровне-

вое приближение атомов и включены связно-связанные и связно-свободные переходы. Начиная с этой ключевой работы, в данном направлении зарубежными и отечественными учеными (см. работы авторов: Р.А. Сюняев, В.К. Дубрович, Е.Е. Холупенко, А.В. Иванчик, Д.А. Варшалович, Ј. Chluba, C. Hirata и мн.др.) проводилась интенсивная работа, с необходимостью включающая эффекты, вносящие вклад вплоть до порядка 0.1%. Для достижения такой точности теоретических расчетов, требуется детальное описание и анализ процессов излучения в рамках атомной физики, см., например, [82–84].

Все вышеуказанные направления исследований обобщаются необходимостью использования наиболее строгой теории при описании процессов излучения, поглощения и рассеяния фотонов на атомах. В представленной диссертации теоретическое описание рассматриваемых эффектов дается в рамках КЭД теории на основе метода Контура Линии (КЛ), см. [8]. Данный подход обладает тем явным преимуществом, что он изначально был сформулирован с целью наиболее аккуратного описания профиля спектральной линии [85]. Поскольку большая часть диссертации посвящена изучению эффектов, вызывающих асимметрию наблюдаемой формы линии, использование метода КЛ является тематически уместным.

Цели и задачи диссертационной работы

Основной целью данной работы является определение фундаментальных принципов, детальное описание и приложение к современным прецизионным экспериментам эффектов, связанных с процессом рассеяния на простых атомных системах. Как правило, в рамках спектроскопических измерений достаточным является использование резонансного профиля спектральной линии. Соответствующий профиль может быть соотнесен с процессом излучения или поглощения. Однако, достигнутый уровень точности спектроскопических экспериментов в сопряжении с высокоточными КЭД расчетами привел к необходимости учета все более «тонких» эффектов. Их выявление, а также оценка их вклада в определение частоты перехода стали неотъемлимой частью при определении частот переходов и, как следствие, определению фундаментальных физических констант. Так, недавно было показано, что определение частоты перехода на основе измеренных данных существенно уточняется путем теоретической обработки наблюдаемой спектральной линии. Как и было предсказано теоретически, экспериментально обнаружено большое влияние эффектов, возникающих за пределами резонансного приближения. К другой цели диссертации можно отнести детальное сравнение спектров материи и анти-материи во внешних полях. Изучение влияния внешнего поля на атомы водорода и антиводорода непосредственно относится к верификации СРТ-инвариантности и поиску эффектов имитирующих ее нарушение. Помимо лабораторных измерений данная диссертация нацелена на обсуждение ряда вопросов, касающихся астрофизических исследований и включающих многофотонные атомные процессы. В частности, детальное описание МКИ и ее анизотропии с необходимостью требует аккуратного теоретического описания процессов излучения. По-мимо МКИ процессы фотонного рассеяния важны и в исследованиях межзвездной среды. Фактически, исследования, представленные в рамках диссертации, относятся к роли асимметрии профиля линии в определении спектральных характристик «простых» атомов. В диссертации выявлен ряд эффектов вызывающих эту асимметрию. Без решения этих проблем реализация новой физики, ожидаемой в атомной резонансной спектроскопии в ближайшем будущем, за пределами резонансного приближения, невозможна.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи**:

- В рамках строгой КЭД теории дать детальное описание процесса рассения фотонов на атоме. Обобщить метод Котура Линии на случай выхода за рамки резонансного приближения.
- Используя построенную теорию в рамках известных подходов и приближений выявить эффекты, влияющие на определение частоты перехода. Провести соответствующие расчеты в приложениях к современным прецизионным спектроскопическим экспериментам.

- Исследовать влияние нерезонансных вкладов и многофотонных процессов излучения во внешнем электрическом поле при детальном сравнении спектральных характеристик атомов водорода и антиводорода.
- 4) Провести теоретические расчеты и оценить влияние нерезонансных и многофотонных процессов излучения в астрофизических задачах, связанных с формированием микроволнового космического фона, влияющих на определение характеристик межзвезной среды.

Научная новизна работы

- В рамках работы над диссертацией был представлен аналитический вывод и проведены соответствующие численные расчеты нерезонансных поправок к частоте перехода, возникающих в полном сечении рассеяния.
- 2) Впервые, из первопринципов КЭД теории, была учтена зависимость от частоты для ширины атомного уровня (естественная асимметрия линии). Эффект рассматрен для вычисления соответствующего сдвига резонансной частоты, а также для детального описания профиля спектральной линии в приложениях к лабораторным экспериментам и астрофизическим задачам.
- 3) В рамках разработанного подхода как аналитически, так и численно был проведен анализ асимметрии профиля спектральной линии для дифференциального сечения рассеяния, вычислены соответствующие сдвиги резонансной частоты перехода.
- 4) Используя развитые при работе над диссертаций методы и подходы, проведены оценки влияния эффектов уширения (за счет давления и внешнего теплового излучения) на прецизионное определение частоты перехода.

- 5) Проведен сравнительный анализ различных определений частоты перехода, возникающих в разных подходах. Впервые выявлена асимметрия профиля поглощения, индуцированная каскадными процессами излучения.
- 6) Предложен альтернативный способ определения частоты перехода по экспериментальным данным
- 7) В деталях обсуждаются каскадные процессы излучения в контексте астрофизических исследований. В рамках данного вопроса показана неразделимость каскадного и «чистого» излучения, обсуждается интерпретация вкладов бескаскадных «двухфотонных ширин» в каскадных процессах. Обсуждается вопрос о выделении двухфотонного звена в каскадном процессе излучения («двухфотонное приближение»).
- 8) Рассмотрены процессы двухфотонного излучения с учетом высших мультиполей фотонов для разных наборов квантовых чисел, в различных формах и калибровках. Обсуждаются двухфотонные распады высоковозбужденных состояний в контексте астрофизических приложений. Проведены расчеты вероятностей одно- и двухфотонного излучения во внешнем электрическом поле. Результаты используются для сравнения спектральных характеристик атомов водорода и анти-водорода.
- 9) Представлен анализ нерезонансных эффектов, возникающих во внешнем электрическом поле. Проведены соответветствующие оценки с целью сравнения спектров атомов водорода и анти-водорода.
- 10) Впервые исследован эффект электромагнитной индуцированной прозрачности в контексте астрофизических условий.

Практическая ценность

Теоретическая и практическая значимость диссертации определяется, в первую очередь, развитием метода Конутра Линии, его обобщением на исследования процессов вне рамок резонансного приближения [8]. Детальное описание процессов фотонного рассеяния на атомах обрело особую значимость в последние несколько лет. Их изучение вылилось в то, что данные, полученные в ходе прецизионных спектроскопических экспериментов, с необходимостью должны учитывать возникающую в измерениях асимметрию контура спектральной линии. Как следствие, практическая ценность полученных результатов выражается в непосредственном их приложении к экспериментам по измерению частот переходов. Последнее может быть достигнуто несколькими способами: а) вычислением соответствующих сдвигов частоты (с последующим их учетом в конечном результате); б) обработкой экспериментальных данных путем согласованного подбора асимметричного фитирующего контура и последующим определением частоты перехода. Будучи равноправными (см. обсуждение в диссертации) эти два подхода должны быть использованы для прецизионного определения фундаментальных физических констант.

Описание простых атомных систем (атом водорода, водородоподобных атомных систем, гелия) особенно важно, поскольку в соответствующих экспериментах точность достигает уровня 10⁻¹³ относительной величины (и выше) [21,32]. В диссертации показано, что для достижения более высокого уровня точности с необходимостью требуется учет нерезонансных эффектов. Стоит отметить, что точность измерений в атоме водорода в сочетании с имеющейся теорией дает возможность аккуратного определения фундаментальных физических констант, а поиск эффектов дающих вклад на уровне нескольких килогерц является одной из основных целей для разрешения проблемы названной «загадка радиуса протона». Наконец, последнее время стало особо популярным построение теоретических гипотез и их последующей экспериментальной верификации по поиску «новой физики». Главным образом, такие гипотезы базируются на выявлении отклонений результатов теоретических вычислений и экспериментальных измерений частот переходов. В качестве примера достаточно привести такие работы как [28] для атома гелия, [59] для позитрония и работу [62], устанавливающую экспериментальные ограничения на темную материю с помощью атомных часов. Таким образом, выявление эффектов снимающих подобные рассхождения имеет большое практическое значение для дальнейшего развития фундаментальных физических основ.

Вторым, но не менее важным обстоятельством, указывающим на практическую ценность результатов, является вопрос о детальном сравнении спектров атомов водорода и анти-водорода. Исследования, представленные в данной работе, показывают, что даже незначительные величины внешнего электрического поля, имеющиеся в лабораторных условиях, могут приводить к значительныи отличиям спектральных характристик в таких системах. Таким образом, при изучении глобальной СРТ-симметрии и процессов ее нарушающих, приведенные примеры демонстрируют необходимость учета наличия «паразитных» полей. Не менее ценным является вопрос и о поиске анти-материи во Вселенной.

Наконец, особо стоит отметить астрофизические приложения развитой в диссертации теории. Именно, астрофизические исследования показали наличие темной материи и темной энергии, на поиски которых теперь направлены усилия многих ученых. Являясь отдельным направлением исследований, в диссертации впервые рассмотрен ряд эффектов, влияющих на формирование анизотропии реликтового излучения. В частности, в работе предложены новые подходы при описании процессов фотонного рассеяния (излучения/поглощения) на атоме водорода. Как результат таких исследований обсуждается вопрос о влиянии соответствующих поправок на рекомбинацию ранней Вселенной [76].

Методы исследования

Теоретические изыскания направленные на изучение спектроскопических свойств различных атомных систем, будь то ионы (с большим или малым числом связаных электронов) или нейтральные атомы, используют уже довольно хорошо отработанные методы. Теоретическая база для отработки таких методов представленна КМ или КЭД подходами, см. [1-6, 86]. При этом существует целый ряд методов, развиваемых различными научными группами. В качестве основных подходов для решения задач по расчету энергий атомных уровней и/или описанию процессов сопровождающихся излучением можно указать следующие. Исторически первым и наиболее приспособленным для этих целей является метод адиабатической S-матрицы, разработанный в [87,88]. В основе этого подхода лежит релятивистская квантово-полевая теория, представленная в ключевой работе [89]. Явным преимуществом адиабатической теории (в отличие от широко используемого формализма «обычной» S-матрицы) является ее применение как для случая неприводимых так и для приводимых графиков в рамках диаграммной техники Фейнмана, см. [3, 90]. Другим методом расчета поправок к энергии, соответствующих приводимым и неприводимым диаграммам Фейнмана, получившим широкое распространение, является «Метод двухвременной функции Грина» (ДФГ) [2,7,91]. На данный момент именно этот подход занимает лидирующее положение в расчетах атомной стурктуры много-зарядных ионов [7]. Альтернативными методами расчета спектроскопических свойств атомов и ионов являются также «Метод оператора ковариантного вычисления» (OKB) [9,92] и «Метод контура линии» (КЛ) [8]. В рамках представленной диссертации будут использоваться главным образом метод адиабатической S-матрицы и метод контура спектральной линии.

Указанные работы, однако, представляют собой лишь базу для соответствующих вычислений и решения поставленных задач (см. раздел Цели и задачи диссертационной работы). Большое разннобразие исследований процессов фотонного рассеяния на атомных системах, имеющееся в современной литературе, должно быть расширено на случай нерезонансных эффектов. Как правило, исследования такого рода проводятся следующим образом. Во-первых, дается теоретическое описание процесса одноили многофотонного рассеяния для рассматриваемой атомной системы, например, в рамках формализма *S*-матрицы. В качестве следующего шага в полученных выражениях выделяется доминирующий вклад (резонансный). Обычно он представлен сингулярным членом в амплитуде рассеяния. Затем, методами КЭД теории проводится его регуляризация [85]. Наконец, последовательно оцениваются оставшиеся вклады. Соответствующие вычисления относятся к произвольному процессу рассеяния (например, с наличием каскадного излучения или без него). При этом, очевидно, увеличение числа фотонов усложняет теоретическое описание. Задачи относящиеся лишь к процессам излучения имеют и другое значительное упрощение. Как будет показано далее, см., например, [8], в рамках резонансного приближения часть процесса рассеяния (в данном случае поглощение) можно отбросить, подвергая детальному изучению явления, возникающие лишь в регистрируемом излучении. Так, например, в астрофизических приложениях используется именно последнее обстоятельство, т.е. разделение процесса рассеяния на отдельные части - поглощение и излучение. Как правило, такое приближение является достаточным на уровне современных измерений. Обсуждение правомочности такого разделения приложительно к прецизионныи лабораторным экспериментом будет представлено в основном тексте диссертации.

В рамках исследований, проведенных автором диссертации, было показано, что хорошо известные эффекты, например, в атомной спектроскопии, также могут быть интересны и важны в астрофизических исследованиях МКИ и межзвезной среды, а также использованы для поиска антиматерии во Вселенной. Так, для приложения эффекта ЭИП [93–95] к поиску вкладов в анизотропию МКИ использовался метод матрицы плотности и соответсвующее квантовое уравнение Лиувиля, см., например, [96,97] и мн.др. Для решения указанных уравнений использовалось стационарное (*steady state approximation*) приближение [98]. В рамках данной теории удается непосредственно получить профиль поглощения для перехода в рассматриваемой системе, который затем используется в теории переноса излучения [76, 99] с использованием приближения Соболева [100].

На протяжении всей диссертации используются методы математической физики, а также выполняются численные расчеты. Как правило, в течение всей работы выводятся аналитические выражения, которые приобретают наиболее удобный вид в нерелятивистском приближении. На основе нерелятивистского приближения становится более просто проводить численные расчеты, например, с помощью метода функции Грина [101]. При этом для выявления основного вклада в легких атомных системах нерелятивистское приближение весьма оправдано. В диссертации будут обсуждаться также дипольное приближение и выход за его рамки (учет высших мультиполей), и будет использоваться метод *B*-сплайнов с наложенным условием дуального кинетического баланса для суммирования по промежуточным состояниям дираковского спектра энергий [102].

Степень достоверности и апробация результатов

Достоверность полученных результатов основывается на точном соответствии со многими заключениями, представленными в научной литературе другими авторами. При этом можно выделить два типа соответсвия: а) полученный в ходе наших исследований результат был позже подтвержден и б) рассмотренные ранее другими авторами эффекты и полученные значения были подтверждены в наших исследованиях с целью дальнейшего их развития. Кроме того, отдельно необходимо отметить результат эксперимента [32], который явно указал на наличие асимметрии профиля линии, его значимость и роль нерезонансных эффектов в прецизионных спектроскопических экспериментах. Большую часть рассмотренных в диссертации результатов можно отнести к теоретическим предсказаниям. Величина вкладов, описываемых эффектов, находится на уровне современной точности экспериментов или близкой к ней, что позволяет утверждать о необходимости их учета. С другой стороны, незначительность полученных величин относительно экспериментальной погрешности также важна и показывает, что соответствующие измерения не подвержены таким эффектам. Как таковые могут быть указаны нерезонансные эффекты, значимые для измерений частот переходов в атоме водорода и несущественные для мюонного водорода. В качестве примера можно указать и исследования двухфотонных процессов излучения для высоковозбужденных состояний, которые качественно оценивают возможность ограничения числа переходов, необходимых при детальном описании процессов формирования микроволнового космического фона. Другим примером могут служить результаты исследований эффекта электромагнитной индуцированной прозрачности в космологических условиях ранней Вселенной или межзвездной среды. Так было показано, что явление электромагнитной индуцированной прозрачности может приводить к искажению космического фона на уровне 1% (последнее представляет современный уровень точности измерений МКИ). Наконец, исследования процессов излучения во внешнем электрическом поле для атома анти-водорода показывают, что даже незначительные (паразитные) величины поля могут приводить к значительным различиям спектров атома анти-материи и обычного водорода. Для выявления данного эффекта использовались результаты хорошо известных работ, полученных для других целей (см. основной текст диссертации и [103–105]).

Результаты работы неоднократно докладывались на научных семинарах кафедры квантовой механики физического факультета СПбГУ, рабочих семинарах отдельных научных групп Университета ИТМО, научных семинарах в теоретическом отделе ПИЯФ, научных семинарах зарубежных ВУЗов (Технический Университет Дрездена и Гейдельбергском Университете), а также на международных и отечественных конференциях:

- «Одно-, двух- и трехфотонные переходы между 2s-, 2p- и 1s-уровнями для атомов водорода и антиводорода во внешнем электрическом поле и без него», 22-23 января, 2008, Международный семинар "Фоковские чтения. Современные проблемы физики СПбГУ, физический факультет, Санкт-Петерубрг, Россия
- «Two-photon transitions in hydrogen atom: beyond the dipole approximation», Paris Workshop on Cosmological Recombination, Jule 08-10, 2009, Universite Paris-Sud, Paris, France
- «Многофотонные процессы излучения с наличием каскадов в космологической рекомбинации для атома», 3-е Всероссийское совещание "Прецизионная физика и фундаментальные физические константы Учреждение РАН Физико-Технический Институт им. А.Ф. Иоф-

фе, 6-10 декабря 2010, Санкг-Петерубрг, Россия

- «Multiphoton processes in atomic physics and astrophysics», Workshop on the Proton Radius Puzzle, Europian Centre for Theoretical Studies in Nuclear Physics and Related Areas, October 29 - November 2, 2012, Trento, Italy
- «Quantum Optics Effects in Astrophysics», 11th International Colloquium on Atomic Spectra and Oscilator Strengths for Astrophysical and Laboratory Plasmas, University of Mons, August 5-9, 2013, Mons, Belgium
- «Hydrogen and Antihydrogen spectra in presence of external fields», Совещание по прецизионной физике и фундаментальным физическим константам, 1-5 декабря, 2014, Дубна, Россия
- «Influence of external fields on the hydrogen atom in some problems of astrophysics», 46th Conference of the European Group on Atomic Systems, 1-4 July, 2014, Lille, France
- «QED derivation of energy shift and line broadening induced by the BBR for bound electron», «Темные века и белые ночи (Спектроскопия Космического микроволнового фона)», 21 июня 2016, Санкт-Петерубрг, Россия
- «Термальные КЭД эффекты в задачах атомной физики и астрофизики», 52-я Зимняя Школа ПИЯФ, 26 февраля - 4 марта, 2018, Рощино, Россия
- «Recombination cross-section for the hydrogen atom in presence of blackbody radiation», 13 th International Colloquium on Atomic Spectra and Oscillator Strengths for Astrophysical and Laboratory Plasmas (ASOS2019), 23-27 June, 2019, Fudan University, Shanghai, China
- «Thermal QED theory for bound states», Международная конференция по естественным и гуманитарным наукам «Science SPbU 2020», 25 декабря 2020, СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия.

- «Thermal shift of atomic levels in hydrogen: influence on the determination of the proton radius», LXXI Международная конференция по ядерной физике «Ядро-2021. Физика атомного ядра и элементарных частиц. Ядерно-физические технологии», 20-25 сентября 2021, СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия.
- «The recombination process of a hydrogen atom in the presence of blackbody radiation», LXXI «Физика и астрофизика - от фундаментальных констант до космологии, Памяти Д.А. Варшаловича», 27-28 сентября 2021, Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе (ФТИ им. А.Ф. Иоффе), Санкт-Петербург, Россия.
- «Thermal QED theory for bound states», Школа-конференция «Современные проблемы химической физики и теоретической химии», 25-29 июля 2022 г., Иркутск, п. Большие Коты, Россия.
- «Thermal QED theory for bound states», Международная конференция по естественным и гуманитарным наукам «Science SPbU 2022», 21 ноября 2022, СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия.
- «Radiative corrections to the bound electron g-factor and level width in the presence of a magnetic field combined with blackbody radiation», Международная Летняя Конференция по Теоретической Физике (ISCTP-2023), 3-7 июля 2023г., МФТИ Центр Теоретической Физики им. Абрикосова, Долгопрудный, Россия.
- «Роль асимметрии спетральной линии в прецизионной спектроскопии атомов», Всероссийская конференция по естественным и гуманитарным наукам с международным участием «Наука СПбГУ - 2023», 21 ноября 2023г., Санкт-Петербург, Россия.

Результаты исследований неоднократно докладывались в соавторстве доц. Т.А. Залялютдиновым, аспирантом А.А. Аникиным, студентом Д.А. Даниловым.

Публикации

Основные результаты по теме диссертации изложены в виде 39 опубликованных работ, из которых 39 изданы в журналах, рекомендованных ВАК, в WoS и Scopus - 38 (тезисы не приводятся). Две работы были опубликованы в Physical Review Letters, еще две в Physics Reports, имеющими наивысший импакт-фактор по данному научному направлению (9.161 и 30.51, соответственно), одна направлена в Physics Reports. Всего автором опубликовано более 70 работ в реферируемых зарубежных и отечественных журналах, цитируемых базами данных Scopus, Web of Science и BAK РФ.

Автором диссретации была разработана и зарегестрирована «Программа для расчета сечений и коэффициентов рекомбинации в произвольное состояние атома водорода», дата регистрации 3 марта 2020, №2020612747. Правообладатель: федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет» (СПбГУ). Авторы: Соловьев Д.А. и Тряскин Я.В.

Личный вклад автора

Работа выполнена в Санкт-Петербургском Государственном Университете. Ряд исследований проводился совместно с А.А. Аникиным, Т.А. Залялютдиновым, Е. Черновской, Г. Щедриным, О. Андреевым, В.К. Дубровичем, Г. Плюниеном, Г. Зоффом и Л.Н. Лабзовским. Большинство результатов исследований, представленных в диссертации, опубликовано в трудно разделимом соавторстве, для исключения двусмысленности в работе соответствующие ссылки указаны с полным перечнем имен. При этом представленные и выносимые на защиту результаты получены лично автором.

Структура диссертации

Диссертация состоит из введения, 10 глав, заключения, списка сокращений и условных обозначений, 28 рисунков, 26 таблиц, библиографии из 280 наименований и списка публикаций автора, выносимых на защиту, состоящего из 39 наименований. В каждой главе обсуждаются основные полученные результаты. Объем диссертации составляет 307 страниц.

Основные научные результаты

- Нерезонансное расширение контура Лоренца, см. вторую главу в arXiv:2204.12199 [physics.atom-ph], 26 Apr 2022 из списка публикаций автора диссертации (все аналитические вычисления проведены лично автором диссертации)
- Нерезонансные поправки к полному сечению фотонного рассеяния, см. работы [8, 35–37, 40–42, 106] (личный вклад составляет не менее 80%)
- Нерезонансные поправки к дифференциальному сечению фотонного рассеяния, см. четвертую главу в arXiv:2204.12199 [physics.atom-ph], 26 Арг 2022 и работы [42, 52, 53, 107] (личный вклад составляет не менее 80%)
- Естественная асимметрия профиля спектральной линии, см. работы [8,37] из списка публикаций автора диссертации (в частности третий параграф в [37] и раздел 3.8 в [8]; все аналитические и численные вычисления проведены лично автором диссертации)
- Эффект квантовой интерференции, см. главу 4 в arXiv:2204.12199 [physics.atom-ph], 26 Apr 2022; arXiv: 2311.12606 [physics.atom-ph], 21 Nov 2023 (из списка публикаций автора диссертации) и работы [52, 53, 108] (личный вклад составляет не менее 80%)
- Соответствие определений частоты перехода за рамками резонансного приближения, см. раздел 4.3 в arXiv:2204.12199 [physics.atom-ph], 26 Apr 2022; а также arXiv: 2311.12606 [physics.atom-ph], 21 Nov 2023 (из списка публикаций автора диссертации, все аналитические и численные вычисления выполнены лично автором диссертации), работы [52, 53, 108]

- Метод моментов, адаптированный к определению частот переходов, см. работу [109] (все аналитические и численные вычисления проведены лично автором диссертации)
- Угловые корреляции в приложении к прецизионной спектроскопии атома водорода, см. разделы 4.2, 5.1, 5.2 в arXiv:2204.12199 [physics.atom-ph], 26 Apr 2022; arXiv: 2311.12606 [physics.atom-ph], 21 Nov 2023 и работы [52, 53, 108] (личный вклад составляет не менее 80%)
- Угловые корреляции применительно к атомам мюонного водорода и гелия, см. разделы 4.4, 4.5, 5.3 в arXiv:2204.12199 [physics.atom-ph], 26 Apr 2022 (личный вклад составляет не менее 80%)
- Угловые корреляции в двухфотонной спектроскопии, см. разделы 5.1, 5.2 и 5.3 в arXiv:2204.12199 [physics.atom-ph], 26 Apr 2022, а также [53,107] (личный вклад составляет не менее 80%)
- Эффект теплового уширения в нерезонансных поправках, см. раздел 5.4 в arXiv:2204.12199 [physics.atom-ph], 26 Apr 2022 (все аналитические вычисления проведены лично автором диссертации)
- Влияние излучения на профиль поглощения за рамками резонансного приближения, см. раздел 3 работы arXiv: 2311.12606 [physics.atomph], 21 Nov 2023 (все аналитические вычисления проведены лично автором диссертации)
- Двухфотонные (мультипольные) процессы излучения, см. работы [82, 83,110–118] (все аналитические вычисления проведены лично автором диссертации, общий вклад можно оценить не менее 80%)
- Одно- и двухфотонные процессы распада во внешнем электрическом поле, см. работы [106, 112–114, 119] (все аналитические вычисления проведены лично автором диссертации)
- Двух- и многофотонные распады высоковозбужденных состояний, см. работы [82–84, 115–125] (личный вклад составляет не менее 80%)

- Спектральные характеристики атомов водорода и анти-водорода во внешнем электрическом поле, см. работы [38,39,106,112–114,119,126, 127] (личный вклад составляет не менее 80%)
- Нерезонансные поправки во внешнем электрическом поле, см. работы [38, 126] (все аналитические и численные вычисления проведены лично автором диссертации)
- Вероятности двухфотонного распада с наличием каскадов, см. работы [82, 84, 115, 116, 118, 120, 121] (личный вклад составляет не менее 80%)
- Неразделимость каскадного и «чистого» излучения, см. работы [82, 120, 121] (личный вклад составляет не менее 80%)
- «Двухфотонное приближение» в многофотонных распадах, см. работы [115,116,118,120] (все аналитические вычисления проведены лично автором диссертации, общий вклад составляет не менее 80%)
- Двухфотонная ширина атомного уровня как мнимая часть энергетического сдвига, см. работы [84, 121] (личный вклад составляет не менее 80%)
- Эффект электромагнтиной индуцированной прозрачности в космологических условиях ранней Вселенной, см. работы [128,129] (все аналитические вычисления проведены лично автором диссертации, общий вклад составляет не менее 80%)
- Эффект электромагнитной индуцированной прозрачности профиль линии 21 см в атоме водорода, см. работу [130] (все выполнено лично автором диссертации)

Положения, выносимые на защиту

• Нерезонансное расширение контура Лоренца; Нерезонансные поправки к полному и дифференциальному сечениям фотонного рассеяния; Естественная асимметрия профиля спектральной линии

- Эффект квантовой интерференции; Соответствие определений частоты перехода за рамками резонансного приближения; Угловые корреляции в приложении к прецизионной спектроскопии атома водорода, атомам мюонного водорода и гелия; Угловые корреляции в двухфотонной спектроскопии; Влияние излучения на профиль поглощения; Эффекты уширения в нерезонансных поправках; Метод моментов
- Двухфотонные (мультипольные) процессы излучения; Одно- и двухфотонные процессы распада во внешнем электрическом поле; Двухи многофотонные распады высоковозбужденных состояний; Атомы водорода и анти-водорода во внешнем электрическом поле; Нерезонансные поправки во внешнем электрическом поле, см. работы [4,6] из списка публикаций автора диссертации
- Вероятности двухфотонного распада с наличием каскадов; Неразделимость каскадного и «чистого» излучения; «Двухфотонное приближение» в многофотонных распадах; Двухфотонная ширина атомного уровня как мнимая часть энергетического сдвига
- Эффект электромагнтиной индуцированной прозрачности в космологических условиях ранней Вселенной; Эффект электромагнтиной индуцированной прозрачности в линии 21 см атома водорода

Глава 1.

Роль асимметрии профиля линии в прецизионной спектроскопии: обзор существующих подходов

Квантовомеханический вывод естественного профиля линии в атомной физике был представлен Вайскопфом и Вигнером [131]. С развитием релятивистской квантовой теории поля данный вывод был пересмотрен в рамках теории квантовой электродинамики (КЭД) и формализма *S*-матрицы для одноэлектронных атомов в основополагающей статье Ф. Лоу [85]. Позднее КЭД-теория профиля линии была также переформулирована для многоэлектронных атомов [132] и применена к перекрывающимся резонансным линиям в многозарядных ионах (МЗИ) [133]. Комбинация этих подходов с соответствующим развитием методов, начатых в [87, 89], была успешно применена для теоретических расчетов радиационных КЭД-поправок к уровням энергии и вероятностям переходов в атомах и ионах в рамках метода Контура спектральной Линии (КЛ) [8].

Дальнейшее развитие теории профиля линии тесно связано с экспериментальными успехами по измерению частоты перехода в атоме водорода [20, 21, 134], где абсолютное значение частоты 1s - 2s двухфотонного перехода было установлено с точностью порядка 10⁻¹⁵ относительной величины. Такие эксперименты стимулировали интерес к теоретическим исследованиям эффектов, выходящих за рамки резонансного приближения, в основу которых легли результаты, полученные ранее для МЗИ [33,34]. Теоретический анализ процесса рассеяния фотонов (в рамках которого возникает КЭД определение профиля спектральной линии [85]) был возобновлен для атома водорода в работе [35]. Одно из важнейших следствий теории КЛ состоит в представлении вводных положений о нерезонансных (HP) поправках к частоте перехода, возникающих за счет нерезонансных членов в амплитуде рассеяния. Различные применения соответствующих поправок к полному сечению можно найти в [8, 84], хотя для атома водорода они выходят за рамки современной точности эксперимента.

НР эффекты привлекли особый интерес исследователей в последнее десятилетие и обсуждались в ряде теоретических работ [35–37, 43, 135, 136]. В первую очередь этому способствовали достижения в области высокоточных спектроскопических экспериментов [21, 134, 137]. В частности, эксперимент [21] по измерению частоты перехода 1s - 2s является одним из наиболее точных из когда-либо проводившихся в оптической области, с результирующей абсолютной погрешностью около 10 Гц. Оценка соответствующих НР поправок в рамках теории КЭД и КЛ подхода была выполнена в [37, 40]. Важный экспериментальный результат был также представлен в работе [137], где был измерен Лайман- α (Ly_{α}) переход 1s - 2p в атоме водорода. Соответствующие оценки нерезонансных поправок к частоте 1s - 2pперехода были выполнены в [35–37, 43, 136]. Позднее аналогичные расчеты были проведены с учетом интерференции между соседними сверхтонкими компонентами уровня 2p [41].

Непрерывное развитие теории и эксперимента приводит к появлению новых задач. Одним из наиболее ярких примеров является проблема, известная в литературе как «загадка радиуса протона», возникшая в результате спектроскопических экспериментов на мюонном водороде [29]. Первый успех в решении этой задачи был достигнут в [32], где была учтена асимметрия наблюдаемого профиля линии для перехода 2s - 4p в водороде, что привело зарядовый радиус протона практически в соответствие с величиной, извлекаемой из экспериментов на мюонном водороде. Более поздние эксперименты по протон-электронному рассеянию и измерениям лэмбовского сдвига [138, 139] также приблизились к результату [29].

Хотя результаты работы [32] представляют существенный прогресс, достигнутый путем учёта нерезонансных эффектов в сечении рассеяния и, в частности, квантовой интерференции, как их наиболее значимой части, вопрос об аналогичном влиянии на другие прецизионные спектроскопические эксперименты широко обсуждается в научной литературе в настоящее время [51, 140–142]. Например, результаты недавних работ по измерению энергии перехода 2s - 8d в водороде вновь указывают на несоответствие в определениях зарядового радиуса протона [143]. Аналогичные проблемы остаются и в двухфотонной спектроскопии при измерении интервала 1s-3s [22,144]. Влияние эффекта квантовой интерференции (ЭКИ) в рамках двухфотонной спектроскопии по определению частоты перехода 1s-3s в атоме водорода было детально изучено в [53,145,146]. Аналогичный анализ был также выполнен прилагательно к однофотонной спектроскопии атома водорода в [51] и его применения к измерениям лэмбовского сдвига и тонкой структуры триплета гелия. Детальный анализ ЭКИ как части НР эффектов может быть адресован к работам [50, 147, 148]. В частности, в [50] было показано, что для мюонного водорода, дейтерия и гелия-3 эти эффекты оказываются либо незначительными, либо намного ниже уровня экспериментальной точности. Позднее, анализ асимметрии профиля линии, представленный в [49], показал, что существуют "магические углы при которых квантовая интерференция исчезает (см. также [46, 47]). Недавно эффект квантовой интерференции был также рассмотрен в [148] в приложении к спектроскопии литиеподобных многозарядных ионов.

В спектроскопических исследованиях многоэлектронных систем следует выделить легкие двухэлектронные атомные системы. Достигнутая недавно точность измерений частот переходов между уровнями энергии атома гелия стимулировала ряд теоретических исследований по вычислению КЭД-поправок вплоть до порядка $m\alpha^7$ [54, 149]. В результате сравнительного анализа теоретических и экспериментальных значений было обнаружено существенное расхождение между соответствующими результатами для частоты перехода $2^3S_1 - 3^3D_1$ [54]. Соответствующие HP поправки для энергетических интервалов $2^3S_1 - n^3D_1$ (n = 3, 4, 5) были оценены в [54]. В частности, в проведенном анализе было выявлено, что эффект квантовой интерференции, ранее не учтенный, может по крайней мере частично устранить существующий дисбаланс между теорией и экспериментом [56].

Изучение многофотонных процессов рассеяния и асимметрии профиля линии, применяемой к астрофизическим проблемам, также представляет существенный интерес [150–152]. Будучи мощным инструментом исследования динамики эволюции Вселенной на ранней стадии, точные расчеты переноса излучения в межзвездной и межгалактической среде с соответствующей оценкой сечений рассеяния и получением профилей линий являются чрезвычайно важными [76, 99]. До недавнего времени решение проблем, связанных с переносом излучения, рассматривалось только в резонансном приближении [153–155]. В [153] было показано, что асимметрия профиля Ly_α линии может привести к недооценке красного смещения некоторых астрофизических источников, которые наблюдаются в настоящее время. Учет нерезонансных эффектов может приводить к отклонению красного смещения, достигающего величины порядка $\delta z \sim 10^{-3} - 10^{-4}$ [156]. В этом же контексте обсуждался эффект электромагнитной индуцированной прозрачности, которая приводит к искажению профиля поглощения [128–130].

Ключевые работы [33, 35, 37, 42, 85] открыли совершенно новую область исследований, посвященную HP эффектам и их роли в современной спектроскопии. С тех пор различными авторами и исследовательскими группами ведутся работы в данном направлении [41, 43]. Наиболее важные результаты касаются не только спектроскопии атомов водорода и гелия, но также многозарядных ионов и мезоатомов. Впоследствии многочисленные работы, см., например, [36, 40, 41], подтвердили все предсказанные ранее особенности HP поправок. Важным является и то, что существует влияние метода регистрации на измеряемое значение частоты [42]. Зависимость HP поправок от условий эксперимента изучалась также в [50, 52, 53, 148].

Поскольку прецизионная спектроскопия атомных систем имеет большое значение в современной физике, преследуя цель, например, прецизионно-

го определения фундаментальных физических констант, все более важным становится учет не только КЭД-поправок, но и НР эффектов. Далее обсуждаются последние достижения в изучении нерезонансных эффектов и асимметрии профиля линии с использованием строгой теории квантовой электродинамики.

Глава 2.

Асимметрия контура спектральной линии и нерезонансные эффекты

Одной из важных особенностей теории профиля линии в КЭД является появление нерезонансных поправок. Впервые они были введены в работе [85], где была сформулирована КЭД-теория естественного (лоренцевского) профиля линии в приложении к атомной физике. НР поправки указывают предел применимости резонансного приближения, когда в амплитуде процесса остается только доминирующий (резонансный) член, подробнее см. [8,84]. Если искажение профиля Лоренца, вызванное НР вкладами, невелико, то поправку можно рассматривать как дополнительный энергетический сдвиг частоты перехода. В отличие от всех других энергетических поправок, эта поправка зависит от конкретного процесса измерения разности энергий между уровнями, и поэтому ее следует каждый раз теоретически вычислять в соответствии с процессом используемым в эксперименте.

Ниже рассматривается полностью релятивистский вывод дифференциального и полного сечений рассеяния фотонов в рамках теории КЭД и формализма *S*-матрицы, который дает исчерпывающее изложение нерезонансных эффектов и их влияния на определение частоты перехода.

2.1. Амплитуда рассеяния фотона на атоме

Рассмотрим сначала процесс рассеяния фотона на одноэлектронном атоме [85, 157]. Следуя теории, описанной в [2], соответствующие диаграммы Фейнмана показаны на Рис. 2.1. Пусть *i*, *n* и *f* обозначают начальное, промежуточное и конечное состояния электрона, а $\{\omega j_{\gamma} m_{\gamma} s\}$ и $\{\omega' j'_{\gamma} m'_{\gamma} s'\}$ – квантовые числа начального и конечного фотонов, соответственно. Здесь ω это частота, $j_{\gamma} m_{\gamma}$ обозначают угловой момент фотона и его проекцию, а *s* определяет четность состояния фотона.



Рис. 2.1. Рассеяние фотона на связанном электроне. Волнистая линия обозначает поглощение, если стрелка направлена к вершине, или испускание, если стрелка направлена от вершины, фотона, а двойная сплошная линия означает связанный электрон в поле ядра (картина Фарри (Furry)); ω_1, ω_2 — частоты поглощенных и испущенных фотонов, *i*, *n* и *f* обозначают начальное, промежуточное и конечное состояния электрона, соответственно.

Тогда элемент S-матрицы процесса рассеяния, см. [2], равен

$$S_{fi}^{(2)} = (-ie)^2 \int d^4x d^4y \Big[\overline{\psi}_f(x) \gamma^{\mu} A^{(\mathbf{k}_2,\lambda_2)*}_{\mu}(x) S(x,y) \gamma^{\nu} A^{(\mathbf{k}_1,\lambda_1)}_{\nu}(y) \psi_i(y) + (2.1) \\ \overline{\psi}_f(x) \gamma^{\nu} A^{(\mathbf{k}_1,\lambda_1)}_{\nu}(x) S(x,y) \gamma^{\mu} A^{(\mathbf{k}_2,\lambda_2)*}_{\mu}(y) \psi_i(y) \Big].$$

Здесь $\psi_A(x) = e^{-iE_A t} \psi(x)$ — решение уравнения Дирака для связанного электрона в состоянии A и

$$A^{(\boldsymbol{k},\lambda)}_{\mu}(x) = \sqrt{\frac{2\pi}{\omega}} e^{(\lambda)}_{\mu} e^{-\mathrm{i}kx}, \qquad (2.2)$$

представляет волновую функцию фотона в координатном представлении, где $\omega = |\mathbf{k}|$ и $e_{\mu}^{(\lambda)}$ это компоненты поляризации фотона. Комплексное сопря-

жение волновых функций фотона в уравнении (2.1) означает испускание фотона. Нормировочный коэффициент в (2.2), $\sqrt{2\pi/\omega}$, выбран так, чтобы получить кулоновское взаимодействие (для нулевой компоненты) между электроном и ядром в виде Ze^2/r .

В выражении (2.1) S(x, y) обозначает фейнмановский пропагатор атомного электрона [2], который можно представить с помощью разложения:

$$S(x,y) = \frac{\mathrm{i}}{2\pi} \int_{\infty}^{-\infty} d\Omega e^{\mathrm{i}\Omega(t_x - t_y)} \sum_n \frac{\psi_n(\boldsymbol{x})\overline{\psi}_n(\boldsymbol{y})}{E_n(1 - \mathrm{i}0) + \Omega}.$$
 (2.3)

Здесь суммирование проводится по всему дираковскому спектру электрона в поле ядра. Рассмотрение реальных фотонов приводит к условию поперечности с поляризацией фотона, задаваемой 3-вектором *e*, и соответствующей волновой функцией

$$\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{e}}(\boldsymbol{r}) = \sqrt{\frac{2\pi}{\omega}} \boldsymbol{e} e^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}.$$
(2.4)

Интегрирование по временным переменным и частоте Ω в уравнении (2.1) дает

$$S_{fi}^{(2)} = -2\pi i \delta(E_i + \omega_1 - E_f - \omega_2) U_{fi}^{(2)}, \qquad (2.5)$$

где $U_{fi}^{(2)}$ представляет собой амплитуду процесса однофотонного рассеяния $i+\gamma \to f-\gamma \; [8,84]$

$$U_{fi}^{(2)} = e^{2} \left[\sum_{n} \frac{\left(\alpha A_{k_{2},e_{2}}^{*} \right)_{fn} \left(\alpha A_{k_{1},e_{1}} \right)_{ni}}{E_{n}(1-\mathrm{i}0) - E_{i} - \omega_{1}} + \sum_{n} \frac{\left(\alpha A_{k_{1},e_{1}} \right)_{fn} \left(\alpha A_{k_{2},e_{2}}^{*} \right)_{ni}}{E_{n}(1-\mathrm{i}0) - E_{f} + \omega_{1}} \right] (2.6)$$

Здесь введены слудующие обозначения: $\alpha A_{k,e}$ и $\alpha A^*_{k,e}$ — операторы поглощения и испускания фотонов, соответственно. Тогда дифференциальное сечение процесса определяется соотношением:

$$d\sigma_{fi} = 2\pi \left| U_{fi}^{(2)} \right|^2 \delta(E_i + \omega_1 - E_f - \omega_2) \frac{d^3 k_2}{(2\pi)^3}.$$
 (2.7)
где $d^3k_2 = \omega_2^2 d\omega_2 d\mathbf{n}_{k_2}, \, \omega_2 = |\mathbf{k}_2|$ - частота фотона и $\mathbf{n}_{k_2} = \mathbf{k}_2/|\mathbf{k}_2|$ задает единичный вектор распространения фотона (последний также будет зачастую обозначаться $\boldsymbol{\nu}$).

Матричные элементы (2.6) можно вычислить с помощью парциального разложения:

$$\boldsymbol{e}e^{-\mathbf{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}} = \sum_{j_{\gamma}m_{\gamma}s} \left[\boldsymbol{e}\boldsymbol{Y}_{j_{\gamma}m_{\gamma}}^{(s)}(\boldsymbol{n}_{k})\right] \boldsymbol{A}_{j_{\gamma}m_{\gamma}}^{(s)*}(\boldsymbol{n}_{r}), \qquad (2.8)$$

где $m{n}_r = m{r}/|m{r}|$ и $m{A}_{j_\gamma m_\gamma}^{(s)}$ являются компонентами вектор-потенциала

$$\boldsymbol{A}_{j_{\gamma}m_{\gamma}}^{(-1)}(\boldsymbol{n}_{r}) = \sqrt{\frac{j_{\gamma}}{2j_{\gamma}+1}}g_{j_{\gamma}-1}(kr)\boldsymbol{Y}_{j_{\gamma}j_{\gamma}-1m_{\gamma}}(\boldsymbol{n}_{r}) +$$

$$\sqrt{\frac{j_{\gamma}+1}{2j_{\gamma}+1}}g_{j_{\gamma}+1}(kr)\boldsymbol{Y}_{j_{\gamma}j_{\gamma}+1m_{\gamma}}(\boldsymbol{n}_{r}),$$
(2.9)

$$\boldsymbol{A}_{j_{\gamma}m_{\gamma}}^{(0)}(\boldsymbol{n}_{r}) = g_{j_{\gamma}}(kr)\boldsymbol{Y}_{j_{\gamma}j_{\gamma}m_{\gamma}}(\boldsymbol{n}_{r}), \qquad (2.10)$$

$$\boldsymbol{A}_{j_{\gamma}m_{\gamma}}^{(+1)}(\boldsymbol{n}_{r}) = \sqrt{\frac{j_{\gamma}+1}{2j_{\gamma}+1}}g_{j_{\gamma}-1}(kr)\boldsymbol{Y}_{j_{\gamma}j_{\gamma}-1m_{\gamma}}(\boldsymbol{n}_{r}) + \qquad (2.11)$$
$$\sqrt{\frac{j_{\gamma}}{2j_{\gamma}+1}}g_{j_{\gamma}+1}(kr)\boldsymbol{Y}_{j_{\gamma}j_{\gamma}+1m_{\gamma}}(\boldsymbol{n}_{r}),$$

и $oldsymbol{Y}_{jm}^{(s)}$ — компоненты сферического тензора:

$$\boldsymbol{Y}_{j_{\gamma}m_{\gamma}}^{(-1)}(\boldsymbol{n}_{k}) = \sqrt{\frac{j_{\gamma}}{2j_{\gamma}+1}}\boldsymbol{Y}_{j_{\gamma}j_{\gamma}-1m_{\gamma}}(\boldsymbol{n}_{k}) - \sqrt{\frac{j_{\gamma}+1}{2j_{\gamma}+1}}\boldsymbol{Y}_{j_{\gamma}j_{\gamma}+1m_{\gamma}}(\boldsymbol{n}_{k}), \quad (2.12)$$

$$\boldsymbol{Y}_{j_{\gamma}m_{\gamma}}^{(0)}(\boldsymbol{n}_{k}) = \boldsymbol{Y}_{j_{\gamma}j_{\gamma}m_{\gamma}}(\boldsymbol{n}_{k}), \qquad (2.13)$$

$$\boldsymbol{Y}_{j_{\gamma}m_{\gamma}}^{(+1)}(\boldsymbol{n}_{k}) = -\sqrt{\frac{j_{\gamma}+1}{2j_{\gamma}+1}}\boldsymbol{Y}_{j_{\gamma}j_{\gamma}-1m_{\gamma}}(\boldsymbol{n}_{k}) - \sqrt{\frac{j}{2j+1}}\boldsymbol{Y}_{j_{\gamma}j_{\gamma}+1m_{\gamma}}(\boldsymbol{n}_{k}). \quad (2.14)$$

Векторная сферическая гармоника \boldsymbol{Y}_{jlm} в уравнениях (2.12)-(2.14) определяется следующим образом:

$$\boldsymbol{Y}_{j_{\gamma}l_{\gamma}m_{\gamma}}(\boldsymbol{n}_{k}) = \sum_{m_{\gamma}\mu} C^{j_{\gamma}m_{\gamma}}_{l_{\gamma}m_{\gamma}1\mu} Y_{l_{\gamma}m_{\gamma}}(\boldsymbol{n}_{k}) \boldsymbol{\chi}_{\mu}.$$
(2.15)

Здесь χ_{μ} это спиновая часть функции частицы со спином единица, а Y_{lm} — сферическая гармоника. Функция $g_{j_{\gamma}}(kr)$ в выражениях (2.9)-(2.11) связана со сферической функцией Бесселя $j_{j_{\gamma}}(kr)$

$$g_{j_{\gamma}}(kr) = 4\pi \mathrm{i}^{j_{\gamma}} j_{j_{\gamma}}(kr).$$
(2.16)

Используя выражения (2.9)-(2.11), оператор, входящий в формулу (2.6), может быть записан в виде мультипольного разложения:

$$\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{e}}^{*} = \sqrt{\frac{2\pi}{\omega}} \sum_{j_{\gamma}m_{\gamma}s} \left[\boldsymbol{e}\boldsymbol{Y}_{j_{\gamma}m_{\gamma}}^{(s)}(\boldsymbol{n}_{\boldsymbol{k}})\right] \boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{A}_{j_{\gamma}m_{\gamma}}^{(s)*}.$$
(2.17)

Наконец, вводя обозначение

$$C_{j_{\gamma_{2}}m_{\gamma_{2}}s_{2}}^{j_{\gamma_{1}}m_{\gamma_{1}}s_{1}}(\boldsymbol{e}_{1},\boldsymbol{n}_{\boldsymbol{k}_{1}};\boldsymbol{e}_{2},\boldsymbol{n}_{\boldsymbol{k}_{2}}) = \left[\boldsymbol{e}_{1}\boldsymbol{Y}_{j_{\gamma_{1}}m_{\gamma_{1}}}^{(s_{1})}(\boldsymbol{n}_{\boldsymbol{k}_{1}})\right] \left[\boldsymbol{e}_{2}\boldsymbol{Y}_{j_{\gamma_{2}}m_{\gamma_{2}}}^{(s_{2})}(\boldsymbol{n}_{\boldsymbol{k}_{2}})\right]^{*}, \quad (2.18)$$

амплитуда перехода (2.6) принимает вид [158]:

$$U_{fi}^{(2)} = e^2 \frac{2\pi}{\sqrt{\omega_1 \omega_2}} \left[\sum_{\substack{j_{\gamma_1} m_{\gamma_1} s_1 \\ j_{\gamma_2} m_{\gamma_2} s_2}} C_{j_{\gamma_2} m_{\gamma_2} s_2}^{j_{\gamma_1} m_{\gamma_1} s_1} (\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{n}_{\boldsymbol{k}_1}; \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{n}_{\boldsymbol{k}_2}) \times \right]$$
(2.19)

$$\left\{\sum_{n} \frac{\left(\alpha \boldsymbol{A}_{j_{\gamma_{2}}m_{\gamma_{2}}}^{(s_{2})*}\right)_{fn} \left(\alpha \boldsymbol{A}_{j_{\gamma_{1}}m_{\gamma_{1}}}^{(s_{1})}\right)_{ni}}{E_{n}(1-\mathrm{i0}) - E_{i} - \omega_{1}} + \sum_{n} \frac{\left(\alpha \boldsymbol{A}_{j_{\gamma_{1}}m_{\gamma_{1}}}^{(s_{1})}\right)_{fn} \left(\alpha \boldsymbol{A}_{j_{\gamma_{2}}m_{\gamma_{2}}}^{(s_{2})*}\right)_{ni}}{E_{n}(1-\mathrm{i0}) - E_{i} - \omega_{2}}\right\}\right],$$

где фотоны определенного типа задаются суммами в уравнении (2.19).

В резонансном приближении предполагается, что в процессе $i + \gamma_1 \rightarrow$

 $f + \gamma_2$ существует промежуточное состояние *b*, для которого частота поглощенного фотона ω_1 равна разности энергий $E_b - E_i$, а основной вклад в сечение рассеяния дает член с n = b в первой сумме в фигурных скобках выражения (2.19). Полученный в результате расходящийся вклад следует регуляризовать путем включения бесконечного набора графиков Фейнмана, представляющих однопетлевую поправку на собственную энергию (СЭ) для связанного электрона [85]. Таким образом, в знаменателе энергии появляется естественная ширина уровня Γ_b , а квадрат модуля резонансного регуляризованного вклада определяет профиль линии соответствующего процесса излучения или поглощения [8].

2.2. КЭД-вывод профиля Лоренца для спектральной линии атома

Чтобы получить стандартную форму Лоренца для профиля спектральной линии в рамках КЭД теории, можно рассмотреть резонансный процесс упругого рассеяния фотона на атомном электроне в состоянии *a*. Согласно построению теории возмущений в рамках КЭД-формализма, состояние *a* должно быть представлено (мета-)стабильным (основным) энергетическим уровнем атома. В рамках резоансного приближения, однако, данным обстоятельством можно пренебречь. Используя формализм *S*-матрицы в картине Фарри [2, 3, 159], в рамках резонансного приближения амплитуда процесса, показанного на Рис. 2.1, см. уравнение (2.19), может быть приведена к виду:

$$U_{aa}^{\rm sc} = \frac{\langle a | \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}_2, \boldsymbol{e}_2} | b \rangle \langle b | \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{e}_1}^* | a \rangle}{E_b - E_a - \omega}.$$
 (2.20)

Согласно выражению (2.20), амплитуда излучения, U_{ba}^{em} , может быть представлена следующим образом:

$$U_{ba}^{\rm em} = \frac{\langle b | \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}_2, \boldsymbol{e}_2}^* | a \rangle}{E_b - E_a - \omega}.$$
 (2.21)

Здесь предполагается, что процессы поглощения и излучения разделены в рамках резонансного приближения, см. обсуждение в [8], и *b* представляет возбужденное состояние, определяемое законом сохранения энергии (частотой поглощенного фотона).

Для резонансного процесса возбуждения это выражение имеет особенность при $\omega = E_b - E_a$. Регуляризация производится согласно процедуре предложенной в работе [85], т.е. путем вставок бесконечного числа однопетелвых диаграмм на собственную энергию электрона (СЭ), «петля за петлей». Результат сводится к геометрической прогрессии [3], которая в конечном итоге приводит к выражению

$$U_{ba}^{\text{em}} = \frac{\langle b | \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}_{2},\boldsymbol{e}_{2}}^{*} | a \rangle}{E_{b} - E_{a} - \omega + \langle b | \hat{\Sigma} (E_{b}) | b \rangle}.$$
(2.22)

Здесь $\langle b | \hat{\Sigma} (E_b) | b \rangle$ - даиагональный матричный элемент оператора, соответствующего однопетелевой диаграмме на собственную энергию электрона, $\hat{\Sigma} (E_b)$:

$$\langle b|\hat{\Sigma}(E_b)|b\rangle = \frac{e^2}{2\pi i} \sum_n \langle bn| \frac{1-\boldsymbol{\alpha}_1 \boldsymbol{\alpha}_2}{r_{12}} I_n(r_{12}; E_b)|nb\rangle.$$
(2.23)

Множитель $1-oldsymbol{lpha}_1oldsymbol{lpha}_2$ возникает из произведения $\gamma^\mu g_{\mu
u}\gamma^
u$ (см. [3]) и

$$I_n(r_{12}; E_b) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i|\Omega|r_{12}} d\omega}{E_n(1-i0) - E_b - \Omega}.$$
 (2.24)

Здесь и далее матричный элемент $\langle cd | X | dc \rangle$ подразумевает

$$\langle cd | X | dc \rangle = \langle c(1)d(2) | X(1,2) | d(1)c(2) \rangle$$
 (2.25)

где индексы 1, 2 относятся к двум переменным электрона в соответствующих вершинах диаграммы СЭ, $\alpha_{1,2}$ представляют собой матрицы Дирака, действующие на волновые функции электрона в вершинах 1 и 2, $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$. Наконец, суммирование проводится по всему дираковскому спектру.

Вещественная часть $\langle b | \hat{\Sigma} (E_r) | b \rangle$ рассходится и требует соответствующей перенормировки [92]. Результатом перенормировки является энергетический сдвиг, определяющий лэмбовский сдвиг в ведущем порядке (для атома водорода):

$$\operatorname{Re}\langle b|\hat{\Sigma}_{\operatorname{REN}}\left(E_{b}\right)|b\rangle = L_{b}^{\operatorname{SE}}.$$
(2.26)

В нашем случае данное обстоятельство несущественно. Важным является то, что мнимая часть матричного элемента $\langle b | \hat{\Sigma} (E_r) | b \rangle$ отлична от нуля. Аналитические вычисления для мнимой части можно найти в [3], результатом является

$$\operatorname{Im}\langle b|\hat{\Sigma}_{\operatorname{REN}}\left(E_{b}\right)|b\rangle = -\frac{\Gamma_{b}}{2},\qquad(2.27)$$

где Γ_b представляет собой естественную ширину возбужденного атомного состояния (детали регуляризации расходящегося резонансного вклада представлены также в [8]).

Подстановка выражений (2.26), (2.27) в (2.22) дает

$$U_{ba}^{\rm em} = \frac{\langle b | \boldsymbol{\alpha} A_{\boldsymbol{k}_2, \boldsymbol{e}_2}^* | a \rangle}{E_b + L_b^{\rm SE} - E_a - \frac{i}{2} \Gamma_b - \omega}.$$
 (2.28)

Регуляризованное выражение (2.28) может быть модифицировано как на случай сдвига энергии состояния *a*, так и на случай других КЭД поправок (не СЭ), см. детали в [8,84]. Далее будет подразумеваться, что энергии включают все известные энергетические сдвиги атомного уровня. В случае когда рассматривается переход между двумя возбужденными состояниями, ширина представлена суммой естественных ширин. В свою очередь, это дает наглядную картину, что при наблюдении спектральной линии частота перехода включает все "стандартные" сдвиги и может быть непосредственно сравнена с соответствующим теоретическим значением.

Чтобы получить профиль линии излучения, модуль амплитуды (2.28) следует возвести в квадрат, умножить на фазовый объем $d^3k'/(2\pi)^3$, проинтегрировать по направлениям вылета фотона и просуммировать по поляризации. Аналогичным образом может быть получен профиль поглощения: в этом случае в числителе выражения (2.20) оставляется матричный элемент перехода $a \to b$. В нерелятивистском пределе, который заведомо справедлив для атома водорода, $\langle b | \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{k,e}^* | a \rangle = \frac{e}{\sqrt{\omega}} \langle b | \boldsymbol{e} \boldsymbol{p} | a \rangle$, где \boldsymbol{p} — оператор импульса электрона, а m — масса электрона. Коэффициент $\frac{1}{\sqrt{\omega}}$ возникает из нормировки вектор-потенциала [2,3]. Тогда стандартное выражение для профиля Лоренца имеет вид:

$$\phi_{\rm L}(\omega)d\omega = \frac{1}{\aleph} \sum_{e} \int \frac{\omega d\omega d\boldsymbol{n}_k}{(2\pi)^3} |U_{ba}^{\rm em}| = \frac{1}{\aleph} \frac{W_{ba} d\omega}{(\omega_0 - \omega)^2 + \frac{1}{4}\Gamma_b^2}, \tag{2.29}$$

где

$$W_{ba} = \frac{4}{3}e^2\omega_0|\langle b|\boldsymbol{p}|a\rangle|^2 \tag{2.30}$$

соответсвует вероятности перехода $b \to a + \gamma$, ω_0 - резонансная частота равная $\omega_0 = E_b - E_a$ и \aleph представляет нормировочный множитель.

В выражениях (2.29), (2.30) мы положили $\omega = \omega_0$ в W_{ba} и Γ_b и учли, что разность лэмбовских сдвигов L_a^{SE} и L_b^{SE} можно просто включить в определение ω_0 . Если для состояния *b* нет других каналов распада, кроме $b \to a$, то вероятность перехода совпадает с парциальной шириной уровня $b, W_{ba} = \Gamma_{ba}$ и преобразуется в $\Gamma_{ba} = \Gamma_b$ в случае возбужденного состояния *a*. Коэффициент нормировки определяется следующим образом:

$$\int \phi_{\rm L}\left(\omega\right) = 1. \tag{2.31}$$

В резонансном приближении интервал интегрирования в (2.31) можно расширить до $\omega \in (-\infty, \infty)$. Тогда интегрирование в комплексной плоскости дает $\aleph = \aleph^{(0)} \equiv 1/2\pi$.

2.3. Нерезонансное продолжение профиля Лоренца спектральной линии

Можно выделить три типа нерезонансных вкладов, которые искажают стандартный профиль Лоренца (2.29). Первый тип соответствует эффектам искажения, возникающим во внешних полях. Так во внешнем поле происходит смешивание состояний противоположной четности [103]. Например, внешнее электрическое поле приводит к перекрытию переходов $1s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$ и $1s_{1/2} \rightarrow 2s_{1/2}$ [160]. Второй тип представлен оставшимися членами в амплитуде рассеяния (2.19). Исследование этой группы нерезонансных эффектов представляет особый интерес в современных экспериментах [22, 32], поскольку представляет доминирующий вклад в сдвиг резонансной частоты перехода.

В этой части диссертации представлен третий тип, имеющий место для резонансного слагаемого. Данные поправки возникают, когда частотная зависимость в выражении (2.29) учитывается как для вероятности перехода W_{ba} , так и для естественной ширины Γ_b . Нерезонансное расширение W_{ba} тривиально (см. [3]): уравнение (2.30) следует заменить на

$$W_{ba}(\omega) = \frac{4}{3}e^2\omega \left| \langle b | \boldsymbol{p} | a \rangle \right|^2.$$
(2.32)

Как определить зависимость Γ_b от частоты ω можно найти в [3], а соответсвующее приложение к определению НР поправок в работах [8, 37, 160]. В свою очередь, оценка вклада СЭ также должна учитывать, что изначально в рамках КЭД теории матричный элемент $\langle b|\hat{\Sigma} (E_b + \omega) |b\rangle$ зависит от частоты:

$$\langle b|\hat{\Sigma}\left(E_{a}+\omega\right)|b\rangle = \frac{e^{2}}{2\pi}\sum_{n}\langle bn|\frac{1-\boldsymbol{\alpha}_{1}\boldsymbol{\alpha}_{2}}{r_{12}}I_{n}\left(r_{12},E_{b}+\omega\right)|nb\rangle.$$
(2.33)

Тогда, профиль Лоренца представлен в виде:

$$\phi_{\rm L}(\omega) = \frac{1}{\aleph} \frac{W_{ba}(\omega)}{(\omega_0 - \omega)^2 + \frac{1}{4}\Gamma_b^2(\omega)}.$$
(2.34)

Чтобы получить зависимость $\Gamma_b(\omega)$ в явном виде, интеграл $I_n(r_{12}; E_b + \omega)$ следует преобразовать:

$$I_n(r_{12}; E_b + \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i|\Omega|r_{12}}d\Omega}{E_n(1 - i0) - E_b - \omega + \Omega} \quad (2.35)$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\Omega r_{12}}d\Omega}{E_n(1 - i0) - E_b - \omega + \Omega} - \int_{-\infty}^{0} \frac{2i\sin(\Omega r_{12})d\Omega}{E_n(1 - i0) - E_b - \omega + \Omega}.$$

Здесь подразумевается $E_n - E_b - \omega < 0$. В этом случае первый вклад (2.35) может быть проинтегрирован по переменной Ω, замыкая контур в верхней полуплоскости. Тогда отрицательный спектр дираковских энергий не дает вклада.

Из физических соображений следует также, что крылья лоренцевского профиля не могут быть продлены до области следующего (ближайшего) резонанса. Следовательно, бесконечный интервал интегрирования для (2.31) должен быть ограничен, $\omega \in [0, \omega_{\max}]$, где $\omega_{\max} = \omega_0 + \frac{1}{2}\Delta_{FS}$, Δ_{FS} представляет интервал тонкого расщепления (например). Выбор $E_n - E_b - \omega < 0$ и $\omega \leq \omega_{\max}$ приводит к вкладу только положительного дираковского спектра и состояний, расположенных ниже резонансного возбужденного атомного уровня *b*. Для атома водорода в состоянии $b = 2p_{1/2}$ возможен вклад лишь $n = 1s_{1/2}$.

Наконец, вклад второго слагаемого в (2.35) представляет собой сугубо мнимую величину. При заданных выше условиях, знаменатель всегда отличен от нуля и, значит, инфитизимальное слагамое в нем может быть отброшено. Следовательно, второе слагаемое не вносит вклада в ширину $\Gamma(\omega)$. Действуя аналогичным образом, можно получить, что в случае $E_n - E_a - \omega > 0$ интеграл (2.35) равен нулю. Аккуратный расчет $I_n(r_{12}; E_b + \omega)$, см. [3], приводит к выражению:

$$\Gamma_b(\omega) = -2e^2 \sum_{E_n < E_b} \langle bn | \frac{1 - \alpha_1 \alpha_2}{r_{12}} \sin\left((E_b - E_n + \omega) r_{12} \right) | nb \rangle.$$
(2.36)

В нерелятивистском пределе можно привести следующие парамет-

рические оценки (в релятивистских единицах): $E_n \approx m(\alpha Z)^2$, $r_{12} \approx 1/m\alpha Z$. Здесь Z - зарядовое число ядра, α -постоянная тонкой структуры. В случае распада в основное состояние n = a, и, следовательно, $\sin((E_b - E_n + \omega)r_{12}) = \sin(\omega r_{12})$. Поскольку интервал интегрирования ограничен, $\omega \leq \omega_{\max} \approx m(\alpha Z)^2$, можно разложить $\sin(\omega r_{12})$ в ряд Тейлора. Далее учтем, что в выражении (2.36) имеется два вклада: зависящий и независящий от α -матриц.

Используя разложение sin легко увидеть, что по свойству ортогональности отлично от нуля слагаемое пропорциональное $r_{12}^2 = r_1^2 + r_2^2 - 2(\boldsymbol{r}_1 \boldsymbol{r}_2)$. Результат равен

$$\Gamma_b'(\omega) = -\frac{2}{3}e^2\omega^3 |\langle b|\boldsymbol{r}|a\rangle|^2.$$
(2.37)

Стоит обратить внимание назнак — в (2.37), именно он приводит к правильному коэффициенту 4/3 в суммарном вкладе (безусловно положительном).

Наконец, в слагаемом заисящем от $\boldsymbol{\alpha}$ -матриц (по порядку величины) достаточно ограниться первым членом разложения sin. Затем, в нерелятивистском пределе воспользовавшись коммутационным соотношением $\langle b | \boldsymbol{p} | a \rangle = -i\omega_0 \langle b | \boldsymbol{r} | a \rangle$ возникнет результат:

$$\Gamma_b''(\omega) = 2e^2 \omega \omega_0^2 \left| \left\langle b \left| \boldsymbol{r} \right| a \right\rangle \right|^2.$$
(2.38)

Складывая вместе (2.37) и (2.38), естественная ширина уровня представляется в виде:

$$\Gamma_b(\omega) = \Gamma'_b(\omega) + \Gamma''_b(\omega) =$$

$$= 2e^2 \omega \left[\omega_0^2 - \frac{1}{3} \omega^2 \right] |\langle b | \boldsymbol{r} | a \rangle|^2 \frac{3}{2} \frac{\omega}{\omega_0} \left(1 - \frac{1}{3} \frac{\omega^2}{\omega_0^2} \right) \Gamma_b^{(0)}.$$
(2.39)

Здесь $\Gamma_b^{(0)} = \frac{4}{3}\omega_0^3 \left| \left\langle b \left| \boldsymbol{r} \right| a \right\rangle \right|^2$ в точке резонанса (см. выражение (2.32)).

Таким образом, мнимая добавка в знаменателе амплитуды (2.28) определяется линейным и кубическим по частоте ω вкладами, см. [161]. Вводя безразмерную переменную $x = \omega/\omega_0$, профиль Лоренца с учетом зависимости от частоты ширины уровня (Extended) может быть представлен следующим образом:

$$\phi_{\rm E}(x) = \frac{1}{\aleph} \frac{x\Gamma_{ba}^{(0)}}{\omega_0^2(x-1)^2 + \frac{9}{16}x^2\left(1-\frac{1}{3}x^2\right)^2\left(\Gamma_b^{(0)}\right)^2}.$$
(2.40)

Нормировочный множитель 1/N определяется из соотношения:

$$\omega_0 \int_{0}^{\omega_0 x_{\text{max}}} \phi_{\text{E}}(x) dx = 1, \qquad (2.41)$$

где $x_{\max} = \omega_{\max} / \omega_0$.

В принципе, радиационные поправки к энергии могут также зависеть от частоты, например, $L_b^{SE}(\omega)$. Следовательно, учет такой зависимости будет также искажать профиль Лоренца. Выражение для $L_b^{SE}(\omega)$ более сложное, см. [8], хотя его ω -зависимая часть не расходится и не требует дополнительная перенормировки. Однако, далее соответствующей модификацией пренебрегается в виду малости вкладов.

Выражение (2.40) представляет собой строгий КЭД-результат для профиля Лоренца продолженного на "нерезонансный случай". Можно заранее отметить, что это нерезонансное расширение контура зависит только от частоты и, следовательно, его нельзя избежать (см. следующие разделы 3, 5, 6). Аналитическая зависимость Γ_b от ω вне резонанса недавно обсуждалась в [161]. Другие формы для расширенного контура Лоренца также представлены в литературе [154,162,163]. В основном они получены в рамках теории квантовой механики, т.е. феноменологически.

2.4. Нерезонансный вклад в красное крыло профиля для Ly_α перехода в расширяющейся Вселенной

В качестве приложения модифицированного контура спектральной линии (2.40) можно рассмотреть вопрос о космологической рекомбинации ато-

ма водорода (Н) в ранней Вселенной. Нарушение баланса между первоначальными атомами и излучением по мере расширения Вселенной привело к формированию реликтового космического фона (МКИ). Одним из важнейших каналов "отрыва" излучения является смещение частоты фотонов в сторону красного крыла профиля Лоренца для Ly_α линии [164,165]. Когда частота фотона достигает критического значения ω_c , ниже которого вероятность поглощения становится слишком малой, фотон более не учавствует в процессах рассеяния на атомах. Главным образом, красное смещение частоты фотона происходит во время распространения фотона от одного атома к другому. Следовательно, вероятность выхода должна зависеть от плотности атомов водорода в период космологической рекомбинации. Строго говоря, исследования "отрыва" излучения от вещества представляет собой отдельную сложную задачу, которые проводятся в рамках теории переноса излучения, см., например, [166]. Однако, задача может быть значительно упрощена тем, что профиль спектральной линии непосредственно входит в определение оптической толщины [100]. Следовательно, анализ влияния расширенного профиля может быть проведен путем его сравнения со "стандартным". Такое сравнение позволяет указать на значимость нерезонансных эффектов для теории космологической рекомбинации.

Детальный анализ рассеяния фотонов в линиях Ly_{α} и 21 см охватывает широкий пласт исследований связанных с эволюцией Вселенной [167, 168]. Важной характеристикой рассеяния фотонов на водородных облаках в межзвездной среде (M3C) является оптическая толщина, τ , которая напрямую зависит от профиля линии и пропорциональна столбцовой плотности атомов (нейтрального водорода в данном случае). При стандартном анализе переноса излучения в Ly_{α} линии в расширяющейся Вселенной от источника с красным смещением z_s к наблюдателю с красным смещением $z_0 = 0$ используется следующее выражение [162, 169]:

$$\tau(z) = N_{\rm HI} \int_{0}^{z_{\rm s}} dz \sigma(n) (1+z)^2 \left[\frac{H(z)}{H_0}\right]^{-1}.$$
 (2.42)

Здесь N_{HI} — характерная средняя столбцовая плотность атомарного во-

дорода, $\sigma(n)$ — сечение рассеяния, $n = c(1 + z)/\lambda_{obs}$, H_0 — постоянная Хаббла и H(z) — фактор Хаббла. В случае Ly_{α} рассеяния сечение $\sigma(n)$ в окрестности резонанса равно

$$\sigma(\omega) = \frac{3\lambda_{\alpha}^2 \Gamma_{2p}}{4} \phi(\omega), \qquad (2.43)$$

где ϕ означает профиль линии одного атома, а $\lambda_{\alpha} = c/\omega_0$ - длина волны перехода $2p \rightarrow 1s$. Для описания профиля линии с большим красным смещением в последнее десятилетие было предложено несколько приближений [77, 153–155, 163, 170]. Далее сравниваются профиля, полученные в рамках различных приближений.

В классической теории естественное уширение линии описывается затухающим гармоническим осциллятором с периодической дипольной движущей силой. Тогда угловое интегрирование усредненной по времени интенсивности дает известную зависимость ω^4 для рэлеевского рассеяния

$$\phi_{\rm R}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{\Gamma_{2p}(4\omega^4/\omega_0^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \Gamma_{2p}^2 \omega^2}.$$
 (2.44)

Другая форма ϕ , основанная на двухуровневом приближении, была представлена в [77]:

$$\phi_{\rm P}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{\Gamma_{2p}(\omega/\omega_0)^4}{(\omega_0 - \omega)^2 + \Gamma_{2p}^2(\omega/\omega_0)^6/4}.$$
 (2.45)

Недавно в [154, 163] в рамках KM нестационарной теории возмущений было получено сечение рассеяния Ly_α фотона. Как следствие, выражение (2.45) было модифицировано следующим образом:

$$\phi_{\rm QM}(\omega) = \phi_{\rm R}(1 + f(\omega)) = \phi_{\rm L} \frac{4(\omega/\omega_0)^4}{(1 + \omega/\omega_0)^2} (1 + f(\omega)), \qquad (2.46)$$

где $f(\omega) = a(1-e^{-bx})+cx+dx^2$, a = 0.376, b = 7.666, c = 1.922, d = -1.036, а $x = \omega/\omega_0$ как и прежде. Профили поглощения (2.29), (2.40) и (2.44), (2.45), (2.46) представлены на графике 2.2 (был построен Т.А. Залялютдиновым). В частности, из Рис. 2.2 следует, что красное крыло профиля Ло-



Рис. 2.2. Сравнение профилей Ly_{α} линии в красном крыле для профилей поглощения, заданных выражениями (2.29), (2.40), (2.44), (2.45), (2.46) как функции от длины волны λ . Коэффициент нормировки $\aleph = 2\pi$ выбран для профилей заданных согласно (2.29) и (2.40). Пик соответствует резонансной длине волны $\lambda_{\alpha} = 1216$ Å.

ренца расширенного на нерезонансный случай, $\phi_{\rm E}(\omega)$, лежит значительно выше чем в предложенных ранее моделях. При этом контур $\phi_{\rm E}(\omega)$ получен в рамках КЭД теории и согласуется с [161].

Глава 3.

Нерезонансные эффекты для полного сечения в случае Ly_α рассеяния

3.1. Нерезонансные вклады в полном сечении рассеяния

В этом разделе рассматриваются нерезонансные поправки, возникающие для полноого сечения процесса однофотонного рассеяния на атоме водорода. Если пренебречь сверхтонкой структурой, то набор квантовых чисел для конкретного атомного состояния равен nljm, где n — главное квантовое число, l — угловой момент электрона, j — полный угловой момент (j = l + s) и m_j его проекция.

Полное сечение процесса однофотонного рассеяния получается интегрированием выражения (2.19) по направлениям излученного фотона n_{k_2} и суммированием по поляризации фотона e_2^* . Если падающее излучение изотропно и неполяризовано, то следует провести дополнительное интегрирование по n_{k_1} и усреднить по поляризации e_1 . Интегрируя по направлениям фотонов, суммируя по поляризациям фотонов и проекциям конечного состояния m_{j_f} , усредняя также по проекциям начального состояния m_{j_f} , полное сечение рассеяния фотона на атоме приводится к виду:

$$\sigma_{fi}(\omega) = C \sum_{\substack{m_{j_f}m_{j_i} \\ j_{\gamma_1}m_{\gamma_1}s_1 \\ j_{\gamma_2}m_{\gamma_2}s_2}} \left| \sum_{m_a} \frac{\left(\alpha A_{j_{\gamma_2}m_{\gamma_2}}^{(s_2)*} \right)_{fa} \left(\alpha A_{j_{\gamma_1}m_{\gamma_1}}^{(s_1)} \right)_{ai}}{E_a - E_i - \omega - \frac{1}{2}\Gamma_a} \right.$$
(3.1)
+
$$\sum_{n \neq a} \frac{\left(\alpha A_{j_{\gamma_2}m_{\gamma_2}}^{(s_2)*} \right)_{fn} \left(\alpha A_{j_{\gamma_1}m_{\gamma_1}}^{(s_1)} \right)_{ni}}{E_n - E_i - \omega} + \sum_n \frac{\left(\alpha A_{j_{\gamma_1}m_{\gamma_1}}^{(s_1)} \right)_{fn} \left(\alpha A_{j_{\gamma_2}m_{\gamma_2}}^{(s_2)*} \right)_{ni}}{E_n - E_f + \omega} \right|^2,$$
$$C = \frac{e^4}{(2\pi)^3} \frac{\omega(\omega_0 - \omega)}{(2j_i + 1)(2j_{\gamma_2} + 1)}.$$

Здесь и далее (если не оговорено отдельно) a означает резонансный атомный уровень, $\omega_0 \equiv E_a - E_i$ (подразумевается, что энергии учитывают все возможные релятивистские и КЭД поправки). Также здесь отброшена частотная зависимость естественной ширины Γ_a . Влияние зависимости $\Gamma_a(\omega)$ на прецизионное определение частоты перехода будет показано в одном из следующих разделах диссертации.

После выделения резонансного слагаемого (и соответствующей регуляризации) в амплитуде рассеяния, полное сечение рассеяния может быть представлено в виде двух слагаемых:

$$\sigma_{fi}(\omega) = \sigma_{fi}^{(0)}(\omega) + \sigma_{fi}^{(1)}(\omega), \qquad (3.2)$$

где $\sigma_{fi}^{(0)}$ относится к резонансному вкладу

$$\sigma_{fi}^{(0)}(\omega js) = \frac{e^4 \omega_{ai} \omega_{af}}{(2\pi)^4} \frac{2j_a + 1}{(2j_\gamma + 1)(2j_i + 1)} \frac{\Gamma_{fa} W_{ia}(js)}{(\omega_0 - \omega)^2 + \frac{\Gamma_a^2}{4}},$$
(3.3)

а $\sigma_{fi}^{(1)}$ - соответствующий нерезонансный вклад:

$$\sigma_{fi}^{(1)}(\omega js) = 2e^{4} \frac{\omega_{ai}\omega_{af}}{(2\pi)^{4}} \frac{2j_{a}+1}{(2j_{\gamma}+1)(2j_{i}+1)} \times \qquad (3.4)$$
$$\Re \left[\sum_{n \neq a} \frac{\Gamma_{af;fn} W_{ia;ni}(js)}{(\omega_{0}-\omega-\frac{i}{2}\Gamma_{a})(E_{n}-E_{a})} + \sum_{n} \frac{\Gamma_{af;ni} W_{ia;fn}(js)}{(\omega_{0}-\omega-\frac{i}{2}\Gamma_{a})(E_{n}-E_{f}+\omega_{0})} \right].$$

В выражениях (3.3) и (3.4), см. [35], введены следующие обозначения:

$$W_{ab;cd}(j_{\gamma}s) = \frac{2\pi}{2j_d + 1} \sum_{\substack{m_a m_b \\ m_c m_d}} \sum_{m_{\gamma}} \left(\boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{j_{\gamma} m_{\gamma}}^{(s)*} \right)_{ab} \left(\boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{j_{\gamma} m_{\gamma}}^{(s)} \right)_{cd}, \tag{3.5}$$

$$W_{ab} \equiv W_{ab;ba}(j_{\gamma}s), \tag{3.6}$$

$$\Gamma_{ab;cd} = \sum_{j's'} W_{ab;cd}(j'_{\gamma}s'), \qquad (3.7)$$

так что $\Gamma_{ab;ba} \equiv \Gamma_{ab}$ - парциальная ширина уровня a, \Re означает вещественную часть выражения, указанного в квадратных скобках.

Определить резонансную частоту перехода $i + \gamma_1 \to a$ можно из условия максимума сечения рассеяния $\sigma_{fi}(\omega)$. В случае резонансного приближения, $\sigma_{fi}(\omega) \to \sigma_{fi}^{(0)}(\omega)$, резонансная частота строго равна ω_0 . Однако, с учетом второго слагаемого в (3.2), см. [35,43], возникает добавка к ω_0 - HP поправка:

$$\delta_{\rm NR} = -\frac{1}{4} \frac{\Gamma_a^2}{\Gamma_{fa} W_{ia}} \Re \left[\sum_{n \neq a} \frac{\Gamma_{af;fn} W_{ia;ni}(j_\gamma s)}{E_n - E_a} + \sum_n \frac{\Gamma_{af;ni} W_{ia;fn}(j_\gamma \lambda)}{E_n - E_f + \omega_0} \right]. \quad (3.8)$$

Параметрическая оценка $\delta_{
m NR}$ в релятивистских единицах задается отношением:

$$|\delta_{\rm NR}| \sim \frac{\left[m\alpha(\alpha Z)^4\right]^2}{m(\alpha Z)^2} = m\alpha^2(\alpha Z)^6, \qquad (3.9)$$

где знаменатель оценивает разницу энергий в (3.8), а числитель представляет параметрическую оценку ширины (парциальной вероятности перехода).

Для Ly_{α} перехода в атоме водорода ($i = f = 1s_{1/2}, a = 2p_{1/2}$), расчет полученного выражения (3.8) был выполнен в [35]. Численное значение HP поправки равно

$$\delta_{\rm NR} \equiv \delta_{1s,1s}^{(2p_{1/2})} = -2.93 \ \Gamma \mathrm{u}. \tag{3.10}$$

Поскольку Ly_{α} резонансу соответствует два перехода в различные уровни тонкой структуры ($j_a = 1/2, 3/2$), то, в качестве примера, были проведены расчеты для перехода $2s_{1/2} \rightarrow 2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$:

$$\delta_{2s,1s}^{(2p_{3/2})} = -1.51 \ \Gamma \mathrm{u}. \tag{3.11}$$

Значения, заданные в (3.10) и (3.11), на порядок меньше самой высокой точности современных измерений частот переходов в атоме водорода. Так, частота двухфотонного перехода 2s - 1s определена с экспериментальной погрешностью порядка 10 Гц (относительная погрешность составляет несколько долей от 10^{-15} [20,21]). В свою очередь, Ly_{α} переход был измерен с гораздо большей погрешностью (около 1 МГц) [137]. Применяя формулу (3.8) для перехода 2s - 1s, можно обнаружить пренебрежимо малое значение НР поправки, см. [37]. Таким образом, можно заключить, что поправки в полном сечении рассеяния приводят к эффектам, пренебрежимо малыми по сравнению с современным уровнем точности эксперимента.

3.2. Метод функции Грина

Отдельно стоит указать весьма эффективный метод для проведения суммирования по промежуточным состояниям, возникающем в рамках теории возмущений второго порядка (см., например, выражение (3.8) и выражения для вероятностей двухфотонных переходов ниже). Метод функции Грина (МФГ) может быть использован не только в соответствующих численных расчетах, но и показал свою эффективность в аналитических вычислениях. Метода функции Грина интенсивно развивался в конце прошлого века и может быть найден во многих учебниках, см., например, [101,171]. Приложения данного метода к расчету нерезонансной поправки (3.8) и другим эффектам можно найти в [172]. В данной диссертации использование МФГ ограничено нерелятивистским случаем, поскольку его приложения рассматриваются для атома водорода, но стоит отметить и релятивистский подход, см., например, [173–176] (а также диссертацию [177] и соответствующие ссылки в ней).

Кулоновской функция Грина, $G_E(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r'})$, является решением уравнения:

$$\left(\hat{H} - E\right) G_E(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r'}) = \delta\left(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r'}\right), \qquad (3.12)$$

где введены стандартные обозначения для оператора Гамильтона, Ĥ, энергии E и δ-функции. Кулоновская функция Грина может быть представлена в виде спектрального разложения:

$$G_E(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r'}) = \sum_n \frac{\psi_n^*(\boldsymbol{r})\psi_n(\boldsymbol{r'})}{E_n - E}.$$
(3.13)

Сумма распространяется на весь спектр гамильтониана \hat{H} , включая непрерывный спектр.

Выражение (3.13) мало подходит для практических целей. Для большинства приложений желательно иметь замкнутые выражения для радиальной части функции $G_E(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r'})$, определяемой парциальным волновым разложением:

$$G_E(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r'}) = \sum_{lm} \frac{1}{r \, r'} G_{El}(r, r') Y_{lm}^*(\Omega) Y_{lm}(\Omega').$$
(3.14)

Опуская для краткости промежуточные выкладки, может быть найдено следующее представление для радиальной части кулоновской функции Грина (см. [101]):

$$\frac{1}{r r'} G_{El}(r, r') \equiv g_l(E; r, r') = \frac{Z}{\nu} \sum_{m=l+1}^{\infty} \frac{m^4}{m - \nu} R_{ml} \left(\frac{2Zr}{\nu}\right) R_{ml} \left(\frac{2Zr'}{\nu}\right) (3.15)$$

где $\nu = Z/\sqrt{-2E}$. Радиальные функции $R_{ml}(x), x = 2Zr/\nu$, могут быть

представлены как

$$R_{ml}(x) = \frac{2}{m^2} \sqrt{\frac{(m-l-1)!}{(m+l)!}} x^l e^{-\frac{x}{2}} L_{m-l-1}^{2l+1}(x), \qquad (3.16)$$

 $L_n^a(x)$ - присоединенный полином Лаггера [178].

Выражение (3.15) имеет полюса функции Грина, соответствующие водородным уровням энергии (как в случае резонанса в амплитуде (3.1)). В связи с этим, весьма удобным является представление для "редуцированной" функции Грина, в которой выделено "резонансное" состояние. Окончательное выражение, соответствующее (3.15), может быть представлено в виде [101]:

$$g_l^{(n)}(E;r,r') = \frac{Z}{n} \sum_{\substack{m=l+1\\m\neq n}} \frac{m^4}{m-\nu} R_{ml}(x) R_{ml}(x') + (3.17)$$
$$n^2 R_{nl}(x) \left[\frac{5}{4} R_{nl}(x') + x' \frac{d}{dx'} R_{nl}(x')\right] + n^2 R_{nl}(x') \left[\frac{5}{4} R_{nl}(x) + x \frac{d}{dx} R_{nl}(x)\right].$$

Представление кулоновской функции Грина в виде разложения по присоединенным полиномам Лаггера является удобным по нескольким причинам. Во-первых, в случае целочисленного значения ν радиальные функции $R_{ml}(x)$ совпадают с соответствующими водородными. Во-вторых, ряд по mсходится абсолютно как $1/m^{3/2}$ для вещественных значений ν .

Именно, разложения (3.17) и (3.15) были использованы при вычислении первого и второго слагаемых в (3.8), соответственно. Используя первые восемь слагаемых в сумме по m, может быть получена точность порядка пяти значащих цифр.

3.3. "Квадратичная" нерезонансная поправка в полном сечении рассеяния за счет тонкой структуры

Для полного сечения рассеяния может быть найдена "квадратичная" нерезонансная поправка (она не исчезает после интегрирования по углам вылета фотона). Как было отмечено в [43], будучи зависящей от разницы энергий в знаменателе, НР поправка может быть значительной для близких значений E_n и E_a . Отбрасывая в выражении (3.1) интерфернционные слагаемые и учитывая только соответствующие квадраты модулей для уровней разделенных тонкой структурой [36,37], можно получить НР поправку к частоте перехода ω_0 в виде:

$$\delta_{\rm NR}^{\rm (sq)} = \frac{\Gamma_a^4}{16\Delta^3},\tag{3.18}$$

где Δ соответсвует интервалу тонкого расщепления атомных уровней. Для водородоподобных атомов параметрическая оценка этой поправки задается соотношением:

$$\delta_{\rm NR}^{\rm (sq)} \sim \frac{\left[m\alpha(\alpha Z)^4\right]^4}{\left[m(\alpha Z)^4\right]^3} = m\alpha^4(\alpha Z)^4.$$
 (3.19)

Таким образом, по порядку малости НР поправка $\delta_{\text{NR}}^{(\text{sq})}$ такая же как и δ_{NR} , согласно оценке (3.9) для атома водорода (Z = 1).

Для Ly $_{\alpha}$ резонанса в водороде, см. [8, 36, 37], результатом для $\delta_{\rm NR}^{\rm (sq)}$ является

$$\delta_{\rm NR}^{\rm (sq)} = 4.70 \ \Gamma$$
ц. (3.20)

3.4. Нерезонансная поправка в полном сечении рассеяния за счет частотной зависимости $\Gamma_a(\omega)$

Рассматривая Ly_{α} переход в атоме водорода в качестве простейшего примера (существует только один канал распада), следует учесть зависимость естественной ширины от частоты. Согласно разделу 2.3, в рамках КЭД теории данную зависимость можно получить из мнимой части однопетлевой СЭ поправки связанного электрона. Однако, для простоты изложения и выявления ведущего порядка, достаточно ограничиться линейной зависимостью, которая немедленно следует из определения ширины уровня как суммы вероятностей переходов в нижележащие состояния, см. [8, 37]. Сразу отметим, что порядок величины такой поправки аналогичен с (3.9) для атома водорода.

Учтем, что в теории излучения вероятность перехода определяется выражением в форме скорости. Тогда для Ly_{α} перехода в атоме водорода $\Gamma_a(\omega_0) = (2/3)^8 m\alpha(\alpha Z)^4$ (в релятивистских единицах) следует заменить на $\Gamma_a(\omega) = \omega (2^{11}/3^9) m\alpha(\alpha Z)^4$ [8,37]. Оставляя лишь резонансное сечение рассеяния $\sigma_{fi}^{(0)}$ и заменяя в числителе ширину согласно вышесказанному, из условия экстремума следует

$$\delta_{\rm NR}^{\rm (fr)} = \frac{1}{8} \Gamma_a(\omega_0) \left[\frac{d\Gamma_a(\omega)}{d\omega} \right]_{\omega = \omega_0}.$$
(3.21)

Параметрическая оценка $\delta_{\rm NR}^{({\rm fr})}$ немедленно получается аналогично (3.9). Её численное значение равно

$$\delta_{\rm NR}^{\rm (fr)} = 1.007 \ \Gamma \mathrm{u}.$$
 (3.22)

Учет зависимости от частоты в знаменателе согласно разделу 2.3 приводит к гораздо меньшему значению HP поправки к резонансной частоте Ly_α перехода. Таким образом, суммарный вклад для линии $2p_{1/2} - 1s_{1/2}$ определяется

$$\delta_{\Sigma} = \delta_{\rm NR} + \delta_{\rm NR}^{\rm (sq)} + \delta_{\rm NR}^{\rm (fr)} = -2.93Z^6 + 4.70Z^4 + 1.007Z^6 \ \Gamma \mathrm{u}.$$
(3.23)

3.5. Нерезонансная поправка с учетом сверхтонкой структры (СТС)

Важным случаем прецизионного определения частоты Ly_{α} перехода в атоме водорода является учет сверхтонкой структуры (СТС). Оценки искажения профиля линии были представлены впервые в работе [41], см. также [40]. В качестве примера был рассмотрен процесс, использованный в [137] для измерения частот двух переходов $1s_{1/2}(F = 1) \rightarrow 2p_{3/2}(F = 1)$ и $1s_{1/2}(F = 0) \rightarrow 2p_{3/2}(F = 1)$ (F - полный атомный момент, $\mathbf{F} = \mathbf{j} + \mathbf{I}$, I- спин ядра, а \mathbf{j} - полный угловой момент атома как и ранее). Сверхтонкая структура уровня $2p_{3/2}$ экспериментально неразрешима по той причине, что расщепление, соответствующее СТС, значительно меньше естественной ширины атомного уровня: $\Gamma_{2p} \approx 100$ МГц, тогда как $\Delta_{\text{HFS}}(2p_{3/2}) = E(2p_{3/2}, F = 2) - E(2p_{3/2}, F = 1) \approx 23.7$ МГц. Это типичный случай перекрывания резонансов двух сверхтонких подуровней, см. теорию в [133]. Однако, из-за присутствия интерференционных членов, форма линии отлична от перекрывания просто двух профилей Лоренца. Соответствующая форма линии может быть представлена выражением:

$$\phi_{\rm HFS}(\omega) \approx \frac{f(F, F')}{(\omega - \omega_0)^2 + \frac{1}{4}\Gamma_{2p}^2} + \frac{f(F, F'')}{(\omega - \omega_0 - \Delta_{\rm HFS})^2 + \frac{1}{4}\Gamma_{2p}^2} + 2\Re \frac{g(F, F', F'')}{(\omega - \omega_0 - \frac{i}{2}\Gamma_{2p})(\omega - \omega_0 - \Delta_{\rm HFS} - \frac{i}{2}\Gamma_{2p})},$$
(3.24)

где $\omega_0 = E(2p_{3/2}, F = 1) - E(1s_{1/2}, F = 1), F, F', F''$ обозначают полный атомный момент с учетом спина ядра для соответствующего состояния. В (3.24) f, g представляют множители, возникающие в рамках теории углового момента (см. [179]). Детальный расчет коэффициентов f, g был проведен Г. Щедриным и представлен в работах [40, 41].

Угловые факторы играют решающую роль в определении формы линии (3.24). Результат может быть представлен в виде: f(1,2) : f(1,1) : q(1,2,1) = 181:1:0.307. Таким образом, форма спектральной линии в высшей степени демонстрирует однопиковую структуру (больший пик полностью экранирует меньший - 181 : 1, а интерфернционный вклад еще на порядок меньше). Асимметрия за счет перекрывания двух профилей Лоренца определяется интерфернционным членом и может быть оценена по порядку величины как $0.307/181 \approx 0.17\%$. Тогда НР поправку к частоте перехода $E(2p_{3/2}) - E(1s_{1/2}, F = 1)$ можно оценить следующим образом: $0.0017\Gamma_{2p} \approx 0.17$ МГц. Существование интерференционного вклада, искажающего близко лежащие резонансные линии, хорошо известно (см., например, [180]). Однако, в [180] это искажение было включено в диапазон экспериментальной ошибки определения частоты перехода, по аналогии с другими вкладами чисто технического происхождения, таких как, например, распределение и разброс скоростей атомов. В настоящее время, технические возможности проведения эксперимента значительно выросли и позволяют значительное подавление указанных эффектов. Стоит отметить, что вклад эффекта, представленного выражением (3.24), близок по величине к эспериментальной погрешности, ~ 6 МГц [137], и, таким образом, наблюдаем. Основным заключением, тем неменее, является то, что использование "правильного" контура линии (например, выражение (3.24) для эксперимента [137]) позволяет значительно увеличить точность экспериментального определения частоты перехода. Детальное обсуждение последнего будет представлено в следующих разделах диссертации.

3.6. Заключение по HP поправкам для Ly_{α} перехода в полном сечении рассеяния

Резонансное приближение, сводящее описание профиля спектральной линии к обычному контуру Лоренца, представляет собой важную веху всех современных измерений частоты перехода в резонансных экспериментах. В резонансном приближении профиль линии описывается двумя параметрами: резонансной частотой ω_0 и естественной шириной атомного уровня (Γ_a в рассмотренных выше случаях). Согласно резонансному приближению возникающий профиль Лоренца симметричен относительно ω_0 . Как указано в работе [85], резонансное приближение справедливо только до определенного предела точности, который задается нерезонансными поправками. За этим пределом профиль линии приобретает асимметричную форму и определение частоты перехода становится неоднозначным. Кроме того, HP поправки зависят от процесса используемого в эксперименте. Последнее определяет предел достижимой точности измерения резонансной частоты. За этим пределом профиль спектральной линии уже не может быть описан двумя параметрами (ω_0 и Γ_a); только сам профиль линии (но не частота) остается наблюдаемой величиной, которую следует сравнивать с соответствующими теоретическими расчетами.

Величина HP поправок согласно F. Low [85] оказывается малой, $\sim \alpha^6$ для атома водорода. Однако, порядок величины конкурирует с "обычными" релятивистскими КЭД поправками, расчет которых необходим на современном уровне точности эксперимента, см., например, [28, 54, 69, 149, 181]. В последние два десятилетия НР поправки возымели важную роль и исследовались как в ряде теоретических, так и непосредственно экспериментальных работ [32, 43, 46, 47, 50, 51, 145–148] (см. также работы автора диссертации и соответствующие ссылки в них). Переосмысление важности НР эффектов в начале 2000-х годов было вызвано высокоточными экспериментами [134, 137, 182]. В частности, эксперименты [134, 182] являются наиболее точными в оптической области: с абсолютной точностью для частоты 1s-2s перехода около ± 46 Гц или с относительной точностью порядка 10^{-14} . На данный момент точность измерений частоты 1s - 2s перехода составляет порядка 10 Гц или $\sim 10^{-15}$ относительной величины [20,21]. Однако, схема эксперимента по измерению 1s - 2s частоты перехода в атоме водорода создает серьезные трудности для теоретического описания асимметрии контура линии. Соответствующие оценки будут приведены в следующих разделах диссертации.

Важный экспериментальный результат был получен в работе [137], где впервые был измерен Лайман-альфа 2p - 1s переход с точностью, позво-

лившей наблюдать естественный профиль линии и определить его характеристики. Данные измерения имели резонансный характер. Из-за отсутствия внешних полей оценка НР поправок и определение соответствующей асимметрии в этом случае проще и проводились в теоретических работах [35–37,40–43]. В результате потенциальные возможности экспериментальной точности, достижимой в рамках экспериментов типа [137], были недооценены.

Глава 4.

Нерезонансные эффекты в измерениях $1_s - 2_s$ частоты перехода

Экспериментальное измерение частоты 1s-2s перехода представляет собой значимый результат, поскольку достигнутая точность $10^{-14} - 10^{-15}$ является непревзойденной на данный момент для атома водорода [183]. С точки зрения теоретического описания схема эксперимента [134, 182] не претерпела существенных изменений и в настоящее время [20, 21]. Так, согласно экспериментам [134, 182] атомы водорода возбуждаются лазерным излучением путем двухфотонного поглощения из основного 1s состояния в 2s состояние. Это возбуждение происходит в области, в котором отсутствуют внешние поля. В течение примерно 10^{-3} возбужденные атомы переходят в другую область, где на них воздействует слабое электрическое поле. В присутствии такого поля 2s и 2p состояния смешиваются, и атомы распадаются посредством $Ly_{\alpha} 2p - 1s$ перехода. Соответствующее излучение регистрируется в зависимости от частоты налетающего лазерного излучения, формируя, таким образом, профиль линии поглощения. Применительно к системе покоя атома это выглядит так, что возбуждение происходит в отсутствие электрического поля, а затем электрическое поле включается. В терминах квантовой электродинамики начальное и конечное состояния атома описываются зависящим от времени гамильтонианом $\hat{H}(t)$ с разными гамильтонианами \hat{H}_{in} и \hat{H}_{out} в асимптотические моменты времени t_{in} и t_{out} , соответственно.

4.1. НР поправки к частоте 1*s*-2*s* перехода для спонтанного распада комбинированного с распадом во внешнем электрическом поле

В работах [36,37] были представлены оценки НР поправок к частоте 1s-2s перехода, проведенные на основе эффекта смешивания 2s и 2p состояний для атома во внешнем электрическом поле [103, 104]. Для полного сечения рассеяния величины НР поправок оказались пренебрежимо малы (как и для случая распада 2s состояния не стимулированного внешним полем (спонтанного)), т.е. порядка 10^{-14} Гц и меньше.

Так для спонтанного распада, т.е. процесса схематично изображенного на Рис. 4.1, выражение для НР поправки можно оценить как



Рис. 4.1. Процесс двухфотонного поглощения, сопровождающийся спонтанным распадом. Рассматривается переход в метастабильное состояние 2s атома водорода (n = 2s в обозначениях Рис. 2.1), время жизни состояния $2s \tau = 1/8.229$ секунды, начальное и конечное состояния совпадают и представлены основным состоянием 1s.

$$|\delta| = \frac{\Gamma_{2s,2\gamma}^2}{\Delta E} \sim \frac{\left[m\alpha^2(\alpha Z)^6\right]^2}{m(\alpha Z)^2} = m\alpha^4(\alpha Z)^{10}.$$
(4.1)

Эта оценка была приведена в [43], и, в частности, указано, что такая HP поправка для перехода $1s + 2\gamma \rightarrow 2s$ оказывается порядка 10^{-14} Гц и, таким образом, пренебрежимо мала при текущем и прогнозируемом уровне точности эксперимента.

Поправка (4.1) соответствует процессу, описываемому графиком Фейнмана, изображенному на Рис. 4.1. Однако, эксперимент основан на другом процессе. В нем ширина уровня 2s определяется временем пролета до области, где внешнее электрическое поле приводит к примеси 2p состояния. В результате излучается фотон, соответствующий Ly_{α} переходу 2p-1s. Для слабого электрического поля параметр Штарка (параметр смешивания) равен $\xi_{\rm S} = \langle 2s | d \boldsymbol{\mathcal{E}} | 2p \rangle / \Delta E_L \ll 1$, где \boldsymbol{d} – оператор электрического дипольного момента, $\boldsymbol{\mathcal{E}}$ — напряженность электрического поля, ΔE_L — лэмбовский сдвиг для состояний 2s и 2p. В экспериментах [20, 21, 134, 182] область возбуждения отделена в пространстве от области детектирования сигнала. Поэтому штарковский сдвиг не входит в условие возбуждения: $2\omega = E_{2s} - E_{1s}$. При этом ширина резонанса определяется временной задержкой, которая необходима для достижения атомом области регистрации: при $\xi_{
m S} \sim 0.1$ время затухания в электрическом поле равно $\xi_{\rm S}^{-2}\Gamma_{2p,1\gamma}^{-1} \sim 10^{-7}$ с. Это очень малое время по сравнению с пролетным врменем: характерные скорости атомов составляют 10⁴ см/с, а пространственное разделение областей возбуждения и регистрации порядка 13 см [134, 182]. Таким образом, временная задержка составляет примерно 10⁻³ с - это соответствует экспериментальной ширине резонанса $\Gamma_{\rm exp} \sim 1$ к Γ ц.

Основной нерезонансный вклад (дифференциальное сечение) дает уровень 2*p*. По порядку величины, он определен отношением:

$$|\delta| = \frac{\Gamma_{\exp}^2}{\Delta E_L} \sim 10^{-3} \ \Gamma \mathrm{u}. \tag{4.2}$$

В свою очередь рассматривая атом, помещенный во внешнее электрическое поле, можно представить возбужденное состояние в виде 2s' = $2s + \xi_{\rm S} 2p$. Тогда сечение рассеяния может быть записано в виде [37]:

$$\sigma \sim \frac{\Gamma_{2s,2\gamma}\Gamma_{\exp}}{(E_{2s} - E_{1s} - 2\omega)^2 + \frac{1}{4}\Gamma_{\exp}^2} + \frac{\Gamma_{2p',2\gamma}\Gamma_{2p,1\gamma}}{(E_{2p} - E_{1s} - 2\omega)^2 + \frac{1}{4}\Gamma_{2p,1\gamma}}.$$
 (4.3)

Здесь второе слагаемое представляет нерезонансный вклад, возникающий за счет смешивания $2p' = 2p + \xi_S 2s$, а $\Gamma_{2p',2\gamma}$ - двухфотонная ширина уровня 2p. Интерференционный вклад между резонансным и нерезонансным слагаемыми отсутствует в полном сечении, но может присутствовать в дифференциальном сечении.

В случае измерения полного сечения НР поправка из выражения (4.3) может быть найдена в виде:

$$|\delta| = \frac{\Gamma_{2p',2\gamma}\Gamma_{2p,1\gamma}}{\Gamma_{2s,2\gamma}\Gamma_{\exp}} \frac{\left(\frac{1}{2}\Gamma_{\exp}^2\right)^4}{\Delta E_L^3}$$
(4.4)

и оказывается пренебрежимо малой.

Для дифференциального сечения рассеяния можно обнаружить

$$|\delta| = \frac{1}{2} \left(\frac{\Gamma_{2p',2\gamma} \Gamma_{2p,1\gamma}}{\Gamma_{2s,2\gamma} \Gamma_{\exp}} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\Gamma_{\exp}^2}{\Delta E_L} \sim 10^{-2} \ \Gamma \mathrm{u}.$$
(4.5)

Таким образом, для дифференциального сечения рассеяния была получена поправка ~ 10^{-2} [37], которая на три порядка ниже экспериментальной погрешности. Тем неменее, указанные выше оценки для HP поправок являются скорее грубыми. Основной причиной этого утверждения является разделенные области возбуждения и де-возбуждения атома в экспериментах [20, 21, 134, 182]. Далее, будет представлена оценка HP поправки, проведенная в рамках строгого КЭД подхода на "конечных временах". В данной части работы был использован формализм, когда потенциалы внешнего поля "выключены" при $t_{\rm in}$ (начальное состояние) и "включены" при $t_{\rm out}$ (конечное состояние), и им соответсвуют различные $\hat{H}_{\rm in}$ и $\hat{H}_{\rm out}$, см. [184].

4.2. In и out КЭД формализм

Теория КЭД с различными in и out гамильтонианами была развита Фрадкиным, Гитманом и Шварцманом [184]. В рамках данной теории возникает возможность оперировать двумя полными наборами собственных функций, принадлежащих in и out гамильтонианам. Эта теория следует стандартному подходу КЭД в обобщенной форме: *S*-матрица, операторы поля в пространстве Фока, четырехмерное разложение возмущений для элементов *S*-матрицы, теорема Вика и диаграммная техника Фейнмана. Фактически, единственный новый элемент, который следует использовать в рамках поставленных задач, - это обобщенный электронный пропагатор. Этот пропагатор соединяет две вершины, которые описываются in и out гамильтонианами, соответственно.

Применительно к случаю двухфотонного 1s - 2s резонансного поглощения [20,21,134,182] это означает отсутствие или наличие электрического поля в \hat{H}_{in} и \hat{H}_{out} , соответственно. Тогда электронный пропагатор, S^{FGS} , выглядит так:

$$S^{\text{FGS}}(x_1, x_2) = \theta(t_1 - t_2) \sum_{\substack{\tilde{m}, n \\ E_{\tilde{m}, n} > 0}} \psi_{\tilde{m}}(x_1) \omega_{\tilde{m}, n} \overline{\psi}_n(x_2) -$$

$$\theta(t_2 - t_1) \sum_{\substack{\tilde{m}, n \\ E_{\tilde{m}, n} < 0}} \psi_n(x_1) \omega_{n, \tilde{m}} \overline{\psi}_{\tilde{m}}(x_2).$$

$$(4.6)$$

Первая сумма в (4.6) описывает распространение электрона из точки пространства-времени x_2 , где нет дополнительного внешнего поля (inspace), до точки пространства-времени x_1 , где поле включено (out-space). Собственные функции ψ_n , ψ_m соответствуют in и out пространствам: $\psi_m(x)$ - решения уравнения Дирака для электрона в поле ядра и внешнем электрическом поле, $\psi_n(x)$ представляют решения в отсутствии поля, E_m и E_n - соответствующие собственные значения. Матрицы $\omega_{m,n}$ определяются согласно [184] (см. также [42]): где $\langle \cdots \tilde{m} \cdots |$ обозначает вектор out-состояния в пространстве Фока с электроном в состоянии \tilde{m} , $|\cdots n \cdots \rangle$ обозначает вектор in-состояния в пространстве Фока с электроном в состоянии n, \hat{a}^{\dagger} - оператор рождения в outпространстве Фока, а \hat{a} - оператор уничтожения в in- пространстве Фока.

В простом случае, когда электрические поля не создают частиц, матрица $\omega_{\tilde{m},n}$ сводится к интегралу перекрывания:

$$\omega_{\tilde{m},n} = \int d\boldsymbol{x} \psi_{\tilde{m}}^{\dagger}(\boldsymbol{x}) \psi_n(\boldsymbol{x}) \equiv \langle \tilde{m} | n \rangle.$$
(4.8)

В нерелятивистском пределе, очевидно справедливом для нейтрального атома водорода, дираковские волновые функции заменяются шрёдингеровскими, и вклад отрицательных энергий в (4.6) отбрасывается.

Важным вопросом является определение вероятности перехода в рамках теории [184]. В частности, как связать элемент *S*-матрицы с вероятностью распада (или сечением процесса)? В стандартной КЭД эта проблема решается следующим образом: за счет закона сохранения энергии элемент *S*-матрицы между начальным *i* и конечным *f* состояниями всегда можно свести к амплитуде процесса с помощью соотношения

$$S_{if} = -2\pi i \delta(E_i - E_f) U_{if}, \qquad (4.9)$$

где E_i, E_f - энергии начального и конечного состояний, и U_{if} - амплитуда процесса. Квадрат $\delta(E_i - E_f)$ представляется как

$$\delta(E_i - E_f) \frac{1}{2\pi} \int_{-T/2}^{T/2} dt \, e^{i(E_i - E_f)t} = \frac{T}{2\pi} \delta(E_i - E_f).$$
(4.10)

Здесь T можно интерпретировать как время наблюдения. Тогда скорость перехода (вероятность перехода за единицу времени) можно определить по формуле:

$$dW_{if} = \frac{|S_{if}|^2}{T} = 2\pi\delta(E_i - E_f) |U_{if}|^2.$$
(4.11)

В теории in- и out-формализма энергия не сохраняется и определение (4.11) для вероятности перехода в принципе не выполняется. Однако в случае слабого поля, если пренебречь штарковскими сдвигами, сохранение энергии фактически осуществляется. Тогда можно сохранить стандартную формулировку (4.11) для оценки вероятностей перехода и стандартную диаграммную технику Фейнмана, используя, однако, волновые функции, возмущенные электрическим полем.

Далее будут использоваться обычные диаграммы Фейнмана с учетом пропагатора (4.6). Сплошная линия будет изображать электрон только в поле ядра, а двойная сплошная линия будет описывать электрон, распространяющийся в поле ядра вместе с дополнительным внешним электрическим полем. Вершина, соответствующая гамильтониану \hat{H}_{out} , далее обозначается "обычной" точкой, а вершина, соответствующая гамильтониану \hat{H}_{in} , - "выколотой" точкой. Новый элемент диаграммы изображен на Рис. 4.2.



Рис. 4.2. Схематическое изображение электронного пропагатора $S^{\text{FGS}}(x_1, x_2)$ (4.6) в координатном пространстве. Двойная сплошная линия и "обычная" точка представляют вершину и электрон, распространяющийся во out-space. одинарная сплошная линия и "выколотая" точка представляют собой вершину и электрон, распространяющийся в in-space. Предполагается, что соответствующие состояния in и out характеризуются одним и тем же набором квантовых чисел.

Применимость теории [184] к задаче запаздывающего распада резонансного состояния в атоме определяется двумя неравенствами: $\tau_{at} \ll \tau_{field} \ll \tau_{d}$. Здесь τ_{field} - время, показывающее, насколько быстро меняется поле в системе покоя атома, τ_{at} - характерное атомное время, необходимое для образования стационарных атомных состояний, τ_{d} - время распада атомного уровня. Неравенство $\tau_{at} \ll \tau_{field}$ означает, что поле меняется достаточно медленно, чтобы не разрушить стационарные состояния атома. Другое неравенство $\tau_{field} \ll \tau_{d}$ подразумевает, что поле изменяется довольно резко в пространстве (и, соответственно, во времени в системе покоя атома), так что регистрируемый сигнал имеет пиковую структуру, которая позволяет аккуратно определить частоту. Очевидно, что второе неравенство $\tau_{\text{field}} \ll \tau_{\text{d}}$ выполняется в экспериментах [20, 21, 134, 182]. Для оценки τ_{at} необходимо учесть, что время затухания уровня 2p составляет около 10^{-9} с ($\tau_{2p} = 1/\Gamma_{2p} \approx 1/(6.26 \times 10^8)$ с); такое же время затухания имеет 2s уровень в критическом поле $\mathcal{E}_c = 475$ В/см (полное смешивание уровней 2s, 2p [103]). Полагая, что "слабое поле" в экспериментах [134, 182] на порядок меньше, чем \mathcal{E}_c , и учитывая, что примесь 2s состояния во внешнем электрическом поле пропорциональна \mathcal{E}^2 , получаем $\tau_d \sim 10^{-7}$ с. Таким образом, оба упомянутых выше неравенства совместимы [42].

В рамках теории [184] сечение резонансного рассеяния двух эквивалентных лазерных фотонов с частотой ω атомом водорода с последующим "запаздывающим" распадом во внешнем электрическом поле, $a + 2\gamma \rightarrow a', \tilde{a}' \rightarrow \tilde{a} + \gamma$, выглядит так (см. [40–42]):

$$d\sigma_{\tilde{a}a}^{(\text{FGS})} = \frac{1}{2\pi} \frac{W_{\tilde{a}\,\tilde{a}'}^{(\text{em})} \left|\langle \tilde{a}' | a' \rangle\right|^2 W_{a'a}^{(2\gamma\,\text{abs})}}{(E_{a'} - E_a - 2\omega)^2 + \frac{1}{4}\Gamma_{a'}^2} S_{a\,a'}^{2\gamma}.$$
(4.12)

Здесь $W_{a'a}^{(2\gamma \text{ abs})}$ - вероятность двухфотонного поглощения, $W_{\tilde{a}\tilde{a}'}^{(\text{em})}$ - вероятность распада состояния \tilde{a}' , $S_{aa'}^{2\gamma}$ - угловой коэффициент, требующий вычислений, а тильдой обозначены состояния для атома во внешнем поле. Условию резонанса соотевтсвует $E_{a'} - E_a = 2\omega$.

Далее эта теория используется для описания HP поправок в эксперименте с двухфотонным 1*s* – 2*s* резонансом.

4.3. Двухфотонное 1*s*-2*s* возбуждение с последующим распадом во внешнем электрическом поле

Вычисления матричных элементов, представленных в данной части диссертации, были выполнены совместно с Г. Щедриным и Е. Черновской. Детальное описание процесса рассеяния фотонов на атоме, включая двухфотонное рассеяние с последующим "запаздывающим" распадом во внешнем электрическом поле, в наиболее общем виде было представлено в работе [42]. В данной части диссертации обсуждается последнее.

Процесс резонансного рассеяния двух фотонов на атоме с последующим "запаздывающим" распадом во внешнем электрическом поле может быть представлен следующей диаграммой Фейнмана, Рис. 4.3:



Рис. 4.3. Процесс двухфотонного возбуждения 1s - 2s атома водорода с последующим распадом во внешнем электрическом поле. Одинарные сплошные линии описывают волновые функции электрона и пропагатора в отсутствие внешнего электрического поля. Составная внутренняя электронная линия представляет собой электронный пропагатор в рамках теории [184], см. Рис. 4.2. Внешняя двойная сплошная линия соответствует атомному электрону, распространяющемуся во внешнем электрическом поле. Как и в стандартной теории, волнистые линии описывают фотоны. Два поглощенных фотона представляют собой лазерные фотоны с частотой $\omega = 1/2(E_{2s} - E_{1s})$, где E_i - энергии состояний атомного электрона в отсутствие внешнего поля (собственные состояния in-гамильтониана). Испускаемый фотон имеет частоту ω' . Обозначения состояний с тильдой ($\tilde{a} = 1\tilde{s}$, $\tilde{a}' = 2\tilde{s}$) соответствуют электронным состояния во внешнем поле (собственным состояниям оut-гамильтониана); в частности, $2\tilde{s}$ состояние возникает из 2s состояния в отсутствие поля.

Основной вклад в НР поправки вносит интерференция резонансных и нерезонансных членов в выражении для амплитуды рассеяния [35, 43]. В [35] были включены только нерезонансные члены, обладающие той же симметрией, что и резонансный (см. раздел 3). Как отмечалось в [43], наиболее важный вклад возникает из-за интерференции между резонансным членом и нерезонансными членами с другой симметрией: в качестве примера был рассмотрен вклад нерезонансного состояния $2p_{3/2}$ в резонанс $1s-2p_{1/2}$. Было обнаружено, что этот вклад возникает лишь для дифференциального сечения резонансного рассеяния фотонов на атоме (зависящего

от направлений налетающего и испущенного фотонов). Далее показано, что для случая двухфотонного 1s - 2s возбуждения с последующим распадом во внешнем электрическом поле HP вклады такого типа сохраняются как в дифференциальном, так и в полном сечении при условии, что форма резонансной линии является вполне естественной (см. о применимости теории [184] в предыдущем разделе). Также предполагается, что внешнее электрическое поле является слабым и можно пренебречь штарковскими сдвигами и соответствующим расщеплением уровней. Критерием слабого поля является $\mathcal{E} \ll \mathcal{E}_c = 475$ В/см, где \mathcal{E} - напряженность электрического поля. В поле $\mathcal{E} = \mathcal{E}_c$ матричный элемент для линейного штарковского сдвига равен лэмбовскому расщеплению, а уровни 2s и 2p полностью смешаны [5].

С учетом нерезонансных вкладов сечение рассеяния двух эквивалентных фотонов с последующим "запаздывающим" распадом во внешнем электрическом поле может быть представлено в виде:

$$d\sigma_{\tilde{a}a}^{(\text{FGS})} = \frac{1}{2\pi} \frac{W_{\tilde{a}\,\tilde{a}'}^{(\text{em})} |\langle \tilde{a}' | a' \rangle|^2 W_{a'a}^{(2\gamma \,\text{abs})}}{(E_{a'} - E_a - 2\omega)^2 + \frac{1}{4}\Gamma_{a'}^2} S_{a\,a'}^{2\gamma} + \qquad (4.13)$$
$$\frac{1}{2\pi} 2\Re \left[\frac{A_{\tilde{a}\,\tilde{a}'}^{(\text{em})*} \langle \tilde{a}' | a' \rangle^* A_{\tilde{a}\,\tilde{a}''}^{(\text{em})} \langle \tilde{a}'' | a'' \rangle A_{a'a}^{(2\gamma \,\text{abs})*} A_{a''a}^{(2\gamma \,\text{abs})}}{(E_{a'} - E_a - 2\omega - \frac{1}{2}\Gamma_{a'})(E_{a''} - E_a - 2\omega - \frac{1}{2}\Gamma_{a''})} S_{a\,a''}^{2\gamma} \right],$$

где $A_{a'a}^{(2\gamma \text{ abs})*}$, $A_{a''a}^{(2\gamma \text{ abs})}$ - приведенные двухфотонные амплитуды, полученные по теореме Эккарта-Вигнера [179].

В слабом электрическом поле

Здесь знак модуля для отношения штарковского сдвига к лэмбовскому, $\xi_{\rm S}$ (определение см. выше) стоит дабы соответствующее число считать положительным. Тогда интегралы перекрывания в (4.13) $\langle \tilde{a}' | a' \rangle = \langle \tilde{a}'' | a'' \rangle = 1$.

Далее, вводя обозначение $E_{a'}-E_a\equiv\omega_0$, найдем $E_{a''}-E_a-2\omega$

 $E_{a''} - E_a - 2\omega \pm E_{a'} = \omega_0 - \Delta E_L - 2\omega$ для второго знаменателя в нерезонансном слагаемом выражения (4.13). ΔE_L в общем случае тождественно равно $E_{a''} - E_{a'}$ и представляет лэмбовский свдиг для возбуждения состояния 2s (далее вкладом сверхтонкого расщепления уровней в лэмбовский свдиг пренебрегается, в виду оценочного характера поправки). Рассматривая процесс возбуждения $1s_{1/2} + 2\gamma \rightarrow 2s_{1/2}$, следует положить $a = \tilde{a} = 1s_{1/2}$, $a' = 2s_{1/2}$, $a'' = 2p_{1/2}$, а состояния с тильдой определены согласно (4.14). Схематически указанный выбор проиллюстрирован на Рис. 4.4.



Рис. 4.4. Схема уровней двухфотонного 1s - 2s перехода с учетом сверхтонкого расщепления. Вертикальные двойные линии обозначают разрешенные двухфотонные переходы. Вертикальные двойные пунктирные линии обозначают запрещенные по теореме Ландау-Янга двухфотонные переходы [122,124,125]. Вклад в НР поправку к частоте 1s-2s перехода возникает от разрешенного перехода 1s - 2p.

Для последующих оценок учитывается, что $\Delta E_L \approx 10^9$ Гц, а ширина уровня $\Gamma_{a'}$ определена экспериментальными условиями и $\Gamma_{a'} = \Gamma_{\exp} \approx 10^3$ Гц. Учитывая выражения (4.14), амплитуды, входящие в (4.13), можно оценить следующим образом: $A_{\tilde{a}\tilde{a}'}^{(em)} \approx |\xi_{\rm S}|\Gamma_{2p}^{1/2}$, $A_{\tilde{a}\tilde{a}''}^{(em)} \approx \Gamma_{2p}^{1/2}$, где Γ_{2p} - естественная ширина уровня 2p в атоме водорода. Тогда, из условия экстремума, максимум профиля линии (4.14) может быть найден на частоте ω_0 плюс добавка (взятая по модулю):

$$\delta^{(\text{FGS})} \approx \frac{1}{4} \frac{\Gamma_{\text{exp}}^2}{\Delta E_L} \left(\frac{W_{1s,2p}^{(2\gamma)}}{W_{1s,2s}^{(2\gamma)}} \right)^{1/2} \frac{1}{\xi_{\text{S}}} \frac{S_{a\,a''}^{2\gamma}}{S_{a\,a'}^{2\gamma}}.$$
(4.15)
Коэффициенты $S_{aa'}^{2\gamma}$, $S_{aa''}^{2\gamma}$ были рассчитаны для случая F = F' = F'' = 1 [41]: их отношение равно $S_{aa''}^{2\gamma}/S_{aa'}^{2\gamma} = 18/11$. Оценка отношения вероятностей двухфотонного поглощения может быть вычислена с учетом расчетов проведенных в [110] (см. также следующие разделы диссертации, работы [83, 106, 111, 112, 114, 117] и ссылки в них): хорошо известная вероятность двухфотонного поглощения $W_{1s,2s}^{(2\gamma)} \approx 8.226 \text{ c}^{-1}$, а $W_{1s,2p}^{(2\gamma)} = W_{1s,2p}^{(E1M1)} + W_{1s,2p}^{(E1E2)} \approx 1.089 \times 10^{-5} \text{ c}^{-1}$. Тогда, при $\xi_{\rm S} = 0.1$ (в поле $\mathcal{E} \approx 47.5 \text{ B/см}$),

$$\delta^{(\text{FGS})} \approx 10^{-5} \ \Gamma$$
ц. (4.16)

Выбор полного атомного момента (с учетом спина ядра) для состояний a, a', a'' F = F' = F'' = 1 обусловлен, во-первых, экспериментами по измерению частоты 1s - 2s перехода [20,21,134,182], а, во-вторых, тем, что перенос полного момента двух фотонов равного единице строго запрещен согласно теореме Ландау-Янга (детали см. в [122,124,125]).

Важно также отметить, что зависимость $1/\xi_S$ в (4.15) не может быть использована в случае нулевого поля. Смысловой предел здесь задается полем, в котором скорость распада 2s уровня за счет примеси 2p состояния становится равной естественной ширине распада 2s состояния. Эта предельная напряженность поля будет настолько мала, что ее невозможно будет использовать в реальном эксперименте.

Ситуация в водороде представляется весьма удачной для точного измерения резонансной частоты из-за отсутствия перехода в другой сверхтонкий подуровень (F' = F'' = 0) состояния 2s или 2p. Для сравнения, в дейтерии, где значения полного углового момента атома для уровней 1s и 2s равны F = 1/2, 3/2, соответственно, переходы с различными полными атомными моментами разрешены (для F = 3/2 имеем $|3/2 - 0(2)| \le F' \le 3/2 + 0(2) \Rightarrow F' = 1/2, 3/2, 5/2, 7, 2$). НР поправка для аналогичного эксперимента (см. [185]) по порядку величины равна

$$\delta^{(\mathrm{D})} \sim \frac{1}{4} \frac{\Gamma_{\mathrm{exp}}^2}{\Delta E_{\mathrm{HFS}}},\tag{4.17}$$

где $\Delta E_{\rm HFS}^{(D)} = E_{2s_{1/2}(F=3/2)} - E_{2s_{1/2}(F=1/2)} \approx 40.9 \, {\rm M}\Gamma$ ц - интервал сверхтонкой структуры для 2s уровня в атоме дейтерия (согласно работе [186] $\Delta E_{\rm HFS}^{(D)} = 40\,924\,454(7) \, \Gamma$ ц). Взяв то же значение $\Gamma_{\rm exp} \approx 10^3$, что и для атома водорода, приблизительная оценка (4.17) приводит к $\delta^{(D)} \sim 10^{-2} \, \Gamma$ ц, что на три порядка больше, чем для водорода. Это не так уж далеко от экспериментальной точности порядка 7 Γ ц [186].

4.4. Заключение по HP поправкам к частоте двухфотонного 1*s* – 2*s* возбуждения

Проведенные в разделах 4.1, 4.3 оценки асимметрии наблюдаемой спектральной линии, возникающей для перехода 1s - 2s в атоме водорода, показали их незначительность. Так, верхняя граница нерезонансного вклада находится на уровне 10^{-2} , что на три порядка меньше погрешности измерений (около 10 Гц) в современных спектроскопических экспериментах [20, 21, 134, 182]. В первую очередь это связано с особенностью метастабильного 2s атомного уровня и, во-вторых, с отсутствием близко лежащих состояний, которые могут быть эффективно возбуждены "двухфотонным" способом. Поскольку НР поправки к частоте перехода пропорциональны квадрату ширины и обратно пропорциональны энергии расщепления соседних резонансных состояний (в ведущем порядке), а $\Gamma_{2s} \approx 1.31$ Гц, то их малость понятна. Основную трудность для аккуратного вычисления НР поправок к частоте 1s-2s перехода представляют экспериментальны условия. Согласно [20, 21, 134, 182], в таких экспериментах область возбуждения и де-возбуждения пространственно разделены, что делает "стандартные" методы непригодными для анализа. В связи с этим был использован КЭД формализм с in- и out-гамильтонианами [184]. Вычисления НР поправок для измерения частоты на основе двухфотонного возбуждения 1s-2s перехода с последующим распадом во внешнем электрическом поле были представлены в работах [37, 40-42].

Следует различать два типа возможных резонансных оптических экспериментов. Все процессы состоят из трех стадий: возбуждения определенного промежуточного состояния, его распространения и его распада.

75

Когерентность в сумме по промежуточному состоянию может разрушаться в результате столкновений (первый тип экспериментов) или сохраняться (второй тип экспериментов). Анализ показал, что НР поправки в случае первого типа резонансных экспериментов существенно меньше, чем для экспериментов второго типа [42]. Однако, в предельном случае, когда можно наблюдать естественный профиль линии и отсутствуют искажения, обусловленные вышеукзанными эффектами, оба типа резонансных экспериментов фактически совпадают и НР поправки к частоте для обоих экспериментов одинаковы. В диссертации рассмотрена только эта ситуация со следующей аргументацией: когда естественный профиль линии не наблюдается, т.е. экранируется столкновительным, времяпролетным, доплеровским уширением и т.п. [134, 182], то именно эти эффекты определяют возможную неопределенность экспериментального определения частоты перехода. Эта неопределенность, очевидно, больше, чем нерезонансная асимметрия профиля, но ее можно уменьшить за счет технических усовершенствований. Искажение профиля линии, вызванное нерезонансными вкладами, является неизбежным систематическим эффектом, требующим в каждом конкретном случае теоретического анализа используемого в эксперименте процесса измерения.

Отдельно стоит отметить работу [42] (при неоценимом вкладе Е. Черновской) тем, что в ней были представлены результаты аналитических вычислений полного и дифференциального сечений однофотонного рассеяния как для произвольной четности (электрический и магнтитный типы), так и произвольной мультипольности фотонов. Полученные выражения могут быть использованы в соответствующем анализе НР поправок. В следующих разделах будут рассмотрены конкретные примеры вычисления НР поправок, возникающих из дифференциального сечения рассеяния и, как следствие, зависящими от углов. Кроме того, учет влияния внешнего электрического поля на измерения частоты перехода открыл возможность проведения исследований другого рода. В одном из следующих разделов диссертации будет представлен сравнительный анализ спектральных характеристик (частота перехода и ширина уровня) атомов водорода (H) и анти-водорода (H) при воздействии внешнего электрического поля.

Глава 5.

Эффект квантовой интерференции (ЭКИ)

5.1. Дифференциальное сечение рассеяния: два близких резонанса

Амплитуду рассеяния фотонов, см. (2.19), удобно представить в виде:

$$U_{fi}^{(2)} = \sum_{\substack{j_{\gamma_1}m_{\gamma_1}s_1\\j_{\gamma_2}m_{\gamma_2}s_2}} C_{j_{\gamma_1}m_{\gamma_1}s_1}^{j_{\gamma_1}m_{\gamma_1}s_1}(\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{n}_{\boldsymbol{k}_1}; \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{n}_{\boldsymbol{k}_2}) \left[\sum_{m_a} \frac{\left(\boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{j_{\gamma_2}m_{\gamma_2}}^{(s_2)*} \right)_{fa} \left(\boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{j_{\gamma_1}m_{\gamma_1}}^{(s_1)} \right)_{ai}}{E_a - E_i - \omega_1 - \frac{1}{2}\Gamma_a} + (5.1) \right] \\ \sum_{n \neq a} \frac{\left(\boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{j_{\gamma_2}m_{\gamma_2}}^{(s_2)*} \right)_{fn} \left(\boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{j_{\gamma_1}m_{\gamma_1}}^{(s_1)} \right)_{ni}}{E_n - E_i - \omega_1} + \sum_n \frac{\left(\boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{j_{\gamma_1}m_{\gamma_1}}^{(s_1)} \right)_{fn} \left(\boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{j_{\gamma_2}m_{\gamma_2}}^{(s_2)*} \right)_{ni}}{E_n - E_i - \omega_2} \right] \frac{2\pi e^2}{\sqrt{\omega_1 \omega_2}}.$$

Здесь в нерезонансных слагаемых бесконечно малые части (1 - i0) в знаменателях опущены, поскольку расходящиеся вклады в них отсутствуют. В резонансном приближении предполагается, что Γ_a не зависит от ω_1 , и операторы испускания фотонов, заданные выражением (2.17), берутся при фиксированных энергиях перехода, т.е. при $\omega_1 = E_a - E_i$ и $\omega_2 = E_a - E_f$. Сохранив только первый (резонансный) член в (5.1), после интегрирования по ω_2 в (2.7), соответствующее сечение рассеяния представляет профиль линии, симметричный относительно резонансной частоты $\omega_0 \equiv E_a - E_i$:

$$\frac{d\sigma_{fi}(\omega_1)}{d\boldsymbol{n}_{k_2}} = \text{const} \frac{f_{fi}^{(1\gamma)}(a,a)}{(\omega_1 - \omega_0)^2 + \frac{\Gamma_a^2}{4}},\tag{5.2}$$

$$f_{fi}^{(1\gamma)}(a,a') = (5.3)$$

$$\left(\sum_{\substack{j_{\gamma_1}m_{\gamma_1}s_1\\j_{\gamma_2}m_{\gamma_2}s_2}} C_{j_{\gamma_2}m_{\gamma_2}s_2}^{j_{\gamma_1}m_{\gamma_1}s_1}(e_1, n_{k_1}; e_2, n_{k_2}) \sum_{m_a} \left(\alpha A_{j_{\gamma_2}m_{\gamma_2}}^{(s_2)*}\right)_{fa} \left(\alpha A_{j_{\gamma_1}m_{\gamma_1}}^{(s_1)}\right)_{ai} \times\right)$$

$$\left(\sum_{\substack{j'_{\gamma_1}m'_{\gamma_1}s'_1\\j'_{\gamma_2}m'_{\gamma_2}s'_2}} C_{j'_{\gamma_1}m'_{\gamma_1}s'_1}^{j'_{\gamma_1}m'_{\gamma_1}s'_1}(e_1, n_{k_1}; e_2, n_{k_2}) \sum_{m_{a'}} \left(\alpha A_{j'_{\gamma_2}m'_{\gamma_2}}^{(s'_2)*}\right)_{fa'} \left(\alpha A_{j'_{\gamma_1}m'_{\gamma_1}}^{(s'_1)}\right)_{a'i}\right)^*.$$

Здесь "const" - константа, не представляющая интереса для дальнейших вычислений. Таким образом, при учете только резонансного члена профиль спектральной линии имеет лоренцеву форму с максимумом при $\omega = \omega_0$. Частоту резонансного перехода $\omega_{\rm res}$ можно определить как максимум выражения (5.2). Для симметричного профиля определения через максимум и "центр линии" (см. [32]) совпадают.

Учет остальных (нерезонансных) членов в (5.1) приводит к асимметрии профиля линии. Если асимметрия незначительна, то частоту резонансного перехода $\omega_{\rm res}$ можно определить из $d\sigma_{if}$ как $\omega_{\rm res} = \omega_{\rm max}$, где $\omega_{\rm max}$ соответствует максимальному значению $\sigma_{if}(\omega)$, см. [43, 49, 50, 53, 148]. Пока профиль линии симметричен относительно $\omega = \omega_{\rm max}$, определение максимума остаётся эквивалентным любому другому способу извлечения $\omega_{\rm res}$ из профиля линии. В случае небольшой асимметрии условие экстремума приводит к смещенному значению, т.е. $\omega_{\rm max} = \omega_{\rm res} + \delta_{\rm NR}$, где $\delta_{\rm NR}$ определяется нерезонансными членами в уравнении. (5.1). Ограничение, налагаемое на определение резонансной частоты при наличии асимметрии, следует из соотношения $\delta_{\rm NR} \ll \Gamma_a$.

Предполагается, что в процессе резонансного поглощения $i+\gamma_1 \rightarrow a$

правилами отбора также допускается еще один (близкий) переход $i + \gamma_1 \rightarrow a'$ [122,124,125]. Тогда в (5.1) можно выделить два слагаемых - резонансный и близкий к нему:

$$U_{fi}^{(2)} = e^{2} \frac{2\pi}{\sqrt{\omega_{1}\omega_{2}}} \sum_{\substack{j_{\gamma_{1}}m_{\gamma_{1}}s_{1}\\j_{\gamma_{2}}m_{\gamma_{2}}s_{2}}} C_{j_{\gamma_{2}}m_{\gamma_{2}}s_{2}}^{j_{\gamma_{1}}m_{\gamma_{1}}s_{1}} (\boldsymbol{e}_{1}, \boldsymbol{n}_{\boldsymbol{k}_{1}}; \boldsymbol{e}_{2}, \boldsymbol{n}_{\boldsymbol{k}_{2}}) \times$$
(5.4)
$$\left[\sum_{m_{a}} \frac{\left(\boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{j_{\gamma_{2}}m_{\gamma_{2}}}^{(s_{2})*} \right)_{fa} \left(\boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{j_{\gamma_{1}}m_{\gamma_{1}}}^{(s_{1})} \right)_{ai}}{E_{a} - E_{i} - \omega_{1} - \frac{i}{2}\Gamma_{a}} + \sum_{m_{a'}} \frac{\left(\boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{j_{\gamma_{2}}m_{\gamma_{2}}}^{(s_{2})*} \right)_{fa'} \left(\boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{j_{\gamma_{1}}m_{\gamma_{1}}}^{(s_{1})} \right)_{a'i}}{E_{a'} - E_{i} - \omega_{1}} + \sum_{n} \frac{\left(\boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{j_{\gamma_{1}}m_{\gamma_{1}}}^{(s_{2})*} \right)_{fa} \left(\boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{j_{\gamma_{2}}m_{\gamma_{2}}}^{(s_{2})*} \right)_{fa}}{E_{n} - E_{i} - \omega_{1}} + \sum_{n} \frac{\left(\boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{j_{\gamma_{1}}m_{\gamma_{1}}}^{(s_{1})} \right)_{fn} \left(\boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{j_{\gamma_{2}}m_{\gamma_{2}}}^{(s_{2})*} \right)_{ni}}{E_{n} - E_{i} - \omega_{2}} \right],$$

Последние два члена в (5.4) представляют собой нерезонансный вклад в амплитуду. Их учет в определение частоты перехода был представлен в разделе 3.1 (см. выражение (3.8) для $\delta_{\rm NR}$). Здесь и далее ими можно пренебречь. После интегрирования по ω_2 в (2.7), соответствующее сечение можно привести к виду:

$$\frac{d\sigma_{fi}}{d\boldsymbol{n}_{k_2}} = \text{const}\left(\frac{f_{fi}^{(1\gamma)}(a,a)}{(\omega_0 - \omega_1)^2 + \frac{\Gamma_a^2}{4}} + \frac{2f_{fi}^{(1\gamma)}(a,a')(\omega_0 - \omega_1)}{\left((\omega_0 - \omega_1)^2 + \frac{\Gamma_a^2}{4}\right)(\omega_0 - \omega_1 + \Delta)}\right), (5.5)$$

где $\Delta \equiv E_{a'} - E_a$, и оставлен только интерференционный вклад помимо квадратичного от второго слагаемого в (5.4).

Нерезонансная поправка ведущего порядка к частоте перехода $i + \gamma_1 \rightarrow a$ возникает из условия экстремума и равна

$$\frac{d\sigma_{if}(\omega_{1})}{d\omega_{1}} = -\frac{1}{(\omega_{0} - \omega_{1} + \Delta)^{2} \left((\omega_{1} - \omega_{0})^{2} + \frac{\Gamma_{a}^{2}}{4}\right)^{2}} \times (5.6)$$

$$8 \left[f_{fi}^{(1\gamma)}(a, a') \left((\omega_{1} - \omega_{0})^{2} - \frac{\Gamma_{a}^{2}}{4}\right) \Delta - 2f_{fi}^{(1\gamma)}(a, a')(\omega_{1} - \omega_{0})^{3} + f_{fi}^{(1\gamma)}(a, a)(\omega_{1} - \omega_{0})(\omega_{0} - \omega_{1} + \Delta)^{2} \Delta \right].$$

Раскладывая числитель в (5.6) в ряд Тейлора в окрестности ω_0 , в ведущем

порядке можно положить

$$-8f_{fi}^{(1\gamma)}(a,a')\Gamma_a^2\Delta - 32f_{fi}^{(1\gamma)}(a,a)(\omega_1 - \omega_0)\Delta^2 = 0.$$
(5.7)

Наконец, решив уравнение (5.7) относительно ω_1 , получается

$$\omega_{\max} = \omega_0 - \delta_{NR}, \tag{5.8}$$
$$f^{(1\gamma)}(a, a') \ \Sigma^2$$

$$\delta_{\rm NR} = \frac{f_{fi}^{(1\gamma)}(a,a')}{f_{fi}^{(1\gamma)}(a,a)} \frac{\Gamma_a^2}{4\Delta}.$$
(5.9)

Выражение (5.9) возникает в качестве старшего порядка разложения по Γ_a/Δ и представляет собой часть НР поправок, возникающей за счет интерференции переходов в близлежащие (с резонансным) состояния. За счет происхождения эффект называют квантовой интерференцией (ЭКИ). Приближения, которые использовались выше предполагают малость параметра $\Gamma_a/\Delta < 1$, например, для соседних компонент тонкой структуры (см. конкретные примеры ниже). Параметр Γ_a/Δ может быть и немалым для двух соседних сверхтонких подуровней и в этом случае требует специального исследования, см. раздел 3.5 и [42].

Вклад следующего порядка можно получить (см. раздел 3.3), сохранив остальные члены в выражении (5.6) и учесть квадрат второго слагаемого в (5.4). Тогда нерезонансная поправка к частоте перехода может быть найдена виде:

$$\delta_{\rm NR} = \frac{f_{fi}^{(1\gamma)}(a,a')}{f_{fi}^{(1\gamma)}(a,a)} \frac{\Gamma_a^2}{4\Delta} - \frac{\left(f_{fi}^{(1\gamma)}(a,a')\right)^2 \left(2f_{fi}^{(1\gamma)}(a,a) + f_{fi}^{(1\gamma)}(a,a')\right)}{f_{fi}^{(1\gamma)}(a,a)^3} \frac{\Gamma_a^4}{16\Delta^3}.$$
 (5.10)

Первый член в (5.10) совпадает с (5.9), а второй пропорционален отношению $\Gamma_a^4/(16\Delta^3)$. В большинстве случаев второй вклад представляет собой небольшое дополнение к HP поправке ведущего порядка (5.9). Выражения (5.9), (5.10) можно использовать для оценки величины поправок, учитывая, что $\Gamma_a \sim m\alpha(\alpha Z)^4$ и интервал тонкого расщепления $\Delta \sim m(\alpha Z)^4$ в релятивистских единицах (для наглядности указана масса электрона). Тогда $\Gamma_a^2/\Delta \sim m\alpha^2(\alpha Z)^4$, а $\Gamma_a^4/\Delta^3 \sim m\alpha^4(\alpha Z)^4$, т.е. в α^2 раз меньше. Хотя множители в (5.10) безразмерны, они могут существенно различаться и должны рассчитываться для каждого конкретного случая отдельно. Другой способ оценить поправки в (5.10) соответствует прямому использованию табличных значений ширины уровня и интервалов расщепления.

Как следует из выражения (5.8), НР поправка зависит от постановки эксперимента, то есть от угловых и поляризационных корреляций между падающими и улетающими фотонами. Вся информация о таких корреляциях дается соотношением $f_{fi}^{(1\gamma)}(a,a')/f_{fi}^{(1\gamma)}(a,a)$. Поскольку коэффициенты в (5.3) зависят от квантовых чисел (угловых моментов) конкретных атомных состояний и взаимной ориентации векторов e_1 , n_{k_1} , e_2 , n_{k_2} , результирующее значение НР поправки определяется геометрией эксперимента и методом регистрации фотонов [43, 52]. Прежде чем перейти к частным примерам, необходимо записать амплитуду рассеяния. В нерелятивистском пределе и дипольном приближении [2, 3]:

$$\frac{U_{fi}^{(2)}}{2\pi e^2 \sqrt{\omega_1 \omega_2}} = \sum_n \frac{\left(\mathbf{r} \mathbf{e}_2^*\right)_{fn} \left(\mathbf{r} \mathbf{e}_1\right)_{ni}}{E_n(1-\mathrm{i}0) - E_i - \omega_1} + \sum_n \frac{\left(\mathbf{r} \mathbf{e}_1\right)_{fn} \left(\mathbf{r} \mathbf{e}_2^*\right)_{ni}}{E_n(1-\mathrm{i}0) - E_f + \omega_1}, (5.11)$$

где теперь суммирование проводится по шрёдингеровскому спектру.

5.2. Угловые корреляции: эффект квантовой интерференции

В отличие от резонансного значения частоты перехода, НР поправки зависят от процессов возбуждения и девозбуждения атомного уровня, типа эксперимента и способа извлечения значения частоты перехода из экспериментальных данных. Для всех случаев, указанных в предыдущих разделах, НР поправки оказались незначительными. В частности, согласно [42], это имело место и при измерении частоты двухфотонного перехода 1s - 2s в водороде. Ситуация изменилась, когда были представлены результаты высокоточного измерения частот $2s_{1/2}^{F=0} \rightarrow 4p_{1/2}^{F=1}$ и $2s_{1/2}^{F=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F=1}$ переходов

в атоме водорода [32]. Неопределенность этих измерений намного меньше, чем наблюдаемые эффекты квантовой интерференции. Для достижения точности на уровне нескольких килогерц наблюдаемый асимметричный профиль линии был фитирован соответсвующим теоретическим контуром (см. [43]). Результатом является выделение симметричной части и последующее определение "центра линии". Согласно теории профиля линии, это свидетельствует о существовании нерезонансных поправок.

В настоящем разделе представлены выражения для сечения резонансного однофотонного рассеяния на атоме водорода с учетом тонкой и сверхтонкой структуры атомных уровней [32]. Соответствующие выражения для амплитуд содержат зависимости от направлений и поляризаций падающих (поглощенных) и вылетающих (испускаемых) фотонов. Таким образом, они могут быть использованы для описания различных экспериментов, с разными корреляциями между направлениями и (или) поляризациями фотонов. Возникающие из амплитуд сечения рассеяния используются для получения НР поправок. Влияние последних на определение частоты перехода является основной целью.

Следуя [52], рассматриваются НР поправки, возникающие с учетом соседних компонент уровней тонкой структуры. Согласно эксперименту [32] взаимное влияние переходов $2s_{1/2}^{F=0} \rightarrow 4p_{1/2}^{F=1}$ и $2s_{1/2}^{F=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F=1}$ было обнаружено и учтено в соответствии с теорией, изложенной в дополнительных материалах [32] и находящейся в полном соответсвии с теоретическим анализом представленным в [43]. Сначала рассмотрим НР поправки к переходу $2s_{1/2}^{F=0} \rightarrow 4p_{1/2}^{F=1}$, обусловленные квантовой интерференцией с $2s_{1/2}^{F=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F=1}$ переходом. Поправки к другому переходу $2s_{1/2}^{F=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F=1}$ находятся аналогичным образом. Так будет показано, что НР поправки при переходах на фиксированный конечный сверхтонкий подуровень не зависят от типа эксперимента и "геометрии" эксперимента. Однако, они зависят от выбора канала распада: НР поправки различны, если процесс регистрации заканчивается состояниями с F = 0, 1 или 2. Когда частота вылетающего фотона вообще не фиксируется, результат измерения начинает зависеть как от типа эксперимента, так и от схемы эксперимента (геометрии), что находится в полном согласии с [32]. Вновь проведем градацию типа экспериментов. В эксперименте первого типа направления распространения фотонов фиксированы: направление падающего фотона \boldsymbol{n}_{k_1} совпадает с направлением луча лазера, а направление выходящего фотона \boldsymbol{n}_{k_2} определяется положением детектора. Во втором типе экспериментов зафиксированы поляризация падающего фотона \boldsymbol{e}_1 и направление выходящего фотона \boldsymbol{n}_{k_2} ; именно так обстоит дело в эксперименте [32].

В нерелятивистском пределе матричные элементы амплитуды рассеяния, определяемые выражениям (5.11) не зависят явно от направлений фотонов \mathbf{n}_{k_1} и \mathbf{n}_{k_2} . Эта зависимость возникает из условия поперечности. Поскольку в лазерном луче условие поперечности будет выполняться автоматически, направление этого луча в эксперименте типа 2 можно выбрать произвольным. Зависимость от \mathbf{n}_{k_1} , \mathbf{n}_{k_2} становится явной после суммирования по поляризациям фотонов. Тогда, для эксперимента типа 1 нужно вывести $\sum_{e_1,e_2} d\sigma_{if}$, а для эксперимента типа 2 необходимо получить $\sum_{e_2} d\sigma_{if}$, где дифференциальное сечение определяется согласно (5.5). В нерелятивистском пределе соответствующие множители $f_{fi}(a, a')$ в сечении (5.5) для эксперимента первого и второго типа даются следующими выражениями [52]:

$$f_{fi}^{(1)}(a,a') = 36 \sum_{xy} (-1)^{F_{a'}-F_{a}+x+y} \Pi_{x}^{2} \Pi_{y} \begin{cases} 1 & x & 1 \\ F_{a'} & F_{f} & F_{a} \end{cases} \begin{cases} 1 & x & 1 \\ F_{a'} & F_{i} & F_{a} \end{cases} (5.12)$$

$$\times \begin{cases} 1 & 1 & y \\ 1 & 1 & x \end{cases} \begin{cases} 1 & 1 & x \\ 1 & 1 & 1 \end{cases}^{2} \begin{cases} \left\{ v_{1}^{(1)} \otimes w_{1}^{(1)} \right\}_{y} \otimes \left\{ v_{1}^{(1)} \otimes w_{1}^{(1)} \right\}_{y} \right\}_{00} \\ \times \langle n_{f} l_{f} j_{f} F_{f} || r || n_{a} l_{a} j_{a} F_{a} \rangle \langle n_{a} l_{a} j_{a} F_{a} || r || n_{i} l_{i} j_{i} F_{i} \rangle \\ \times \langle n_{i} l_{i} j_{i} F_{i} || r || n_{a'} l_{a'} j_{a'} F_{a'} \rangle \langle n_{a'} l_{a'} j_{a'} F_{a'} || r || n_{f} l_{f} j_{f} F_{f} \rangle, \end{cases}$$

$$f_{fi}^{(2)}(a,a') = 6 \sum_{xy} (-1)^{F_{a'}-F_{a}+y} \Pi_{x}^{2} \Pi_{y} \begin{cases} 1 & x & 1 \\ F_{a'} & F_{f} & F_{a} \end{cases} \begin{cases} 1 & x & 1 \\ F_{a'} & F_{i} & F_{a} \end{cases}$$
(5.13)
$$\times \begin{cases} 1 & 1 & y \\ 1 & 1 & x \end{cases} \begin{cases} 1 & 1 & x \\ 1 & 1 & 1 \end{cases} \begin{cases} \left\{ v_{1}^{(2)} \otimes w_{1}^{(2)} \right\}_{y} \otimes \left\{ v_{1}^{(2)} \otimes w_{1}^{(2)} \right\}_{y} \right\}_{00} \\ \times \langle n_{f} l_{f} j_{f} F_{f} || r || n_{a} l_{a} j_{a} F_{a} \rangle \langle n_{a} l_{a} j_{a} F_{a} || r || n_{i} l_{i} j_{i} F_{i} \rangle \\ \times \langle n_{i} l_{i} j_{i} F_{i} || r || n_{a'} l_{a'} j_{a'} F_{a'} \rangle \langle n_{a'} l_{a'} j_{a'} F_{a'} || r || n_{f} l_{f} j_{f} F_{f} \rangle, \end{cases}$$

где $v_1^{(1)} = \mathbf{n}_{k_1}, v_1^{(2)} = \mathbf{e}_1, w_1^{(1)} = w_1^{(2)} = \mathbf{n}_{k_2}$ и $\Pi_x = \sqrt{2x+1}$. В (5.12), (5.13) коэффициент $\left\{ v_1^{(1,2)} \otimes w_1^{(1,2)} \right\}_y$ обозначает тензорное произведение ранга yдля двух тензоров $v_1^{(1,2)}$ и $w_1^{(1,2)}$ ранга 1 каждый [179]. Это тензорное произведение полностью определяет угловые корреляции в сечении рассеяния.

Определяя частоту перехода через условие экстремума для сечения, соответствующая HP поправка ведущего порядка принимает вид:

$$\delta_{\rm NR}^{(1,2)} = \frac{f_{fi}^{(1,2)}(a,a')}{f_{fi}^{(1,2)}(a,a)} \frac{\Gamma_a^2}{4\Delta}.$$
(5.14)

Здесь $\Delta = E_{a'} - E_a$ представляет тонкое расщепление для уровней $4p_{1/2}^{F=1}$ и $4p_{3/2}^{F=1}$. Поправка (5.14) может зависеть от постановки эксперимента, т.е. от угла между векторами \mathbf{n}_{k_1} и \mathbf{n}_{k_2} в эксперименте типа 1 или от угла между векторами \mathbf{e}_{k_1} и \mathbf{n}_{k_2} в эксперименте типа 2. Подробно эта зависимость обсуждалась в [52]; обычно она сводится к $1+3\cos 2\vartheta$ для дипольных электрических фотонов при учете тонкой структуры уровней [43]. Однако, будучи определяемой набором квантовых чисел конретных рассматриваемых состояний, учет сверхтонкой структуры может нарушить последнее (см. ниже).

5.3. Приложение к спектроскопии водорода

Для определения частоты $2s_{1/2}^{F=0} \rightarrow 4p_{1/2}^{F=1}$ перехода с учетом НР поправок, происходящих от соседнего $4p_{3/2}^{F=1}$ уровня [32,52] следует положить для начального состояния $n_i l_i = 2s$, $j_i = 1/2$, $F_i = 0$, резонансное состояние определеяется набором $n_a l_a = 4p$, $j_a = 1/2$, $F_a = 1$, и, соответственно, для ближайшего состояния, приводящему к ЭКИ $j_{a'} = 3/2$, $F_{a'} = 1$. Численные значения нерезонансных поправок в $2s_{1/2}^{F_a=0} \rightarrow 4p_{1/2}^{F_a=1}(4p_{3/2}^{F_{a'}=1}) \rightarrow f$ процессе рассеяния фотонов с фиксированным конечным состоянием f представлены в Таблице 5.1.

Таблица 5.1. НР поправки в кГц к частоте перехода $2s_{1/2}^{F_i=0} \to 4p_{1/2}^{F_a=1} (\nu_{1/2}$ в обозначениях [32]) с учетом интерферируещего перехода в состояние $4p_{3/2}^{F_{a'}=1}$ для эксперимента типа 2 ($e_1n_{k_2}$ корреляция) и $2s_{1/2}^{F_i=0} \to 4p_{3/2}^{F_a=1} (\nu_{3/2}$ в обозначениях [32]) с учетом состояния $4p_{1/2}^{F_{a'}=1}$. Такие же значения получены для эксперимента типа 1 ($n_{k_1}n_{k_2}$ корреляция).

Конечное состояние f	$\delta_{ m NR}^{(2)}$ к $ u_{1/2}$ (кГц)	$\delta_{ m NR}^{(2)}$ к $ u_{3/2}$ (кГц)
$1s_{1/2}^{F_f=0}$	60.7127	-15.1782
$1s_{1/2}^{F_f=1}$	-30.3563	30.3563
$2s_{1/2}^{F_f=0}$	60.7127	-15.1782
$2s_{1/2}^{F_f=1}$	-30.3563	30.3563
$3s_{1/2}^{F_f=0}$	60.7127	-15.1782
$3s_{1/2}^{F_f=1}$	-30.3563	30.3563
$3d_{3/2}^{F_f=1}$	30.3563	30.3563
$3d_{3/2}^{F_f=2}$	6.0713	-151.7819

Для вычисления НР поправок (5.12), (5.13) и (5.14) были использованы теоретические значения, приведенные в [187], которые включают релятивистские КЭД поправки, поправки на сверхтонкую структуру и конечный размер ядра. То же самое касается интервала тонкой структуры $\Delta = E_{4p_{3/2}^{F_a'=1}} - E_{4p_{1/2}^{F_a=1}} = 1367433.3 \ \kappa\Gamma$ ц, значение ширины $\Gamma_a = \Gamma_{4p_{1/2}^{F_a=1}} = 1.2941 \times 10^7 \ \Gamma$ ц. Эти значения дают достаточно точный результат для $\delta_{\rm NR}$, до четырёх знаков после запятой. Параметр Γ_a/Δ в данном случае равен 0.00946, поэтому разложение по степеням этого параметра оказывается правомочным.

Как оказалось, НР поправки к частоте перехода $2s_{1/2}^{F_i=0} \to 4p_{1/2}^{F_a=1}$ не за-

висят от типа эксперимента и, более того, "геометрии" (углов) эксперимента. Однако эти поправки сильно зависят от метода регистрации частоты, т.е. от выбора состояния, в которое окончательно распадается возбужденный уровень $4p_{1/2}^{F_a=1}$. Более того, эта зависимость определяется только квантовыми числами конечного состояния, а результат практически не зависит от частоты вылетающего фотона. Последнее обстоятельство понятно, поскольку согласно (5.14) НР поправки пропорциональны отношению f_{nr}/f_{res} , где соответствующие разности энергий компенсируются. При разрешении сверхтонкой структуры конечных уровней поправки NR различаются лишь значениями полного углового момента F_f конечного сверхтонкого подуровня. Это видно из замкнутых выражений (5.12), (5.13), (5.14), определенных через 6*j*-символы.

Полученные значения частоты перехода для парциальных каналов сведены в Таблицу 5.2, где показаны каналы парциального рассеяния в различные конечные состояния (первый столбец), частоты перехода ω_0 как собственные значения гамильтониана [187] (второй столбец), нерезонансные поправки (третий столбец) см. в Таблице 5.1 и результирующие частоты перехода $\omega_{\rm res}^{\rm max\,(1,2)}$ (четвертый столбец). Результаты представлены для обеих измеренных в [32] частот перехода $\nu_{1/2} \rightarrow 2s_{1/2}^{F_i=0} - 4p_{1/2}^{F_a=1}$ и $\nu_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}^{F_i=0} - 4p_{3/2}^{F_a\prime=1}$ (вверхняя и нижняя части Таблицы 5.2, соответственно).

Ориентируясь на частоту $\nu_{1/2}$, для перехода $2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{1/2}^{F_a=1}$ три различных значения $\omega_{\text{res}}^{\max(1,2)}$, соответствующих $F_f = 0, 1, 2$, могут быть получены для обоих типов эксперимента, используя ω_0 из [187] и НР поправки из Таблицы 5.1:

Значения, указанные выше, равноправно могут быть использованы в качестве определения частоты $2s_{1/2}^{F=0} \rightarrow 4p_{1/2}^{F=1}$ перехода (по максимуму профиля линии - наиболее вероятная частота), т.е. представляют однозначно воспро-

Таблица 5.2. Численные значения частоты $\omega_{\rm res}^{\max{(1,2)}}$. В первом столбце указан канал парциального рассеяния, во втором столбце приведены значения ω_0 , использованные в расчетах для $\nu_{1/2}$ и $\nu_{3/2}$, см. [187], в третьем столбце показаны соответствующие значения нерезонансной поправки, а в последнем столбце приведены значения $\omega_{\rm max}$. Все значения указаны в кГц.

Переход, $\nu_{1/2}$	ω_0 , кГц [187]	$\delta_{ m NR}^{(1,2)},$ кГц	$\omega_{ m res}^{ m max (1,2)}, \ \kappa \Gamma$ ц
$2s_{1/2}^{F_i=0} \to 4p_{1/2}^{F_a=1} \to 1s_{1/2}^{F_f=0}$	616520152558 5	60.7127	616520152619.2
$2s_{1/2}^{\dot{F}_i=0} \to 4p_{1/2}^{\dot{F}_a=1} \to 1s_{1/2}^{\dot{F}_f=1}$	010020102000.0	-30.3563	616520152528.1
$2s_{1/2}^{\bar{F}_i=0} \to 4p_{1/2}^{\bar{F}_a=1} \to 2s_{1/2}^{\bar{F}_f=0}$	616520152558 5	60.7127	616520152619.2
$2s_{1/2}^{\dot{F}_i=0} \to 4p_{1/2}^{\dot{F}_a=1} \to 2s_{1/2}^{F_f=1}$	010020102000.0	-30.3563	616520152528.1
$2s_{1/2}^{F_i=0} \to 4p_{1/2}^{F_a=1} \to 3s_{1/2}^{F_f=0}$	616520152558 5	60.7127	616520152619.2
$2s_{1/2}^{F_i=0} \to 4p_{1/2}^{F_a=1} \to 3s_{1/2}^{F_f=1}$	010020102000.0	-30.3563	616520152528.1
$2s_{1/2}^{F_i=0} \to 4p_{1/2}^{F_a=1} \to 3d_{3/2}^{F_f=1}$	616520152558 5	-30.3563	616520152528.1
$2s_{1/2}^{\bar{F}_i=0} \to 4p_{1/2}^{\bar{F}_a=1} \to 3d_{3/2}^{F_f=2}$	010020102000.0	6.0713	616520152564.6
Переход, $ u_{3/2}$	ω ₀ , кГц [187]	$\delta_{ m NR}^{(1,2)},~\kappa\Gamma$ ц	$\omega_{ m res}^{ m max(1,2)},\ \kappa\Gamma$ ц
Переход, $\nu_{3/2}$ $2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F_a=1} \rightarrow 1s_{1/2}^{F_f=0}$	<i>ω</i> ₀ , кГц [187] 616521519991 8	$\delta_{\rm NR}^{(1,2)},$ кГц -15.1782	
Переход, $\nu_{3/2}$ $2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F_a=1} \rightarrow 1s_{1/2}^{F_f=0}$ $2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F_a=1} \rightarrow 1s_{1/2}^{F_f=1}$	<i>ω</i> ₀ , кГц [187] 616521519991.8	$\delta_{\mathrm{NR}}^{(1,2)},$ кГц -15.1782 30.3563	ω _{res} ^{max (1,2)} , кГц 616521519976.6 616521520022.2
Переход, $\nu_{3/2}$ $2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F_a=1} \rightarrow 1s_{1/2}^{F_f=0}$ $2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F_a=1} \rightarrow 1s_{1/2}^{F_f=1}$ $2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F_a=1} \rightarrow 2s_{1/2}^{F_f=0}$	<i>ω</i> ₀ , кГц [187] 616521519991.8 616521519991.8	$\delta_{\mathrm{NR}}^{(1,2)},$ кГц -15.1782 30.3563 -15.1782	ω resкГц616521519976.6616521520022.2616521519976.6
Переход, $\nu_{3/2}$ $2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F_a=1} \rightarrow 1s_{1/2}^{F_f=0}$ $2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F_a=1} \rightarrow 1s_{1/2}^{F_f=1}$ $2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F_a=1} \rightarrow 2s_{1/2}^{F_f=0}$ $2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F_a=1} \rightarrow 2s_{1/2}^{F_f=1}$	ω ₀ , кГц [187] 616521519991.8 616521519991.8	$\delta_{\mathrm{NR}}^{(1,2)},$ кГц -15.1782 30.3563 -15.1782 30.3563	$ω_{res}^{max (1,2)}, \kappa \Gamma \mu$ 616521519976.6 616521520022.2 616521519976.6 616521520022.2
$\label{eq:response} \begin{array}{c} \hline \Pi \text{ереход, } \nu_{3/2} \\ \hline \hline 2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F_a=1} \rightarrow 1s_{1/2}^{F_f=0} \\ 2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F_a=1} \rightarrow 1s_{1/2}^{F_f=1} \\ \hline 2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F_a=1} \rightarrow 2s_{1/2}^{F_f=0} \\ 2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F_a=1} \rightarrow 2s_{1/2}^{F_f=1} \\ \hline 2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F_a=1} \rightarrow 3s_{1/2}^{F_f=0} \\ \hline \end{array}$	ω ₀ , кГц [187] 616521519991.8 616521519991.8 616521519991.8	$\delta_{\mathrm{NR}}^{(1,2)},$ кГц -15.1782 30.3563 -15.1782 30.3563 -15.1782	$ω_{res}^{max (1,2)}, κΓι$ μ 616521519976.6 616521520022.2 616521519976.6 616521520022.2 616521519976.6
$\label{eq:relation} \begin{array}{c} \hline \Pi \text{ереход, } \nu_{3/2} \\ \hline 2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F_a=1} \rightarrow 1s_{1/2}^{F_f=0} \\ 2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F_a=1} \rightarrow 1s_{1/2}^{F_f=1} \\ \hline 2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F_a=1} \rightarrow 2s_{1/2}^{F_f=0} \\ 2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F_a=1} \rightarrow 2s_{1/2}^{F_f=1} \\ \hline 2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F_a=1} \rightarrow 3s_{1/2}^{F_f=0} \\ 2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F_a=1} \rightarrow 3s_{1/2}^{F_f=1} \\ \hline 2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F_a=1} \rightarrow 3s_{1/2}^{F_f=1} \\ \hline \end{array}$	ω ₀ , кГц [187] 616521519991.8 616521519991.8 616521519991.8	$\delta_{\rm NR}^{(1,2)},$ кГц -15.1782 30.3563 -15.1782 30.3563 -15.1782 30.3563	$ω_{res}^{max (1,2)}, κΓ μ$ 616521519976.6 616521520022.2 616521519976.6 616521520022.2 616521519976.6 616521520022.2
$\label{eq:response} \begin{array}{c} \hline \Pi \text{ереход, } \nu_{3/2} \\ \hline 2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F_a=1} \rightarrow 1s_{1/2}^{F_f=0} \\ 2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F_a=1} \rightarrow 1s_{1/2}^{F_f=1} \\ \hline 2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F_a=1} \rightarrow 2s_{1/2}^{F_f=0} \\ 2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F_a=1} \rightarrow 2s_{1/2}^{F_f=1} \\ \hline 2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F_a=1} \rightarrow 3s_{1/2}^{F_f=1} \\ \hline 2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F_a=1} \rightarrow 3s_{1/2}^{F_f=1} \\ \hline 2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F_a=1} \rightarrow 3d_{3/2}^{F_f=1} \\ \hline 2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F_a=1} \rightarrow 3d_{3/2}^{F_f=1} \end{array}$	ω ₀ , кГц [187] 616521519991.8 616521519991.8 616521519991.8 616521519991.8	$\delta_{\rm NR}^{(1,2)},$ кГц -15.1782 30.3563 -15.1782 30.3563 -15.1782 30.3563 30.3563	$ω_{res}^{max (1,2)}, κΓ μ$ 616521519976.6 616521520022.2 616521519976.6 616521520022.2 616521520022.2 616521520022.2 616521520022.2

изводимый результат для строго определенных условий (фиксированное конечное состояние). Тогда, три частоты перехода в (5.15) отличаются друг от друга более чем на 50 кГц. Это в 15 раз превышает точность измерений, указанную в [32] (3 кГц), и показывает область применимости резонансного приближения. Более того, отличие частот в (5.15) демонстрирует неоднозначность определения частоты перехода из наблюдаемого профиля линии из-за существования нерезонансных вкладов в сечении рассеяния. Стоит отметить, что аналогичный вывод будет следовать и для частоты, соответсвующей полувысоте наблюдаемого контура (full width half maximum), см. [43]. Далее будет показано, что данное обстоятельство относится только к вопросу об определении.

Однако, интерес представляет ω_0 , поскольку именно это значение должно соответствовать теоретическому значению (разнице собственных значений гамильтониана). Именно ω_0 должно быть использовано для, например, определения фундаментальных физических констант. Все три числа в (5.15) можно свести к ω_0 простым вычитанием $\delta_{\rm NR}$. Это возможно из-за того, что поправка не зависит от каких-либо углов, что, в свою очередь, демонстрирует преимущество регистрации излучения, соответствующего переходу в конкретное конечное состояние.

Если в процессе измерения частоты регистрируется излучение без фиксации его частоты, то следует произвести суммирование по всем конечным состояниям. Это суммирование выглядит следующим образом:

$$\delta_{\rm NR}^{(1,2)} = \frac{\sum_{n_f l_f j_f F_f} f_{\rm nr}^{(1,2)}}{\sum_{n_f l_f j_f F_f} f_{\rm res}^{(1,2)}} \frac{\Gamma_a^2}{4\Delta}.$$
(5.16)

Теперь НР поправка зависит от типа эксперимента и от угла между векторами n_{k_1} , n_{k_2} в эксперименте первого типа или между векторами e_1 , n_{k_2} в эксперименте второго типа. Для набора квантовых чисел $n_i l_i = 2s$, $j_i = 1/2$, $F_i = 0$, $n_a l_a = 4p$, $j_a = 1/2$, $F_a = 1$, $j_{a'} = 3/2$, $F_{a'} = 1$, можно найти $\delta_{\rm NR}^{(2)} \approx -0.23983(1 + 3\cos 2\vartheta)\Gamma_a^2/\Delta$. Для краткости здесь выписан результат только для эксперимента второго типа, подробности изложены в [52], а численный фактор возникает из радиальных интегралов. Решая уравнение $1+3\cos 2\vartheta = 0$ для переменной ϑ , легко найти, что поправка обращается в нуль при углах $\vartheta = (1/2)(\pm \arccos(1/3) + 2\pi n)$ (с произвольным целым n). Этот результат можно получить для рассеяния фотонов, соответствующих дипольному переходу с произвольным набором квантовых чисел начальных и промежуточных состояний. Отличие будет в числовом множитиле. Последнее означает, что нерезонансные поправки следует рассматривать отдельно для каждого конкретного перехода. Поправки $\delta_{\rm NR}^{(1,2)}$ в выражении (5.16) в зависимости от угла ϑ представлены на Рис. 5.1 для перехода $2s_{1/2}^{F_i=0} \to 4p_{1/2}^{F_a=1}$.



Рис. 5.1. НР поправка к частоте перехода $2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{1/2}^{F_a=1}$ как функция угла между векторами $\boldsymbol{n}_{k_1}, \boldsymbol{n}_{k_2}$ для эксперимента типа 1 (сплошная линия) и в зависимости от угла между векторами $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{n}_{k_2}$ в эксперименте типа 2 (пунктирная линия) согласно выражению (5.16).

Согласно вышесказанному, НР поправка равна нулю для определенных ("магических") углов $heta_1 = 54.7^\circ$ и $heta_2 = 125.3^\circ$, которые одинаковы для обоих типов эксперимента. О возможном использовании "магических углов" для определения частот переходов в атомах указывалось в [51, 187]. В [51] было отмечено, что метод извлечения значения частоты перехода из экспериментальных данных, используемый в [32], фактически эквивалентен использованию "магических углов". В частности, для построения фитирующего контура в [32] (см. также [51]) использовалась амплитуда (5.11), первое слагаемое в которой приводит к симметричной части профиля. Несимметричная часть профиля была получена в линейном приближении, см. [43], вынося общим множителем резонансное слагаемое в амплитуде (5.11) и раскладывая дополнительное слагаемое (нерезонансное) в ряд по параметру Δ . Затем, бралась свертка полученного таким образом профиля (профиль Фано) с гауссовым контуром (профиль Фано-Фойта) [188]. С учетом этого, "теоретический" профиль гораздо более аккуратно фитировал наблюдаемый профиль, позволив определить параметры асимметрии. В свою очередь, возникающие параметры асимметрии равны нулю для "магического угла" и задают "центр линии", который и был определен как частота перехода в [32].

Вычисления частот атомных переходов с использованием "магических углов" рассматривалась в [49], которые совпадают с приведенными выше для аналогичных переходов. Значение частоты перехода $2s_{1/2}^{F_i=0} - 4p_{1/2}^{F_a=1}$ (5.16) для "магических углов" и теоретическими значениями ω_0 , Γ_a и Δ равно

$$ω_{\rm res}^{\rm max\,(1,2)} = 616520152558.5 \, \kappa \Gamma \mu.$$
(5.17)

Аналогично для частоты перехода $2s_{1/2}^{F_i=0} - 4p_{3/2}^{F_a=1}$ можно найти

$$\omega_{\rm res}^{\max(1,2)} = 616521519991.8 \ \text{к}\Gamma\text{ц}. \tag{5.18}$$

5.4. Связь между определениями частоты перехода

Согласно теории, представленной в предыдущем разделе, частоту перехода можно определить с помощью различных экспериментов. В одном из них предлагается регистрировать излучение, связанное с фиксированным конечным сверхтонким состоянием. Очевидно, предпочтительнее использовать какой-либо подуровень основного состояния, поскольку его сверхтонкое расщепление экспериментально разрешимо [137]. Преимуществом в этом случае является независимая от угла нерезонансная поправка, которую можно просто вычесть из определяемого результата для наиболее вероятной частоты перехода. Однако, в эксперименте [32] использовалась другая схема: фиксировалось всё излучение. Следовательно, результирующая асимметрия профиля линии становится зависимой от угла (в эксперименте [32] это соответствует углу между вектором поляризации падающего фотона и вектором направления испускаемого фотона). Поскольку этот угол не фиксирован, требуется иная трактовка экспериментальных данных. Другими словами, нерезонансную поправку, рассчитанную при фиксированном угле, нельзя вычесть из экспериментально определенной частоты перехода.

Чтобы избежать проблем, связанных с асимметричным профилем ли-

нии, в [32] наблюдаемый профиль был фитирован профилем Фано-Фойта. В результате такой обработки "центр линии" симметричной части профиля линии был определен как частота перехода. Наконец, значения, определенные в [32] для $\nu_{1/2} = 616\,520\,152\,555.1(3.0)$ кГц (цифры в скобках обозначают установленную экспериментальную погрешность) и $\nu_{3/2} = 616\,521\,519\,990.8(3.0)$, использовались для расчета средневзвешенного значения сверхтонкого центроида ν_{2s-4p} с поправкой на сверхтонкий сдвиг (обозначенный здесь как $\Delta_{\rm HFS}$).

$$\nu_{2s-4p} = \frac{1}{3}\nu_{1/2} + \frac{2}{3}\nu_{3/2} - \Delta_{\text{HFS}} = 616\,520\,931\,626.8 \text{ к}\Gamma\text{u}, \qquad (5.19)$$
$$\Delta_{\text{HFS}} = 132\,552.092(75) \text{ к}\Gamma\text{u}.$$

Значения $\nu_{1/2}$, $\nu_{3/2}$ согласуются со значениями (5.17), (5.18) в пределах экспериментальной погрешности.

Таким образом, доступны два метода определения частоты перехода. Первый метод соответствует рассмотренной выше теории и предполагает идентификацию пика профиля линии, определяя частоту перехода как наиболее вероятную, с последующей оценкой нерезонансных поправок. Второй метод основан на процедуре "симметризации", описанной в [32,51]. На первый взгляд эти определения могут показаться совершенно разными и приводить к отклонениям значений частоты перехода порядка десятков кГц (до вычета нерезонансных поправок, как показано в (5.15)). Более того, прямое сравнение экспериментальных результатов для $\nu_{1/2}$ и $\nu_{3/2}$ и значений (5.17) и (5.18) показывает существенное расхождение. В настоящее время это несоответствие может иметь решающую роль в определении постоянной Ридберга и зарядового радиуса протона.

Чтобы продемонстрировать отсутствие противоречия в этих определениях, можно воспользоваться процедурой усреднения для ω_{max} , соответствующих фиксированному конечному сверхтонкому подуровню, см. Таблицу 5.2. Подчеркивая их угловую независимость, предполагается, что измерения можно проводить для каждого конкретного перехода. Определенные значения затем можно усреднить различными способами. Например,

$$\omega_{\rm av} = \sum_{F_f, j_f} \frac{2F_f + 1}{(2j_f + 1)(2I + 1)} \omega_{\rm max},\tag{5.20}$$

где *I* – спин ядра.

С таким же успехом можно использовать и другую схему. При оценке нерезонансных поправок можно провести дополнительное усреднение по проекциям полного момента резонансного состояния j_a . Тогда, согласно выражению (5.8),

$$\omega_{\rm av} = \omega_0 + \frac{1}{2j_a + 1} \sum_{F_f, j_f} \frac{2F_f + 1}{(2j_f + 1)(2I + 1)} \delta_{\rm NR}.$$
 (5.21)

Усреднение (5.21) связано с тем, что фактически в эксперименте наблюдается излучение, для которого резонансное состояние является "псевдоначальным".

Возвращаясь снова к случаю фиксированного конечного состояния $1s_{1/2}^{F_f=0}$, усредненный по (5.20) центроид можно найти согласно выражению (5.19): $\nu_{2s-4p} = 616\,520\,931\,638.7$ кГц с тем же результатом для состояния $1s_{1/2}^{F_f=1}$ (значения $\delta_{\rm NR}$ см. в Таблице 5.1). Дополнительное усреднение по проекциям j_r для нерезонансной поправки приводит к $\nu_{2s-4p}^{(F_f=0)} = 616\,520\,931\,630.5$ кГц и $\nu_{2s-4p}^{(F_f=1)} = 616\,520\,931\,628.6$ кГц, и, следовательно, $\nu_{2s-4p} = 616\,520\,931\,629.1$ кГц. Наконец, усредненный по (5.21) центр тяжести для частот (5.17), (5.18) можно найти равным 616\,520\,931\,628.6 кГц. Все эти значения в пределах погрешности согласуются со занчением (5.19), полученным экспериментально.

Таким образом, существует набор вариантов определения частоты перехода. Первый заключается в определении максимума наблюдаемого профиля и последующем вычитании из полученного значения нерезонансного сдвига. Однако ввиду возможных угловых корреляций, обусловленных эффектом интерференции, из всего наблюдаемого излучения стоит выбрать то, которое соответствует конкретному сверхтонкому подуровню конечного состояния. Этого можно добиться, регистрируя фотоны только определенной частоты. В этом случае нерезонансный сдвиг является константой и может быть определен теоретически. Другой вариант - усреднение измеренных значений. Наконец, можно применить процедуру "симметризации", описанную в [32,43]. Усреднение экспериментально определенных частот перехода предпочтительнее, поскольку вычитание всегда менее точно. Все они имеют свои трудности, связанные с точностью описанного процесса определения частоты перехода. В свою очередь, эти проблемы вызваны выходом за рамки резонансного приближения, когда необходимо учитывать асимметрию наблюдаемого профиля спектральной линии. Однако главный вывод, следующий из приведенного выше обсуждения, заключается в согласованности определений через "максимум" или "центр линии". Отклонения соответствующих величин (хотя и совпадающих с высокой точностью) как раз и связаны с выходом за пределы резонансного приближения.

Другое, не менее важное, обстоятельство, указывающее на преимущество парциального канала распада (а именно, регистрация излучения, соответствующего распаду в определенный сверхтонкий подуровень основного состояния) обсуждается в следующем разделе.

5.5. Участие процесса излучения в определении частоты перехода поглощения

Фундаментальные принципы, определяющие детальное описание наблюдаемого профиля линии, требуют аккуратного рассмотрения всех процессов, связанных с измерениями. Например, оценка нерезонансных вкладов в сечении рассеяния фотонов показывает явное различие для случаев, когда все улетающие фотоны регистрируются или когда для определения частоты перехода используется парциальный процесс рассеяния [52]. КЭДформулировка самой теории профиля линии и использование резонансного приближения для сечения рассеяния фотонов требуют рассмотрения процесса от стабильного состояния до стабильного. В достаточно хорошем приближении допустимо также использование метастабильного состояния (время жизни метастабильного состояния должно значительно превышать время измерения). В свою очередь определение частоты 2s - 4p поглощения не ограничивается процессом рассеяния $2s \rightarrow 4p \rightarrow 1s(2s)$, но предполагает и переходы в 3s и 3d состояния, которые затем распадаются посредством двухфотонной эмиссии (включая каскадное и "чистое" излучение) в стабильное состояние 1s (метастабильное состояние 2s) [32]. Дискуссия о неоднозначности отделения каскадов от "чистого" двухфотонного излучения [82] будет представлена в одном из следующих разделов диссертации. Здесь данным обстоятельством пренебрегается, полагая что интерференция между этими двумя типами вероятностей мала. Соответственно, определение частоты 2s - 4p перехода можно корректно описать только с учетом следующих каскадных процессов: $2s + \gamma \rightarrow 4p \rightarrow 3s(3d) + \gamma \rightarrow 2p(3p) + \gamma \rightarrow$ $1s(2s) + \gamma$. Далее рассматривается случай каскадного излучения только в состояние 1s, но с учетом сверхтонкой структуры уровней.

Сразу можно отметить, что каскадное излучение также подвержено эффекту квантовой интерференции, если рассматривать интерференцию для соответствующих сверхтонких подуровней тонкой структуры (аналогично $4p_{1/2}^{F=1}$ и $4p_{3/2}^{F=1}$). В рамках приведенных приближений (см. также [49, 50]) детальное описание каскадного переход
а $2s + \gamma \rightarrow 4p \rightarrow 3s(3d) + \gamma \rightarrow$ $2p(3p) + \gamma \rightarrow 1s(2s) + \gamma$ должно включать состояния $4p_{1/2}^{F=1}$, $4p_{3/2}^{F=1}$ как резонансные (обозначаются ниже как состояние r), состояния $3s_{1/2}$ и $3d_{3/2}$, $3d_{5/2}$ как первое каскадное состояние (обозначенное ниже как состояние a), а затем уровни $2p_{1/2}, 2p_{3/2}, 3p_{1/2}, 3p_{3/2}$ (обозначенные ниже как состояние b). В дальнейших расчетах проводится суммирование по полному атомному моменту F для состояний а и b. Оставляя в сечении резонансный член для перехода в $4p_{1/2}^{F=1}$ или $4p_{3/2}^{F=1}$ состояние, подробнее см. [189], влияние квантовой интерференции в каскаде можно описать, рассматривая в амплитуде помимо резонансных (каскадных) состояний еще и ближайшие по энергии состояния. Амплитуда будет теперь содержать три знаменателя энергии, каждый из которых можно привести к знаменателю резонанса поглощения, используя закон сохранения энергии. Тогда ЭКИ за счет каскадного излучения возникает для состояний *a* и *b* точно так же, как и для состояний r с соответствующими ширинами и энергетическими интервалами между резонансными и соседними нерезонансными состояниями.

Рассматривая сначала каскад через состояние 3*s*, можно найти, что частота поглощения, определенная из условия экстремума, равна (см. [189])

$$\omega_{\max} = \omega_0 + \delta\omega_r + \delta\omega_a + \delta\omega_b, \qquad (5.22)$$

где ω_0 представляет собой $\nu_{1/2}$ или $\nu_{3/2}$, согласно обозначениям в [32], а $\delta\omega_i$ определяется выражением:

$$\delta\omega_i = \frac{f_{\rm nr}^{(c)}}{f_{\rm res}^{(c)}} \frac{\Gamma_r^2}{4\Delta_i} \Upsilon, \qquad (5.23)$$
$$\Upsilon = \frac{(\Gamma_r + \Gamma_a)^2 (\Gamma_a + \Gamma_b)^2}{(\Gamma_r + \Gamma_a)^2 (\Gamma_a + \Gamma_b)^2 + (\Gamma_r + \Gamma_a)^2 \Gamma_r^2 + (\Gamma_a + \Gamma_b)^2 \Gamma_r^2}.$$

Здесь *i* - одно из состояний, обозначенных *r*, *a*, *b*. Величина $f_{\rm res}^{(c)}$ определяется через числитель резонансной амплитуды. В случае каскада, проходящего через состояние $3s_{1/2}$, эта амплитуда соответствует $2s_{1/2}^{F=0} + \gamma \rightarrow 4p_{1/2(3/2)}^{F=1} \rightarrow 3s_{1/2} + \gamma \rightarrow 2p_{1/2} + \gamma \rightarrow 1s_{1/2} + \gamma$ переходу и $f_{\rm nr}^{(c)}$ соответствует одному из нерезонансных вкладов $2s_{1/2} + \gamma \rightarrow 4p_{1/2(3/2)}^{F=1} \rightarrow a + \gamma \rightarrow b + \gamma \rightarrow 1s_{1/2} + \gamma$, Δ_i представляет собой расщепление энергии между состояниями *r*, *a* или *b* (как, например, $\Delta_r \equiv E_{4p_{3/2}^{F=1}} - E_{4p_{1/2}^{F=1}}$), а поправка $\delta\omega_i$ выписана в ведущем порядке.

Предполагая, что все исходящие фотоны направлены в один и тот же детектор (т.е. векторы направления фотонов, $\boldsymbol{\nu}$, сонаправлены, $\boldsymbol{\nu}_{4p-3s} \parallel \boldsymbol{\nu}_{3s-2p(3p)} \parallel \boldsymbol{\nu}_{2p-1s}$), НР поправки равны

$$\delta\omega_r = -\frac{1}{2} \left(1 - 3\cos 2\theta\right) \frac{\Gamma_r^2}{4\Delta_r} \Upsilon, \qquad (5.24)$$
$$\delta\omega_a = 0,$$
$$\delta\omega_b = 2 \frac{\Gamma_r^2}{4\Delta_b} \Upsilon.$$

Здесь и далее θ обозначает угол между вектором поляризации падающего фотона и вектором направления испускаемых фотонов (это соответствует условиям эксперимента [32]), а численные множители возникают из соотношения радиальных частей амплитуд. Можно отметить, что при фиксированном F_f результаты [52] восстанавливаются. Угловая зависимость в выражении (5.24) обусловлена суммированием по полным атомным моментам в $f_{\text{res}}^{(c)}$ и $f_{\text{nr}}^{(c)}$.

Таким образом, получено, что поправка $\delta\omega_a$ равна нулю. Это справедливо только для случая, когда фотоны регистрируются в одном направлении, в противном случае поправка отлична от нуля. Также из (5.24) следует, что $\delta\omega_b$ не зависит от корреляционного угла, θ . Используя значения $\Gamma_r = 1.2941 \times 10^7 \ \Gamma$ ц, $\Delta_r = 1.367433.3 \ \kappa \Gamma$ ц, $\Gamma_{3d} = 1.0295 \times 10^7 \ \Gamma$ ц, $\Gamma_{3p} = 3.0208 \times 10^6 \ \Gamma$ ц, $\Gamma_{3s} = 1.0054 \times 10^6 \ \Gamma$ ц, $\Gamma_{2p} = 9.97624 \times 10^7 \ \Gamma$ ц, $\Delta_{3p} = 3.241327.3 \ \kappa \Gamma$ ц, $\Delta_{2p} = 10.939469.7 \ \kappa \Gamma$ ц [187], сдвиги частот приведены в Таблице 5.3 для различных углов θ .

Как следует из (5.24), поправка $\delta\omega_r$ равна нулю при углах $\theta = \pm 1/2 \arccos(1/3) + \pi k$ (k - целое число), вместо магического угла $\theta_m = \arccos(1/\sqrt{3})$. Решая уравнение для суммарной поправки $\delta\omega_{\Sigma}(\theta_0) = \delta\omega_r + \delta\omega_{2p} = 0$, можно найти угол, при котором она обращается в нуль (если таковой существует). Согласно [32], доля каскадного процесса составляет около 4% от всех фотонов, регистрируемых детектором. Соответствующее значение можно найти как отношение вероятности парциального перехода к ширине уровня: $W_{4p-3s}/\Gamma_{4p} \approx 0.0377$, $W_{4p-3d}/\Gamma_{4p} \approx 0.0043$, которые использовались для вычисления суммарного вклада $\delta\omega_{\Sigma}$.

Повторяя расчеты для каскадного перехода через состояние $3d_{3/2}$ для частоты $\nu_{1/2}$, можно получить

$$\delta\omega_r = \frac{1}{20} \left(1 - 3\cos 2\theta\right) \frac{\Gamma_r^2}{4\Delta_r} \Upsilon, \qquad (5.25)$$
$$\delta\omega_a = 0,$$
$$\delta\omega_b = \frac{1}{5} \frac{\Gamma_r^2}{4\Delta_b} \Upsilon.$$

Здесь резонансная амплитуда соответствует $2s_{1/2}^{F=0} + \gamma \rightarrow 4p_{1/2}^{F=1} \rightarrow 3d_{3/2} + \gamma \rightarrow 2p_{1/2} + \gamma \rightarrow 1s_{1/2} + \gamma$ и нерезонансные амплитуды связаны с i)

 $^{^{1}}$ Распада в состояние $3p_{3/2}$ нет.

Таблица 5.3. Численные значения нерезонансных сдвигов и общего вклада $\delta\omega_{\Sigma}$, умноженные на коэффициент доли каскада $W_{4p-n_al_a}/\Gamma_{4p}$. Приведено значение угла, при котором достигаются максимальное (θ_{\max}), минимальное (θ_{\min}) значения, а также значения НР поправок при "магическом угле" (θ_{m}). В выделенной строке указаны значения угла, при котором суммарный вклад равен нулю (θ_{0}), если он существует, доли каскада и рассматриваемый процесс. Все значения указаны в кГц.

Угол	$\delta\omega_r + \delta\omega_{3p} \; (\kappa\Gamma \mathfrak{l})$	$\delta\omega_r + \delta\omega_{2p}$ (кГц)	$\delta\omega_{\Sigma}$ (кГц)		
$2s_{1/2}^{F=0} \to 4p_{1/2}^{F=1} \to 3s_{1/2} \to 2p_{1/2} \to 1s_{1/2}; \ \theta_0 = \pm 0.403619;$					
$2s_{1/2}^{F=}$	$0 \to 4p_{1/2}^{F=1} \to 3s_{1/2} \to 3s_{1/2}$	$Bp_{1/2} \to 1s_{1/2}; W_{4p-3s}/\Gamma$	$T_{4p} \approx 0.0377$		
$\overline{\theta_{\min}} = 0$	-3.388	-17.342	-0.781		
$\theta_{\rm max} = \pi/2$	61.587	52.008	4.282		
$\theta_{ m m}$	39.942	28.898	2.595		
$2s_1^I$	$F^{=0}_{1/2} \to 4p^{F=1}_{1/2} \to 3d_{3/2} -$	$\rightarrow 2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}; \ \theta_0 = \pm$	0.403605;		
$2s_{1/2}^{F=}$	$0 \rightarrow 4p_{1/2}^{F=1} \rightarrow 3d_{3/2} \rightarrow 3d_{3/2}$	$Bp_{3/2} \to 1s_{1/2}; W_{4p-3s}/\Gamma$	$\Gamma_{4p} \approx 0.0043$		
$\overline{\theta_{\min}} = 0$	-0.339	-1.734	$-9. \times 10^{-3}$		
$\theta_{\rm max} = \pi/2$	6.164	5.203	4.9×10^{-2}		
$\theta_{ m m}$	3.997	2.890	3.0×10^{-2}		
$2s_{1/2}^{F=0} \to 4p_{1/2}^{F=1} \to 3s_{1/2} \to 2p_{3/2} \to 1s_{1/2}^{-1};$					
	$\theta_0 = \pm 0.637414; W_{4p-3d}/\Gamma_{4p} \approx 0.0377$				
$\theta_{\min} = 0$		-21.679	-0.817		
$\theta_{\rm max} = \pi/2$		43.343	1.634		
$\theta_{\rm m}$		21.675	0.817		
$2\overline{s_{1/2}^{F=0} \to 4p_{1/2}^{F=1} \to 3d_{3/2} \to 2p_{3/2} \to 1s_{1/2}};$					
$\underline{2s_{1/2}^{F=0} \to 4p_{1/2}^{F=1} \to 3d_{3/2} \to 3p_{3/2} \to 1s_{1/2}; W_{4p-3d}/\Gamma_{4p} \approx 0.0043}$					
$\theta_{\rm max} = 0$	-224.435	-74.460	-1.285		
$\theta_{\min} = \pi/2$	-218.192	-67.534	-1.229		
$ heta_{ m m}$	-220.274	-69.843	-1.247		

 $2s_{1/2}^{F=0} + \gamma \rightarrow 4p_{3/2}^{F=1} \rightarrow 3d_{3/2} + \gamma \rightarrow 2p_{1/2} + \gamma \rightarrow 1s_{1/2} + \gamma, \Delta_r \equiv E_{4p_{3/2}^{F=1}} - E_{4p_{1/2}^{F=1}}$ и ii) $2s_{1/2}^{F=0} + \gamma \rightarrow 4p_{1/2}^{F=1} \rightarrow 3d_{3/2} + \gamma \rightarrow 2p_{3/2} + \gamma \rightarrow 1s_{1/2} + \gamma, \Delta_b \equiv E_{2p_{3/2}} - E_{2p_{1/2}}, E_{3p_{3/2}} - E_{3p_{1/2}}$ каналами распада. Численные значения, умноженные на коэффициент 0.0043 в соответствии с вкладом каскада в изме-

рения частоты перехода в [32], собраны во втором сегменте Таблицы 5.3. Когда резонансный канал рассматривается как проходящий через состояние $2p_{3/2}(3p_{3/2})$, численные результаты представлены в третьем и четвертом сегментах Таблицы 5.3 (соответствующие графики представлены в приложении работы [189]).

Из приведенных в таблице значений можно сделать вывод, что вклад ЭКИ за счет каскада в целом значителен, но подавляется относительной долей каскадного процесса в общем излучении. Тем не менее, интерферирующие звенья в каскадном процессе влияют на профиль линии поглощения на уровне нескольких килогерц. Эта асимметрия может быть выражена через нерезонансную поправку к частоте перехода, определяемой здесь через максимум профиля линии (как наиболее вероятное значение). Эти поправки не исчезают под магическим углом, см. Таблицу 5.3. Практически это означает, что процедура симметризации, примененная в [32], снизила вклад каскадного ЭКИ до значения, оцененного здесь для магического угла, поскольку был использован соответствующий параметр асимметрии. Хотя значение δω_Σ находится в пределах погрешностей эксперимента, для "центрального" значения можно ожидать сдвиг частоты на уровне кГц с той же неопределенностью.

Выше в качестве демонстрации был представлен анализ измерения частоты перехода $\nu_{1/2}$. Аналогично можно провести расчеты для частоты перехода $\nu_{3/2}$. Опуская для краткости детали расчетов, численные результаты представлены в Таблице 5.4.

В дополнение к результатам выше, необходимо указать на важность ЭКИ, возникающем в каскадном излучении, для измерения частот двухфотонных переходов: $n_i s + 2\gamma \rightarrow n_a s/n_a d \rightarrow 1s$. Недавно соответствующие вычисления были выполнены и опубликованы в работе [190].

Однако главный вывод этого раздела, который следует из анализа каскадного ЭКИ, заключается в том, что профиль Фано, полученный с помощью каскадного процесса, должен быть учтен в процедуре симметриза-

 $^{^{2}}$ Распада в состояние $3p_{3/2}$ нет.

Таблица 5.4. Численные значения нерезонансных сдвигов для заданных каскадных переходов, соответствующих частоте $\nu_{3/2} = E_{4p_{3/2}^{F=1}} - E_{2s_{1/2}^{F=0}}$ и суммарный вклад $\delta\omega_{\Sigma}$, умноженный на коэффициент W_{4p-nl}/Γ_{4p} . Обозначения такие же, как в Таблице 5.3. Все значения указаны в кГц.

	/ /	V				
Угол	$\delta\omega_r + \omega_{3p}$ (кГц)	$\delta\omega_r + \omega_{2p}$ (кГц)	ω_Σ (кГц)			
	$2s_{1/2}^{F=0} \to 4p_{3/2}^{F=1}$	$\rightarrow 3s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$	31/2;			
$2s_{1/2}^{F=}$	$p_{2}^{0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F=1} \rightarrow 3s_{1/2} \rightarrow 3s_{1/2}$	$3p_{1/2} \to 1s_{1/2}; W_{4p-3s}$	$_{s}/\Gamma_{4p} pprox 0.0377$			
$\theta_{\rm max} = 0$	39.954	28.902	2.596			
$\theta_{\min} = \pi/2$	7.446	-5.780	$6.3 imes 10^{-2}$			
$\theta_{ m m}$	11.058	-1.927	0.344			
25	$2s_{1/2}^{F=0} \to 4p_{3/2}^{F=1} \to 3s_{1/2} \to 2p_{3/2} \to 1s_{1/2}^{2}; \ \theta_0 = 0.528655;$					
$\theta_{\rm max} = 0$		21.679	0.817			
$\theta_{\min} = \pi/2$		-13.006	-0.490			
$\theta_{ m m}$		-9.152	-0.345			
$2s_{1/2}^{F=0} \to 4p_{3/2}^{F=1} \to 3d_{3/2} \to 2p_{1/2} \to 1s_{1/2}; \ \theta_0 = 0.651478;$						
$2s_{1/2}^{F=}$	$p_{3/2}^{0} \rightarrow 4p_{3/2}^{F=1} \rightarrow 3d_{3/2} \rightarrow 0$	$3p_{1/2} \to 1s_{1/2}; W_{4p-3s}$	$_{s}/\Gamma_{4p} pprox 0.0043$			
$\theta_{\rm max} = 0$	9.571	8.836	7.9×10^{-2}			
$\theta_{\min} = \pi/2$	-106.438	-114.926	-0.952			
$ heta_{ m m}$	-16.235	-18.690	-0.150			
$2s_{1/2}^{F=0} \to 4p_{3/2}^{F=1} \to 3d_{3/2} \to 2p_{3/2} \to 1s_{1/2};$						
$2s_{1/2}^{F=0} \to 4p_{3/2}^{F=1} \to 3d_{3/2} \to 3p_{3/2} \to 1s_{1/2}; W_{4p-3s}/\Gamma_{4p} \approx 0.0043$						
$\theta_{\rm max} = 0$	-37.927	-6.192	-0.190			
$\theta_{\min} = \pi/2$	-153.437	-129.889	-1.218			
$ heta_{ m m}$	-63.665	-33.709	-0.419			

ции [32]. Например, чтобы наилучшим образом соответствовать экспериментальным данным, следует использовать несколько параметров, связанных с асимметрией профиля линии из-за различных процессов. Параметры асимметрии не обязательно одинаково зависят от угла и, в принципе, могут рассматриваться как независимые друг от друга. Фактически, можно констатировать, что современные спектроскопические эксперименты представляют собой рубеж, ведущий к следующему поколению экспериментов, в которых проблема резонансной аппроксимации будет играть решающую роль.

Как следствие, рассмотрение каскадного процесса, влияющего на определение частоты абсорбционного перехода, показывает неразрывность процессов поглощения и излучения при описании профиля линии за пределами резонансного приближения. Можно ожидать, что "центральное" значение будет сдвинуто на уровне кГц. Обобщая результаты этого исследования, можно видеть, что процесс рассеяния фотонов, использованный в эксперименте [32], достаточно сложен и должен включать с необходимостью анализ наблюдаемой асимметрии профиля линии. Эта асимметрия вызвана не только эффектом квантовой интерференции при резонансном поглощении, но и каскадными процессами излучения. Если предположить необходимость повышения точности эксперимента (например, для прецизионного определения физических констант), то анализ каскадных процессов будет все более востребован для экспериментов типа [32] (когда детектируется все излучение). Однако, для измеренной линии 2s - 4p в эксперименте [32] можно выделить случай, на который не влияет ЭКИ в каскаде. Основной вклад в излучение вносит эмиссионная линия 4p-1s, в которой отсутствует каскад. Следовательно, этот канал рассеяния является предпочтительным для определения частоты перехода. Соответствующий эксперимент можно провести, зарегистрировав испускаемые фотоны с определенной энергией, равной 4*p* – 1*s*. Такие эксперименты должны быть более точными.

5.6. Приложение к спектроскопии мюонного водорода

Следуя анализу, приведенному в разделах 5.2 и 5.3, здесь рассматривается ЭКИ в рамках спектроскопии однофотонной флуоресценции мюонного водорода на примере переходов $2s_{1/2}^{F_i=0,1} \rightarrow 2p_{j_a}^{F_a}$. В данном конкретном случае нерезонансные поправки к частотам переходов возникают из-за интерференции между $2p_{j_r}^{F_r}$ подуровнями (состояниями тонкой и сверхтонкой структуры), для которых возможны дипольные (согласно правилам отбора) переходы $2s_{1/2}^{F_i=0,1} \rightarrow 2p_{j_a}^{F_a}$ и $2s_{1/2}^{F_i=0,1} \rightarrow 2p_{j_{a'}}^{F_{a'}}$, $j_{a'}F_{a'} \neq j_aF_a$. К описываемому здесь физическому процессу относится однофотонное рассеяние, см. раздел 2.1. Сверхтонкие состояния мюонного водорода разделены несколькими сотнями ГГц [191–193] и имеют ширину линий в несколько десятков ГГц [194]. В частности, естественная ширины 2p тонкого и сверхтонкого подуровней примерно эквивалентны: $\Gamma_{2p_{3/2}^{F=1}} \approx \Gamma_{2p_{1/2}^{F=2}} \approx \Gamma_{2p_{1/2}^{F=0}} =$ 116.49×10⁹ с⁻¹ или 18.54 ГГц. Использованные энергии атомных состояний мюонного водорода перечислены в Таблице 5.5.

Состояние	мэВ	Гц
$1s_{1/2}^{F=0}$	-2047.75	-4.95144×10^{14}
$1s_{1/2}^{\dot{F}=1}$	-1865.3	-4.51028×10^{14}
$2s_{1/2}^{F=0}$	-244.37	-5.90804×10^{13}
$2s_{1/2}^{F=1}$	-221.532	$-5.35662 imes 10^{13}$
$2p_{1/2}^{F=0}$	-30.9524	-7.48426×10^{12}
$2p_{1/2}^{F=1}$	-23.3505	-5.64613×10^{12}
$2p_{3/2}^{F=1}$	-18.7182	-4.52604×10^{12}
$2p_{3/2}^{F=2}$	-15.6775	-3.7908×10^{12}
/		

Таблица 5.5. Энергии атомных состояний мюонного водорода в мэВ (10⁻³ эВ) и Гц. Все значения заимствованы из [194].

Как и в случае рассмотренном в разделе 5.2, описание однофотонного рассеяния на мюонном водороде связано с геометрией эксперимента, когда вектор поляризации \boldsymbol{e}_1 налетающего фотона фиксирован. Тогда HP поправка может оказаться зависящей от угла θ между вектором \boldsymbol{e}_1 и направлением распространения испущенного фотона \boldsymbol{n}_{k_2} . В Таблице 5.6 собраны результаты для HP поправки к частоте перехода $2s_{1/2}^{F_i=0,1} \rightarrow 2p_{j_a}^{F_a}$ для различных конечных состояний и углов $\theta = 0, \pi/2$.

Таким образом, для мюонного водорода эффект квантовой интерференции играет незначительную роль (находится на уровне экспериментальной погрешности [30, 31]) и не может быть причиной так называемой "загадки радиуса протона" [29], см. также [50]. Тем не менее, эта систематика требует тщательной оценки и количественной оценки, поскольку результат близок к КЭД поправкам шестого порядка [195].

Таблица 5.6. Парциальные вклады $\delta_{NR}(i \to a[a'])$ в полную поправку для синглетной ($F_i = 0$) и триплетной ($F_i = 1$) линий $i \to a$, возникающих вследствие интерференции с переходом $i \to a'$ в мюонном атоме водорода. Угол между вектором поляризации падающего фотона и вектором распространения уходящего фотона обозначен θ , что соответствует эксперименту второго типа согласно разделу 5.2, энергетическое расщепление определено как $\Delta \equiv E_{n_a l_a j_{a'} F_{a'}} - E_{n_a l_a j_a F_a}$. Результаты представлены для двух разных случаев: 1) когда конечные состояния предполагаются фиксированными; 2) производится суммирование по всем разрешенным конечным состояниям. Случаи, не зависящие от θ , приводятся без указания угла.

i	a	a'	f	Δ , Гц	$\delta_{\mathrm{NR}}(i \to a[a']), \ \Gamma$ ц	$\delta_{\mathrm{NR}}(i ightarrow a[a']),$ мэВ
$2s_{1/2}^{F_i=0}$	$2p_{3/2}^{F_a=1}$	$2p_{1/2}^{F_{a'}=1}$	$1s_{1/2}^{F_f=0}$	-1.12009×10^{12}	-3.71×10^7	-1.53×10^{-4}
_	_	_	$1s_{1/2}^{\dot{F}_f=1}$		7.41×10^7	3.06×10^{-4}
_	_	_	$2s_{1/2}^{\dot{F}_f=0}$		-3.60×10^7	-1.49×10^{-4}
_	_	_	$2s_{1/2}^{\dot{F}_f=1}$		7.18×10^7	2.97×10^{-4}
-	-	_	$\sum_{\substack{n=1,2\\F_t=0,1}} n s_{1/2}^{F_f}, \ \theta = 0$		7.40×10^7	3.06×10^{-4}
—	—	—	$\sum_{\substack{n=1,2\\F_f=0,1}}^{n=1,2} n s_{1/2}^{F_f}, \ \theta = \frac{\pi}{2}$		-1.94×10^7	-8.02×10^{-5}
$2s_{1/2}^{F_i=1}$	$2p_{3/2}^{F_a=2}$	$2p_{3/2}^{F_{a'}=1}$	$1s_{1/2}^{F_f=1}, \ \theta = 0$	-7.35238×10^{11}	2.63×10^7	1.09×10^{-4}
_	_	_	$1s_{1/2}^{\dot{F}_f=1}, \ \theta = \frac{\pi}{2}$		-7.28×10^{6}	-3.01×10^{-5}
_	_	_	$2s_{1/2}^{\dot{F}_f=1}, \ \theta=0$		2.58×10^7	1.07×10^{-4}
_	_	_	$2s_{1/2}^{F_f=1}, \ \theta = \frac{\pi}{2}$		-7.13×10^7	-2.95×10^{-4}
_	_	_	$\sum_{n=1,2} n s_{1/2}^{F_f=1}, \ \theta = 0$		2.63×10^7	1.09×10^{-4}
—	—	—	$\sum_{n=1,2} n s_{1/2}^{F_f=1}, \ \theta = \frac{\pi}{2}$		-7.27×10^6	-3.01×10^{-5}
$2s_{1/2}^{F_i=1}$	$2p_{3/2}^{F_a=2}$	$2p_{1/2}^{F_{a'}=1}$	$1s_{1/2}^{F_f=1}, \ \theta = 0$	-1.85532×10^{12}	2.01×10^7	8.31×10^{-5}
_	_	_	$1s_{1/2}^{F_f=1}, \ \theta = \frac{\pi}{2}$		-5.55×10^6	-2.29×10^{-5}
—	—	—	$2s_{1/2}^{F_f=1}, \ \theta = 0$		1.91×10^7	$7.90 imes 10^{-5}$
—	—	—	$2s_{1/2}^{F_f=1}, \ \theta = \frac{\pi}{2}$		-5.28×10^6	2.18×10^{-5}
—	_	—	$\sum_{n=1,2} n s_{1/2}^{F_f=1}, \ \theta = 0$		2.00×10^7	8.27×10^{-5}
_	_	_	$\sum_{n=1,2} n s_{1/2}^{F_f=1}, \ \theta = \frac{\pi}{2}$		-5.54×10^6	2.29×10^{-5}
$2s_{1/2}^{F_i=1}$	$2p_{3/2}^{F_a=2}$	$2p_{1/2}^{F_{a'}=0}$	$1s_{1/2}^{F_f=1}, \ \theta = 0$	-3.69345×10^{12}	6.30×10^6	2.61×10^{-5}
_	_	_	$1s_{1/2}^{F_f=1}, \ \theta = \frac{\pi}{2}$		-1.74×10^6	-7.20×10^{-6}
_	_	_	$2s_{1/2}^{F_f=1}, \ \theta = 0$		5.68×10^6	2.35×10^{-5}
_	_	_	$2s_{1/2}^{F_f=1}, \ \theta = \frac{\pi}{2}$		-1.57×10^6	-6.49×10^{-6}
_	_	_	$\sum_{n=1,2} n s_{1/2}^{F_f=1}, \ \theta = 0$		6.28×10^6	2.60×10^{-5}
_	_	_	$\sum_{n=1,2} n s_{1/2}^{F_f=1}, \ \theta = \frac{\pi}{2}$		-1.73×10^6	-7.15×10^{-6}

5.7. Применение к спектроскопии изотопа ³Не

Интерес к двухэлектронному атому гелия-3, ³Не, как и к ⁴Не, обусловлен, прежде всего, оценкой среднеквадратичных зарядовых радиусов ядер и современным расхождением экспериментальных результатов и теории для частот переходов, см., например, [196–198]. В этом разделе представлен анализ НР эффектов применительно к эксперименту [196], где наблюдались переходы между различными сверхтонкими подуровнями атома.

Следуя работе [196], атомный уровень изотопа гелия обозначен следующим образом: $n^{\kappa}L_J^F$, где n — главное квантовое число, а $\kappa = 2S + 1$ — мультиплетность уровня (S - полный спиновый момент), L - полный орбитальный момент двух электронов, J - полный угловой момент электронов и F - полный угловой момент атома (F = J + I, где I - спин ядра (для гелия-3 равен 1/2). В случае перехода $2^3S - 2^3P$ квантовая интерференция возникает за счет переходов из состояния 2^3S в сверхтонкие компоненты тонкой структуры уровня 2^3P . Поскольку эксперимент [196] касается одноэлектронного возбуждения, то использование выражений (5.12), (5.13) и (5.14) вполне оправдано в оценке НР поправки для ³Не. Последняя возникает как

$$\delta_{\rm NR}(2^3 S_1^{F_i} - 2^3 P_{J_r}^{F_r}) = \sum_{J_{a'}F_{a'} \neq J_a F_a} \delta_{\rm NR}(2^3 S_1^{F_i} \to 2^3 P_{J_a}^{F_a}[2^3 P_{J_{a'}}^{F_{a'}}]), \qquad (5.26)$$

где $\delta_{\mathrm{NR}}(2^3 S_1^{F_i} \to 2^3 P_{J_a}^{F_a}[2^3 P_{J_{a'}}^{F_{a'}}])$ обозначает парциальные вклады от интерференции однофотонных переходов на подуровни с $J_a F_a$ и $J_{a'} F_{a'}$.

Для расчета соответствующий НР поправок были использованы энергии ³Не из [199] и естественные ширины уровней, взятые из *Базы данных атомных спектров NIST* ³, внесенные в Таблицу 5.7.

Ограничиваясь экспериментом второго типа, см. раздел 5.3, ниже учитываются все возможные переходы $2^3S - 2^3P$, а НР поправки оцениваются согласно выражениям (5.12), (5.13) и (5.14). Численные результаты представлены в виде графиков, изображенных на Рис. 5.2.

 $^{^{3}} https://\ www.nist.gov/pml/atomic-spectra-database$

Таблица 5.7. Энергии в МГц и натуральные ширины в Гц для некоторых состояний ³Не.

	Уровень	Энергия, МГц	Ширина уровня, Гц
	$2^{3}P_{0}^{F=1/2}$	5068832675.730	1625926.899
	$2^{3}P_{1}^{F=1/2}$	5068804582.860	1696009 170
	$\begin{array}{c c c c c c c c c c c c c c c c c c c $		1020002.179
			1695029 102
	$2^3 P_2^{F=5/2}$	5068798289.789	1020902.100
		θ, °	
ó, kHz			$ \begin{split} & \int_{NR} (2^3 S_1^{3/2} - 2^3 P_2^{5/2}), \text{kHz} \\ & \longrightarrow \\ & \int_{NR} (2^3 S_1^{3/2} - 2^3 P_1^{3/2}), \text{kHz} \\ & \longrightarrow \\ & \int_{NR} (2^3 S_1^{3/2} - 2^3 P_1^{1/2}), \text{kHz} \\ & \longrightarrow \\ & \int_{NR} (2^3 S_1^{1/2} - 2^3 P_2^{3/2}), \text{kHz} \\ & \longrightarrow \\ & \int_{NR} (2^3 S_1^{1/2} - 2^3 P_2^{3/2}), \text{kHz} \end{split} $

Рис. 5.2. НР поправки в кГц для исследованных в эксперименте переходов [196] в зависимости от угла между вектором поляризации поглощенного фотона и вектором распространения излучаемого фотона, \boldsymbol{e}_1 , $\boldsymbol{n}_{\boldsymbol{k}_2}$. Графики, соответствующие $2^3S_1^{3/2} \rightarrow 2^3P_0^{1/2}$ и $2^3S_1^{1/2} \rightarrow 2^3P_0^{1/2}$ опущены в виду их малости.

В переходе $2^3S - 2^3P$ наблюдались семь дипольных переходов (интенсивность двух линий сильно подавлена за счет доминирования сверхтонкого взаимодействия над взаимодействием тонкой структуры [200]) [196]. Из проведенного анализа следует, что для переходов $2^3S_1^{F_i=3/2} \rightarrow 2^3P_0^{F_a=1/2}$ и $2^3S_1^{F_i=1/2} \rightarrow 2^3P_0^{F_a=1/2}$ НР поправки незначительны (поэтому соответствующие графики опущены). Как и раньше, все значения $\delta_{\rm NR}$ пропорциональны множителю $1 + 3\cos 2\theta$, поэтому пересечение всех кривых происходит при значениях угла равному магическому. Сравнивая значения НР поправок, представленных на Рис. 5.2, с зеемановским сдвигом и соответствующими экспериментальными погрешностями (около 0.5 и 2 кГц, соответственно, см. [196]), можно обнаружить, что нерезонансные эффекты приводят к сравнимому сдвигу. Используя значения энергии для сверхтонких компонент тонкой структуры уровней 2³S и 2³P, можно получить так называемую энергию "центроида". Согласно [196] она задается выражением:

$$E(n^{\kappa}L) = \frac{\sum_{J,F} (2F+1) E(n^{\kappa}L_J^F)}{(2I+1) (2S+1) (2L+1)}.$$
(5.27)

Выполняя соответсвующее усреднение, чтобы получить "центроиды" уровней 2^3S , 2^3P , частота перехода определяется выражением:

$$\Delta E_{\text{centr}}^{^{3}\text{He}} \equiv E(2^{3}P) - E(2^{3}S) = (5.28)$$

$$\frac{1}{6} \left\{ \frac{1}{3} \left[\omega \left(2^{3}P_{1}^{1/2} - 2^{3}S_{1}^{1/2} \right) + \omega \left(2^{3}P_{0}^{1/2} - 2^{3}S_{1}^{1/2} \right) + \omega \left(2^{3}P_{1}^{1/2} - 2^{3}S_{1}^{3/2} \right) + \omega \left(2^{3}P_{0}^{1/2} - 2^{3}S_{1}^{3/2} \right) \right] + \frac{4}{3} \left[\omega \left(2^{3}P_{2}^{3/2} - 2^{3}S_{1}^{1/2} \right) + \omega \left(2^{3}P_{1}^{3/2} - 2^{3}S_{1}^{3/2} \right) \right] + 2\omega \left(2^{3}P_{2}^{5/2} - 2^{3}S_{1}^{3/2} \right) \right\} = 276\,702\,827\,204.8\,\text{ к}\Gamma\text{u},$$

где $\omega \left(2^{3}P_{J_{r}}^{F_{a}}-2^{3}S_{J_{i}}^{F_{i}}\right)$ означает частоту парциального $2^{3}P_{J_{r}}^{F_{a}}-2^{3}S_{J_{i}}^{F_{i}}$ перехода. Далее, полагая, что каждое из семи значений ω , входящих в (5.28), включает соответствующую НР поправку $\delta_{\rm NR}$, можно вычислить полный сдвиг энергии "центроида". Соответствующая поправка $\delta_{\rm centr}$ равна

$$\delta_{\text{centr}} \equiv \frac{1}{6} \left\{ \frac{1}{3} \left[\delta_{\text{NR}} \left(2^3 P_1^{1/2} - 2^3 S_1^{1/2} \right) + \delta_{\text{NR}} \left(2^3 P_0^{1/2} - 2^3 S_1^{1/2} \right) \right] + \delta_{\text{NR}} \left(2^3 P_1^{1/2} - 2^3 S_1^{3/2} \right) + \delta_{\text{NR}} \left(2^3 P_0^{1/2} - 2^3 S_1^{3/2} \right) \right] + \frac{4}{3} \left[\delta_{\text{NR}} \left(2^3 P_2^{3/2} - 2^3 S_1^{1/2} \right) + \delta_{\text{NR}} \left(2^3 P_1^{3/2} - 2^3 S_1^{3/2} \right) \right] + 2\delta_{\text{NR}} \left(2^3 P_2^{5/2} - 2^3 S_1^{3/2} \right) \right] + 2\delta_{\text{NR}} \left(2^3 P_2^{5/2} - 2^3 S_1^{3/2} \right) \right\},$$
(5.29)

где каждое значение $\delta_{\rm NR}$ для указанного парциального перехода рассчитывается согласно выражению (5.14) в разделе 5.1.

Легко заметить, что δ_{centr} , как и парциальные HP поправки (5.26) равны

нулю при "магическом угле". Будучи значительно ниже релятивистских и КЭД поправок, значения $\delta_{\rm NR}$ близки к 1 кГц (см. Рис. 5.2) и приближаются к вкладу от поляризуемости ядра, который составляет -1.1 кГц для энергии "центроида" $2^3P - 2^3S$, см. [196]. Таким образом, рассмотренный эффект может "экранировать" последний. Важно отметить, что значение $\delta_{\rm NR}$ также зависит от экспериментальных параметров, таких как плотность атомов в пучке, излучения абсолютно черного тела и т.п., см. ниже.

Глава 6.

Двухфотонная спектроскопия водорода и гелия

Следуя анализу нерезонансных эффектов в однофотонной спектроскопии, описанному в разделе 5.2, следует уделить отдельное внимание интерференции, возникающей при измерении частоты двухфотонных $2s \rightarrow ns/nd$ (n = 4, 6, 8, 12 - главное квантовое число) переходов в атоме водорода. В таких экспериментах атомы в пучке заселяются в состояние $2s_{1/2}^{F_i=1}$ и затем возбуждаются до состояния $ns_{1/2}^{F_a=1}$ или $nd_{3/2}^{F_a=2}$ с помощью поглощения двух поляризованных лазерных фотонов, распространяющихся в противоположных направлениях. Обнаружение возбужденной ns/nd фракции атомов можно наблюдать по ее флуоресценции (т.е. распаду в состояние 2p) [201] или уменьшению регистрации атомов в состоянии 2s [202, 203]. В обоих случаях возникает интерференция между различными тонкими подуровнями $nd_{3/2}^{F_a=2}$ и $nd_{5/2}^{F_{a'}=2}$, что приводит к асимметрии профиля линии. В [201] было показано, что детектирование возбужденной ns/nd фракции атомов по их флуоресценции имеет гораздо более высокую потенциальную точность, чем эксперименты по контролю скорости исчезновения метастабильных состояний [204,205]. Последнее ограничено большим фоном невозбужденных 2*s*-атомов. Недавно в [107] было показано, что нерезонансные

поправки к частоте $2s_{1/2}^{F_i=1} - nd_{3/2(5/2)}^{F_a=2}$ перехода, измеренные в экспериментах типа [204,205], достигают уровня нескольких кГц. Их сочетание с экстраполяцией сверхтонкой структуры, выполненной в [187], оказывается важным для определения зарядового радиуса протона r_p и постоянной Ридберга R_{∞} (хотя НР поправки дают вклад в следующем порядке относительно СТС).

Данная часть диссертации выполнена с неразделимым участием Т.А. Залялютдинова.

6.1. Амплитуда и сечение двухфотонного рассеяния с последующим излучением одного фотона

В разделе 5.2 было показано, что при определенной геометрии влияние НР эффектов в однофотонной спектроскопии можно существенно уменьшить [43,49,52]. Развивая этот подход, здесь представлены выражения для сечения соответствующего резонансного двухфотонного рассеяния на атоме водорода с учетом тонкой и сверхтонкой структуры уровней. Как и раньше, эти выражения зависят от направлений и поляризаций падающих (поглощенных) и уходящих (испускаемых) фотонов. Поэтому различные корреляции между направлениями и поляризациями следует рассматривать в рамках процесса трехфотонного рассеяния (два фотона поглощаются, а один излучается). Результаты оценки затем используются для получения НР поправок к сечению двухфотонного поглощения и определения частот 2s - ns/nd переходов.

В полной аналогии с результатами раздела 5.2 такой процесс рассеяния описывается диаграммой Фейнмана, изображенной на Рис. 6.1, что соответствует процессу двухфотонного поглощения атомом с последующим излучением фотона.


Рис. 6.1. Двухфотонный процесс возбуждения связанного электрона. Волнистая линия обозначает поглощение или излучение фотона. Двойная сплошная линия обозначает связанный электрон; ω_1 , ω_2 - частоты поглощенных фотонов, а ω_3 - частота излучаемого фотона. Индексы i, n, k, f соответствуют начальному, двум промежуточным и конечному состояниям электрона, соответственно. Согласно правилам Фейнмана, существует еще 5 диаграмм, относящихся к перестановкам фотонов, которые здесь для краткости опущены.

Соответствующий элемент S-матрицы равен

$$S_{fi}^{(3)} = (-ie)^3 \int d^4x_3 d^4x_2 d^4x_1 \overline{\psi}_f(x_3) \gamma_{\mu_3} A_{\mu_3}^*(x_3) \times$$

$$S(x_3, x_2) \gamma_{\mu_2} A_{\mu_2}(x_2) S(x_2, x_1) \gamma_{\mu_1} A_{\mu_1}(x_1) \psi_i(x_1),$$
(6.1)

со всеми обозначениями, приведенными в разделе 2.1. Интегрирование по временным переменным в (6.1) приводит к амплитуде:

$$U_{fi}^{(3)} = e^{3} \sum_{nk} \frac{\langle f | \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}_{3},\boldsymbol{e}_{3}}^{*} | n \rangle \langle n | \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}_{2},\boldsymbol{e}_{2}} | k \rangle \langle k | \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}_{1},\boldsymbol{e}_{1}} | i \rangle}{(E_{n} - E_{f} - \omega_{3})(E_{k} - E_{i} - \omega_{2})} + (5 \text{ членов от перестановок фотонов}).$$
(6.2)

Перестановки в (6.2) следует понимать как всевозможные перестановки индексов 1, 2, 3, обозначающих соответствующие фотоны. Тогда, дифференциальное сечение процесса рассеяния определяется выражением:

$$\frac{d\sigma_{fi}}{d\boldsymbol{n}_{k_3}} = 2\pi\delta(E_f - E_i + \omega_3 - \omega_1 - \omega_2) \left| U_{fi}^{(3)} \right|^2 \frac{\omega_2^2 d\omega_2}{(2\pi)^3} \frac{\omega_3^2 d\omega_3}{(2\pi)^3}.$$
(6.3)

Здесь n_k означает телесный угол в k-пространстве для соответствующего

фотона. В рамках нерелятивистского предела и дипольного приближения (в форме длины, см., например, [84])

$$U_{fi}^{(3)} = e^3 (2\pi)^{3/2} \sqrt{\omega_1 \omega_2 \omega_3} \sum_{nk} \frac{\langle f | \boldsymbol{e}_3^* \boldsymbol{r} | n \rangle \langle n | \boldsymbol{e}_2 \boldsymbol{r} | k \rangle \langle k | \boldsymbol{e}_1 \boldsymbol{r} | i \rangle}{(E_n - E_f - \omega_3)(E_k - E_i - \omega_2)} + \dots \quad (6.4)$$

Интерес представляет случай, когда два падающих фотона поглощаются в резонансное состояние n, т.е. $\omega_1 + \omega_2 = E_n - E_i$. В резонансном приближении это промежуточное состояние дает доминирующий вклад, а остальные нерезонансные члены в амплитуде рассеяния можно опустить. Такое приближение оправдано тем, что соответствующие нерезонансные поправки выходят за пределы точности экспериментов [84]. Тогда, полагая, что частоты двух падающих лазерных фотонов равны, т.е. $\omega_1 = \omega_2 \equiv \omega$, сечение (6.3) с амплитудой рассеяния (6.4) можно свести к

$$\frac{d\sigma_{fi}}{d\boldsymbol{n}_{k_3}} = \frac{e^6}{(2\pi)^5} \omega^6 (E_i + 2\omega - E_f)^3 \left| \sum_{nk} \frac{\langle f | \boldsymbol{e}_3^* \boldsymbol{r} | n \rangle}{E_n - E_i - 2\omega - \frac{\mathrm{i}}{2} \Gamma_n} \times \left(\frac{\langle n | \boldsymbol{e}_2 \boldsymbol{r} | k \rangle \langle k | \boldsymbol{e}_1 \boldsymbol{r} | i \rangle}{E_n - E_i - \omega} + \frac{\langle n | \boldsymbol{e}_1 \boldsymbol{r} | k \rangle \langle k | \boldsymbol{e}_2 \boldsymbol{r} | i \rangle}{E_k - E_n + \omega} \right) \right|^2, \tag{6.5}$$

где использованы процедура регуляризации расходящегося знаменателя и соотношение $\langle a | \mathbf{p} | b \rangle = i(E_a - E_b) \langle a | \mathbf{r} | b \rangle$ [8]. Появление мнимой части приводит к формированию профиля линии поглощения [8]. Регуляризация в случае двухфотонного поглощения повторяет "однофотонные расчеты", см. раздел 2.2, и допускает нерезонансное расширение, см. раздел 2.3.

Чтобы ввести нерезонансную поправку ведущего порядка для сечения заданного выражением (6.5), в сумме по n следует рассматривать ближайшие по энергии слагаемые, т.е. в случае двух соседних состояний это n = a(главный резонансный член, к которому относится НР поправка) и n = a'(наиболее близкий по энергии к резонансному состоянию) [33,35,37,43]. Набор квантовых чисел для состояния a' должен допускать поглощение двух электрических дипольных фотонов (как и для резонансного) и, следовательно, должен быть разрешен правилами двухфотонного отбора. Тогда, используя те же приближения, что и для однофотонной поправки, т.е. пренебрегая квадратичным нерезонансным вкладом (см. (5.10)), доминирующий вклад можно найти достаточно просто.

Далее предполагается стандартный набор квантовых чисел для атомных состояний в (6.5): главное квантовое число n, орбитальный момент электрона l, полный угловой момент электрона j, атомный угловой момент F и его проекция M_F . После суммирования по проекциям полного момента в конечном состоянии и усреднения по проекциям начального состояния [84] сечение имеет вид:

$$\frac{d\sigma_{fi}}{d\boldsymbol{n}_{k_3}} = \frac{e^6}{2F_i + 1} \left[\frac{f_{fi}^{(2\gamma)}(a,a)}{(\omega_0 - 2\omega)^2 + \frac{\Gamma_a^2}{4}} + \frac{2f_{fi}^{(2\gamma)}(a,a')(\omega_0 - 2\omega)}{\left((\omega_0 - 2\omega)^2 + \frac{\Gamma_a^2}{4}\right)(\omega_0 - 2\omega + \Delta)} \right], (6.6)$$

где $\Delta = E_{a'} - E_a$ и

$$f_{fi}^{(2\gamma)}(a,a') = \sum_{M_{F_i}M_{F_f}} T_{fai}\left(\frac{\omega_0}{2}\right) T_{fa'i}^*\left(\frac{\omega_0}{2}\right), \tag{6.7}$$

$$T_{fni}(\omega) = \omega^3 (E_i - E_f + 2\omega)^{3/2} \sum_{M_{F_n}} \langle f | \boldsymbol{e}_3^* \boldsymbol{r} | n \rangle \times$$
(6.8)

$$\sum_{k} \left[\frac{\langle n | \boldsymbol{e}_{2} \boldsymbol{r} | k \rangle \langle k | \boldsymbol{e}_{1} \boldsymbol{r} | i \rangle}{E_{a} - E_{i} - \omega} + \frac{\langle n | \boldsymbol{e}_{1} \boldsymbol{r} | k \rangle \langle k | \boldsymbol{e}_{2} \boldsymbol{r} | i \rangle}{E_{a} - E_{n} + \omega} \right].$$

Коэффициенты (6.7), как и прежде, определяют угловые зависимости. В нерелятивистском пределе матричные элементы в (6.6) не зависят явно от направлений фотонов $\mathbf{n}_{\mathbf{k}_3}$, $\mathbf{n}_{\mathbf{k}_2}$ и $\mathbf{n}_{\mathbf{k}_1}$. Зависимость от них возникает через условия поперечности для фотонов. Чтобы полностью исключить эффект Доплера первого порядка, для возбуждения состояний ns/nd используются два встречных гауссовских лазерных луча [202, 203]. Таким образом, без ограничения общности можно считать, что в эксперименте падающие фотоны распространяются в противоположных направлениях с фиксированными векторами поляризации \mathbf{e}_1 и \mathbf{e}_2 , а испущенный фотон имеет поляризацию \mathbf{e}_3 и фиксированное направление $\mathbf{n}_{\mathbf{k}_3}$. Тогда, обозначая углы между любой парой двух векторов как θ_{ij} (i, j = 1, 2, 3), интерференционный вклад в (6.6) соответствует ситуации, аналогичной экспериментам, основанным на процессе однофотонного рассеяния (угол между падающими фотонами можно задать равным π или нулю) [145, 146].

В резонансном приближении (т.е. сохраняя только первый член в выражении (6.6) из условия экстремума немедленно следует $\omega_{\rm res} = \omega_{\rm max} = \omega_{ai}/2 = (E_{n_a l_a j_a F_a} - E_{n_i l_i j_i F_i})/2$. Однако, сохраняя интерференционный член в (6.6), из условия экстремума для сечения как функции от ω , $\omega_{\rm max}$ получается равной

$$\omega_{\max} = (\omega_{ai} - \delta_{NR})/2, \qquad (6.9)$$
$$\delta_{NR} = \frac{\sum_{f} f_{fi}^{(2\gamma)}(a, a')}{\sum_{f} f_{fi}^{(2\gamma)}(a, a)} \frac{\Gamma_{a}^{2}}{4\Delta}.$$

Подобно случаю однофотонного рассеяния, обсуждаемому в разделе 5.2, НР поправка (6.9) представлена в виде доминирующего вклада, следующего из разложения в ряд по Γ_a/Δ , когда этот параметр мал. Угловые корреляции получаются из отношения $f_{fi}^{(2\gamma)}(a,a')/f_{fi}^{(2\gamma)}(a,a)$ и представляют зависимость от углов между каждой парой векторов \boldsymbol{n}_{k_1} , \boldsymbol{e}_2 и \boldsymbol{e}_3 .

6.2. Двухфотонная спектроскопия водорода

В этом разделе рассмотрены конкретные примеры HP поправок к частотам двухфотонных 2s - ns/nd (n = 4, 6, 8, 12) переходов в атоме водорода. Учитывая сначала интерференцию $2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow ns_{1/2}^{F_a=0}$ и $2s_{1/2}^{F_i=1} \rightarrow ns_{1/2}^{F_a=1}$ переходов предполагается, что сверхтонкая структура исходного 2s состояния разрешима в экспериментах [32, 134, 204, 206, 207]. Согласно правилам двухфотонного отбора электрические дипольные двухфотонные переходы с переворотом спина $2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow ns_{1/2}^{F_a=1}$ или $2s_{1/2}^{F_i=1} \rightarrow ns_{1/2}^{F_a=0}$ сильно подавлены [122, 124, 125]. Поэтому интерференция с близкими nd состояниями возможна только для переходов $2s_{1/2}^{F_i=1} \rightarrow ns_{1/2}^{F_a=1}$ и $2s_{1/2}^{F_i=1} \rightarrow nd_{3/2}^{F_a'=1}$, $2s_{1/2}^{F_i=1} \rightarrow nd_{3/2}^{F_a'=1}$, $2s_{1/2}^{F_i=1} \rightarrow nd_{3/2}^{F_a'=1}$ положим $n_i l_i = 2s$, $j_i = 1/2$, $F_i = 1$, $n_a l_a = ns$, $n_{a'} l_{a'} = nd$ ($n_a = n_{a'} = 4, 6, 8, 12$), $j_a = 1/2$, $F_a = 1$.

В экспериментах [145,146] поляризация лазерных фотонов e_1 и e_2 фик-

сировалась параллельно друг другу. Тогда НР поправка (6.9), зависит только от одного угла между поляризацией испущенного фотона e_3 и одного из двух параллельных векторов e_1 или e_2 . Суммирование по поляризации e_3 приводит к зависимости от вектора направления распространения n_{k_3} . Обозначая угол между векторами e_1 (или e_2) и n_{k_3} за θ , после необходимых вычислений (подробнее см. в [53]) можно обнаружить, что для частоты $2s_{1/2}^{F_i=1} \rightarrow ns_{1/2}^{F_a=1}$ перехода, поправка (6.9) пропорциональна (1 + 3 соз θ). Соответствующие численные результаты представлены на Рис. 6.2. Как и в случае НР поправок к частотам однофотонного перехода, существуют "магические углы", при которых поправка (6.9) равна нулю: $\theta = 54.7^{\circ}$ и $\theta = 125.3^{\circ}$.



Рис. 6.2. НР поправки $\delta_{\text{NR}}/2$ (в Гц) для измерения частот $2s_{1/2}^{F_i=1} - ns_{1/2}^{F_a=1}$ (n = 4, 6, 8, 12) переходов в водороде в зависимости от угла между вектором поляризации \boldsymbol{e}_1 поглощенного фотона (или \boldsymbol{e}_2 , поскольку в экспериментах $\boldsymbol{e}_1 || \boldsymbol{e}_2$) и вектором распространения \boldsymbol{n}_{k_3} испущенного фотона.

Недавно аналогичные интерференционные эффекты для измерения частоты двухфотонного 1s - 3s перехода были изучены в [146]. Было обнаружено, что для двухфотонного лазерно-индуцированного перехода $1s_{1/2}^{F_i=1} \rightarrow 3s_{1/2}^{F_a=1}$ НР поправка за счет интерференции с четырьмя соседними переходами $1s_{1/2}^{F_a=1} \rightarrow 3d_{3/2}^{F_{a'}=1}$, $1s_{1/2}^{F_i=1} \rightarrow 3d_{3/2}^{F_{a'}=2}$, $1s_{1/2}^{F_i=1} \rightarrow 3d_{5/2}^{F_{a'}=2}$ и $1s_{1/2}^{F_i=1} \rightarrow 3d_{5/2}^{F_{a'}=3}$ меньше экспериментальной неопределенности. Выражение (6.9) можно легко распространить на случай $1s_{1/2}^{F_i=1} \rightarrow 3s_{1/2}^{F_a=1}$ с помощью замены $2s_{1/2}^{F_i=1} \leftrightarrow 1s_{1/2}^{F_i=1}$ и $n_a = n_{a'} = 3$. Тогда поправку можно найти

в виде:

$$\delta_{\rm NR}(1s_{1/2}^{F_i=1} - 3s_{1/2}^{F_a=1}) = -225.61(1 + 3\cos 2\theta) \ \Gamma \mathfrak{u}. \tag{6.10}$$

Соответствующая угловая корреляция показана на Рис. 6.3.



Рис. 6.3. НР поправка $\delta_{\rm NR}/2$ к частоте перехода $1s_{1/2}^{F_i=1} \rightarrow 3s_{1/2}^{F_a=1}$ в водороде (в Гц). Обозначения те же, что и для Рис. 6.2.

Для других переходов $2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow ns_{1/2}^{F_a=0}$ существует интерференция с $2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow nd_{3/2}^{F_a=2}$ и $2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow nd_{5/2}^{F_a=2}$. Результаты оценок представлены на Рис. 6.4.



Рис. 6.4. НР поправки $\delta_{\rm NR}/2$ к $2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow ns_{1/2}^{F_a=0}$ (n = 4, 6, 8, 12) в Гц. Использованы те же обозначения, что и на предыдущих графиках.

Оценки НР поправок к частотам $2s_{1/2}^{F_i=1} \rightarrow nd_{3/2}^{F_a=2}$ (n = 4, 6, 8, 12) двухфотонных переходов с учетом соседнего $nd_{5/2}^{F_{a'}=2}$ уровня могут быть проведены аналогично. Для этого во всех выражениях следует положить $n_i l_i = 2s$, $j_i = 1/2, F_i = 1, n_a l_a = n_{a'} l_{a'} = nd$ ($n_a = 4, 6, 8, 12$), $j_a = 3/2, F_a = 2,$ $j_{a'} = 5/2, F_{a'} = 2$. В отличие от предыдущих случаев, оказалось, что НР поправки не зависят от угла между векторами n_{k_1}, e_2 и e_3 :

$$\delta_{\rm NR}(2s_{1/2}^{F=1} - 4d_{3/2}^{F=2}) = 967.75\,\Gamma\mathrm{u},\tag{6.11}$$

$$\delta_{\rm NR}(2s_{1/2}^{F=1} - 6d_{3/2}^{F=2}) = 296.48\,\Gamma\mathrm{II},\tag{6.12}$$

$$\delta_{\rm NR}(2s_{1/2}^{F=1} - 8d_{3/2}^{F=2}) = 127.31\,\Gamma_{\rm H},\tag{6.13}$$

$$\delta_{\rm NR}(2s_{1/2}^{F=1} - 12d_{3/2}^{F=2}) = 38.38\,\Gamma\mathrm{u}.\tag{6.14}$$

Помимо поправок (6.11)-(6.14), возникающих за счет соседних $nd_{3/2}^{F_a=2}$ и $nd_{5/2}^{F_{a'}=2}$ состояний, необходимо учесть интерференцию с переходами $2s_{1/2}^{F_i=1} \rightarrow nd_{3/2}^{F_a=2}$ и $2s_{1/2}^{F_i=1} - ns_{1/2}^{F_a=1}$ [53]. Согласно выражению (6.9), можно написать

$$\delta_{\rm NR}(2s_{1/2}^{F_i=1} - nd_{3/2}^{F_a=2}) = \frac{\sum_{j_f F_f} f_{\rm nr}(nd_{3/2}^{F_a=2}, ns_{1/2}^{F_{a'}=1})}{\sum_{j_f F_f} f_{\rm res}(nd_{3/2}^{F_a=2}, nd_{3/2}^{F_a=2})} \frac{\Gamma_{nd_{3/2}}^2}{4\Delta'''}, \tag{6.15}$$

где $\Delta''' = E_{nd_{3/2}^{F_a=2}} - E_{ns_{1/2}^{F_a'=1}}$. Тогда

$$\delta_{\rm NR}(2s_{1/2}^{F_i=1} - 4d_{3/2}^{F_a=2}) = -232.602 \frac{1+3\cos 2\theta}{5+3\cos 2\theta} \,\Gamma_{\rm II},\tag{6.16}$$

$$\delta_{\rm NR} (2s_{1/2}^{F_i=1} - 6d_{3/2}^{F_a=2}) = 107.937 \frac{1 + 3\cos 2\theta}{5 + 3\cos 2\theta} \,\Gamma_{\rm H},\tag{6.17}$$

$$\delta_{\rm NR} \left(2s_{1/2}^{F_i=1} - 8d_{3/2}^{F_a=2} \right) = 68.697 \frac{1 + 3\cos 2\theta}{5 + 3\cos 2\theta} \,\Gamma_{\rm II},\tag{6.18}$$

$$\delta_{\rm NR} \left(2s_{1/2}^{F_i=1} - 12d_{3/2}^{F_a=2}\right) = 25.582 \frac{1+3\cos 2\theta}{5+3\cos 2\theta} \,\Gamma\mathrm{u}.\tag{6.19}$$

Полная поправка к частотам переходов $2s_{1/2}^{F_i=1} \rightarrow nd_{3/2}^{F_a=2}$ определяется суммой соответствующих вкладов: независимых от угла (6.11)-(6.14) и зависимых от угла (6.16)-(6.19). Суммарные сдвиги частот $\delta_{\rm NR}/2$ показаны на Рис. 6.5. Знаменатель в выражениях (6.11)-(6.14) всегда ненулевой и положительный, в то время как числитель по-прежнему обращает эти поправки в нуль при θ равным "магическому углу".



Рис. 6.5. Суммарный сдвиг частоты $\delta_{\rm NR}/2$ (в Гц) для частот $2s_{1/2}^{F_i=1} - nd_{3/2}^{F_a=2}$ (n = 4, 6, 8, 12) переходов в водороде, см. выражения (6.11)-(6.14) и (6.16)-(6.19). Все обозначения аналогичны с Рис. 6.4.

В заключение можно отметить, что НР поправки, возникающие из дифференциального сечения, исчезают после интегрирования по углам, т.е. для полного сечения (когда излучение регистрируется во всем телесном угле 4π). Однако это справедливо только тогда, когда поправки зависят от угла. Например, интегрирование по углу выражения $1 + 3\cos 2\theta \, \mathrm{c} \, \sin \theta$ из якобиана сразу дает нулевой результат, при этом вклады типа (6.11)-(6.14) сохраняются. Интегрирование по углу θ следует проводить для сечения, а не НР поправки, что приводит, следовательно, к исчезновению интерференционного вклада (если он не является постоянным) и неисчезающему резонансному члену. Последнее хорошо видно из выражений (6.16)-(6.19), где знаменатель представляет ненулевой вклад резонансного члена. Кроме того, стоит отметить, что в экспериментах нет строго определенного направления вылета фотонов; излучение регистрируется в некотором телесном угле. Это обстоятельство можно учесть, проинтегрировав соответствующие выражения (в случае формул (6.16)-(6.19), отдельно числитель и отдельно знаменатель с последующим делением) в соответствии с условиями эксперимента, что в конечном итоге приводит к ненулевому результату для НР поправок.

6.3. Эксперименты по уменьшению заселеннсоти 2*s* состояния

Существует другой тип спектроскопических экспериментов, использующий процесс двухфотонного поглощения и основанный на скорости гашения состояния 2s [107, 204–207]. Для таких экспериментов первоначально подготовленное метастабильное состояние атомов водорода возбуждается до состояний ns/nd (n = 4, 6, 8, 12) путём поглощения двух лазерных фотонов. В этом случае в атомном пучке возбуждается только часть атомов, заселенных в 2s состояние. При приложении внешнего однородного статического электрического поля за областью возбуждения уровни противоположной четности 2s и 2p смешиваются, после чего возникает люминесценция Ly_{α} линии. Экспериментально можно наблюдать зависимость интенсивности этой линии от частоты поглощенных фотонов. Линия Ly_{α} отсутствует, если достигается двухфотонный резонанс.

В экспериментах такого типа достаточно рассматривать только сам процесс двухфотонного возбуждения и не учитывать последующий процесс излучения, в отличие от метода регистрации сигнала флуоресценции. Следуя [107], амплитуду процесса можно рассматривать только как часть, соответсвующую поглощению в амплитуде рассеяния (6.5):

$$U_{ni}^{(\text{abs})} = \frac{e^2 2\pi\omega}{E_i + 2\omega - E_n} \sum_k \left(\frac{\langle n | \boldsymbol{e}_1 \boldsymbol{r} | k \rangle \langle k | \boldsymbol{e}_2 \boldsymbol{r} | i \rangle}{E_n - E_k - \omega} + \frac{\langle n | \boldsymbol{e}_2 \boldsymbol{r} | k \rangle \langle k | \boldsymbol{e}_1 \boldsymbol{r} | i \rangle}{E_i - E_k + \omega} \right), \quad (6.20)$$

где уже учтено равенство поглащенных частот, $\omega_1 = \omega_2 = \omega$. Формула (6.20) записана в общем виде, но с отброшенным множителем, соответствующим процессу излучения. В рамках резонансного приближения это оправдано, поскольку соответствующий матричный элемент входит в амплитуду (6.20) общим множителем [8].

Опуская для краткости промежуточные вычисления, включающие интегрирование по углам и суммирование по проекциям [107], каждый член в (6.20) можно свести к выражению

$$\sum_{k} \frac{\langle a | \boldsymbol{e}_{2} \boldsymbol{r} | k \rangle \langle k | \boldsymbol{e}_{1} \boldsymbol{r} | i \rangle}{E_{i} + \omega - E_{k} (1 - \mathrm{i}0)} = (-1)^{l_{k} + l_{i} + j_{a} + 2j_{k} + F_{a} + j_{i} + F_{k}} \Pi_{l_{i}} \Pi_{l_{k}} \Pi_{j_{i}} \Pi_{j_{a}} \Pi_{j_{k}} \times (6.21)$$

$$\begin{cases} l_{k} \ s \ j_{k} \\ j_{a} \ 1 \ l_{a} \end{cases} \begin{cases} l_{i} \ s \ j_{i} \\ j_{k} \ 1 \ l_{k} \end{cases} \begin{cases} j_{k} \ I \ F_{k} \\ F_{a} \ 1 \ j_{a} \end{cases} \begin{cases} j_{i} \ I \ F_{i} \\ F_{k} \ 1 \ j_{k} \end{cases} \end{cases} \times$$

$$\Pi_{F_{k}} \Pi_{F_{i}} C_{l_{k}010}^{l_{a}0} C_{l_{i}010}^{l_{k}0} \sum_{q_{1},q_{2}} (-1)^{q_{1} + q_{2}} C_{F_{k}M_{k}1 - q_{1}}^{F_{a}M_{a}} C_{F_{i}M_{i}1 - q_{2}}^{F_{k}M_{k}} e_{1_{q_{1}}} e_{2_{q_{2}}} g_{l_{k}}(E_{i} + \omega).$$

Здесь суммирование по k в левой части означает все необходимые суммирования по квантовым числам, не входящим в правую часть, e_{1_q} , e_{2_q} сферические компоненты векторов поляризации, а $g_{l_k}(E_i + \omega)$ представляет собой соответствующие интегралы с радиальной частью кулоновской функции Грина, см. раздел 3.2.

Профиль поглощения можно получить из дифференциального сечения $d\sigma_{ai}^{(abs)} = \frac{d^3k_1}{(2\pi)^3} \frac{d^3k_2}{(2\pi)^3} \left| U_{ai}^{(abs)} \right|^2$. Согласно [43], наиболее существенный нерезонансный вклад возникает при учете тонкой структуры возбужденных уровней. Тогда в амплитуду (6.20) следует включить состояния с одинаковым орбитальным моментом, но с разными полными угловыми моментами (например, уровни $nd_{3/2}$ и $nd_{5/2}$ в водороде). Оставив в амплитуде только эти члены [107], профиль поглощения можно записать так:

$$\frac{d\sigma_{ai}^{(\text{abs})}}{d\omega d\Omega_1 d\Omega_2} \sim \frac{C_a}{(2\omega - \omega_0)^2 + \frac{1}{4}\Gamma_a^2} + \frac{C_{aa'}}{(2\omega - \omega_0)^2 + \frac{1}{4}\Gamma_a^2} \frac{2(2\omega - \omega_0)}{2\omega - \omega_0 - \Delta_{\text{fs}}}.$$
 (6.22)

Здесь Ω_i , i = 1, 2 - телесные углы в фазовых пространствах поглощенных фотонов, Γ_a - естественная ширина линии резонансного состояния, $\Delta_{\rm fs}$ обозначает энергетический интервал тонкой структуры, а $\omega_0 = E_a - E_i$. Коэффициент C_a соответствует резонансному переходу $i \to a$, интерферирующему с $i \to a'$ и приводящему к фактору $C_{aa'}$. Коэффициенты C_a , $C_{aa'}$ рассчитываются с помощью выражений (6.20), (6.21).

Учитывая интерферирующие $2s_{1/2}^{F_i=1} \rightarrow nd_{3/2}^{F_a=2}, 2s_{1/2}^{F_i=1} \rightarrow nd_{5/2}^{F_{a'}=2}$ переходы для $n = 4, 6, 8, 12, \Delta_{\rm fs} = E_{nd_{3/2}^{F_a=2}} - E_{nd_{5/2}^{F_{a'}=2}}$ и обозначив ширину уровня как Γ_{nd} , результаты рассчитанных НР поправок приведены в Таблице 6.1.

Таблица 6.1. Нерезонансные поправки (четвертый столбец) в Гц для интерферирующих переходов $2s_{1/2}^{F_i=1} \rightarrow nd_{3/2}^{F_a=2}$ и $2s_{1/2}^{F_i=1} \rightarrow nd_{5/2}^{F_{a'}=2}$ для n = 4, 6, 8, 12. Энергии расщепления тонкой структуры в Гц приведены во втором столбце, естественная ширина линий в Гц указана в третьем столбце.

Состояние	$\Delta_{\mathrm{fs}}, \ \Gamma$ ц	Γ_{nd}, Γ ц	$\delta_{ m NR}, \Gamma$ ц
4d	4.557026×10^{8}	4.40503×10^{6}	-8691.82
6d	1.350231×10^{8}	1.33682×10^{6}	-2701.67
8d	5.69628×10^7	5.72382×10^{5}	-1174.02
12d	1.68779×10^{7}	1.72261×10^{5}	-358.88

Как видно из Таблицы 6.1, вклады НР поправок имеют порядок экспериментальной погрешности, см. [11] и уменьшаются с увеличением главного квантового числя n. По результатам предыдущего раздела также можно сделать вывод, что поправки для этого типа экспериментов больше, чем для тех же переходов в экспериментах, где регистрируется флуоресцентный сигнал nd - 2p, см. Рис. 6.4-6.5. Важно отметить, что недавнее новое экспериментальное измерение частоты перехода $2s_{1/2} - 8d_{5/2}$ основано на типе экспериментов, обсуждавшихся в разделе 6.2. Как было указано в [143], нерезонансные вклады, возникающие за счет ЭКИ, незначительны. Однако, было обнаружено, что НР поправка для этого перехода оказывается равной -1174.02 Гц, что соответствует экспериментальной ошибке, порядка 2 кГц.

6.4. Двухфотонная спектроскопия гелия

Значительный прогресс в спектроскопии одноэлектронных систем стимулировал изучение нерезонансных поправок к энергиям переходов в многоэлектронных системах [46–48, 50]. Хотя гелий изучается теоретически и экспериментально уже много лет, нерезонансные эффекты и ЭКИ, как их доминирующая часть [43], в спектроскопических измерениях частот переходов до недавнего времени не учитывались [47, 50]. Энергии атомных уровней в гелии принято выражать как сумму нерелятивистских энергий, релятивистских поправок низшего порядка, лэмбовского сдвига и т.д., включая квантово-электродинамические поправки и релятивистские вклады высшего порядка. Недавние расчеты КЭД эффектов на уровне $\alpha^7 m$ улучшили теоретические предсказания энергий уровней атомов гелия, что привело к полному согласию с измеренной частотой перехода $2^3S - 2^3P$ [208]. Однако, как было обнаружено в [208], такие расчеты не устраняют расхождения между теоретическими предсказаниями и экспериментальным результатом для перехода $2^3S_1 - 3^3D_1$ [55].

Используя результаты предыдущих разделов, в данном разделе представлен анализ ЭКИ, возникающего для соседних подуровней тонкой структуры, при измерении энергии перехода $2^3S_1 - 3^3D_1$ в атоме гелия. В эксперименте, описанном в [56], атомы гелия в пучке находятся в метастабильном состоянии $2^{3}S_{1}$, а затем возбуждаются в состояние $3^{3}D_{1}$ путем поглощения двух фотонов с равными частотами, $\omega_1 = \omega_2$, имеющими параллельные поляризации \mathbf{e}_1 и \mathbf{e}_2 и распространяющиеся в противоположных направлениях [207]. Детектирование возбужденной фракции атомов 3^3D_1 наблюдается по флуоресценции (т.е. распаду в состояния 2^3P) с испусканием фотона с частотой ω_3 , поляризацией \mathbf{e}_3^* в направлении \boldsymbol{n}_{k_3} . Соответственно, интерференция должна происходить между подуровнями тонкой структуры 3³D₁, 3³D₂ и 3³D₃. Эта экспериментальная ситуация аналогична ранее обсуждавшейся в разделе 6.2, см. также [53]. Следуя постановке эксперимента [56], необходимо проанализировать нерезонансные поправки, обусловленные интерференцией между различными тонкими подуровнями, $3^{3}D_{J_{n}}$, для процесса рассеяния $2^{3}S_{1} + 2\gamma(E1) \rightarrow 3^{3}D_{J_{n}} \rightarrow 2^{3}P_{J_{f}} + \gamma(E1)$, где $J_n = 1, 2, 3$ и частота поглощенных фотонов $\omega_1 = \omega_2 = (E_{3^3 D_{J_n}} - E_{2^3 S_1})/2.$

Повторяя вычисления, приведенные в предыдущих разделах, можно найти аналогичные выражения для нерезонансной поправки. Тогда, подставив значения естественной ширины линии $\Gamma_{3^3D_1} = 11.35(6)$ МГц [209], соответствующие разности энергий $\Delta_{12} = 1325.025(33)$ МГц, $\Delta_{13} =$ 1400.290(33) МГц [55] в выражение (6.9), поправка к частоте перехода $2^3S_1 - 3^3D_1$ равна

$$\delta_{\rm NR} = 0.0124(4) \,\,{\rm M}\Gamma$$
ц. (6.23)

Вычисления выражений (6.6)-(6.9) показывают, что аналогично HP поправке к частоте $2s_{1/2}^{F_i=1} \rightarrow nd_{3/2(5/2)}^{F_a=2}$ (см. (6.11)-(6.14)) перехода в водороде [53,107], рассматриваемый эффект также не зависит от угла между любой парой векторов n_{k_3} , e_1 и e_2 . Важным результатом этих расчетов, включающих естественную ширину уровня, является то, что величина эффекта находится на уровне экспериментальной ошибки 0.056 МГц [56]. Однако, наблюдаемая экспериментально ширина Γ^{\exp} профиля спектральной линии существенно отличается от естественной Γ^{nat} из-за разных механизмов уширения [210]. Фактически, ширина уровня в (6.9) должна быть связана с экспериментальным значением [205]. В [56] основной эффект уширения линии обусловлен давлением и временем прохождения. Обозначая два последних вклада за Γ^{pb} и Γ^{tt} , соответственно, полную ширину на полувысоте (full width half-maximum) можно выразить как сумму трех вкладов:

$$\Gamma^{\exp} = \Gamma^{nat} + \Gamma^{pb} + \Gamma^{tt}.$$
(6.24)

Согласно [56], уширение, обусловленное давлением, параметризуется как $\Gamma^{\rm pb}/p = 35.7(1.7)$ [МГц/Торр], где p - давление в Торрах. Обычно сигнал поглощения измеряется при различных значениях p и затем результат экстраполируется до нулевого давления (в [56] значения p использовались в диапазоне 0.05 - 0.5 Торр). Значение уширения, $\Gamma^{\rm tt}$, за счет времени прохождения атомного пучка в эксперименте [56] не представлено. Однако, его можно грубо оценить как разницу между экспериментальной шириной, экстраполированной к нулевому давлению $\Gamma^{\rm exp} = 11.33(19)$ МГц и естественной шириной $\Gamma^{\rm nat} = 11.26$ МГц, рассчитаной теоретически [211]: $\Gamma^{\rm tt} = 0.07(19)$ МГц. Наконец, для давлений p в диапазоне от 0.05 до 0.5 Торр экспериментальная ширина в (6.24) соответствует интервалу $\Gamma^{\rm exp} \in [13.2(4), 29.2(4)]$ МГц. Подстановка этих значений в выражение (6.9) приводит к НР поправке в диапазоне $\delta_{\rm NR} \in [0.016(1), 0.082(19)]$ МГц. Последнее значение частично устраняет нынешнее расхождение между теоретическим и экспериментальным значением частоты $2^3S_1 - 3^3D_1$ перехода, которое составляет около 0.5 МГц [208].

Наблюдаемый флуоресцентный сигнал был зарегистрирован при давлении p = 0.151 Торр (см. Рис. 1 в [56]). НР поправка, соответствующая p = 0.151 Торр, составляет $\delta_{\rm NR} = 0.027$ МГц. Это значение все еще не устраняет расхождение между теоретическими расчетами и экспериментом, найденное в [208], но достигает уровня экспериментальной ошибки $E^{\rm exp}(2^3S_1 - 3^3D_1) = 786\,823\,850.002(56)$ МГц [56]. Поскольку результирующее экспериментальное значение частоты $2^3S_1 - 3^3D_1$ перехода в [56] получено путем экстраполяции положения линии к нулевому давлению, то необходимо "восстанавливать" центр линии с учетом НР поправки при каждом значении давления. Можно ожидать, что результат будет иным (см. Рис. 2b в [56]) и, по крайней мере частично, устранит нынешнее расхождение с теорией [108].

Аналогичные расчеты НР поправок можно провести для частот переходов $2^{3}S_{1} - 4^{3}D_{1}$ и $2^{3}S_{1} - 5^{3}D_{1}$, измеренных в [212]. Эти эксперименты проводились с использованием той же методики, что и [56], в результате чего были получены значения $\Delta E^{\exp}(2^3S_1 - 4^3D_1) = 947\,000\,197.11(1.8)$ МГц и $\Delta E^{\exp}(2^3S_1 - 5^3D_1) = 102\,112\,869\,7.31(2.4)$ МГц. Уширение линий $2^3S_1 - 5^3D_1$ $4^{3}D_{1}$ и $2^{3}S_{1} - 5^{3}D_{1}$ были определены как $\Gamma^{
m pb}/p = 68.1(2.7)[{
m M}\Gamma{
m u}/{
m Topp}]$ и $\Gamma^{
m pb}/p = 78.5(2.7)[{
m M}\Gamma{
m u}/{
m Topp}]$, соответственно (см. Таблицу III в [212]), в то время как уширение за счет времени прохождения по-прежнему можно считать незначительным. Используя значения соответствующих интервалов тонкой структуры $\Delta_{12} = E_{4^3D_1} - E_{4^3D_2} = 555.231(7)$ МГц, $\Delta_{13} =$ $E_{4^3D_1} - E_{4^3D_3} = 591.253(6)$ МГц [199], и для естественной ширины уровня $\Gamma_{4^3D_1}^{\rm nat} = 4.96274$ МГц [213], можно обнаружить НР поправку к частоте перехода $2^3S_1 - 4^3D_1$ в диапазоне от 0.350(23) до 2.65(2) МГц для давления p = 0.5 - 1.5 Торр. Указанные поправки находятся на уровне или превышают экспериментальную погрешность для частоты перехода $2^{3}S_{1} - 4^{3}D_{1}$, которая составляет 1.8 МГц. Аналогично, значения поправки для частоты перехода $2^3S_1 - 5^3D_1$ начинаются с 0.79(5) и заканчиваются 6.6(4) МГц с учетом энергетических интервалов $\Delta_{12} = E_{5^3D_1} - E_{5^3D_2} = 283.560(8)$

МГц, $\Delta_{13} = E_{5^3D_1} - E_{5^3D_3} = 302.781(8)$ МГц [199] и естественной ширины $\Gamma_{5^3D_1}^{\text{nat}} = 2.61381$ МГц [213]. Результаты для всех рассмотренных примеров сведены в Таблицу 6.2.

Таблица 6.2. Диапазон нерезонансных поправок к частотам перехода $2^3S_1 - n^3D_1$ (n = 3, 4, 5) (5-й столбец). Экспериментальные значения частоты перехода даны во втором столбце, теоретические значения в третьем, а диапазон экспериментальных значений ширины уровня в четвертом. Все значения указаны в МГц. Погрешности указаны в скобках.

Переход	Эксперимент, МГц [56,212]	Теория, МГц [55, 208]	Ширина Г ^{ехр} , МГц	$\delta_{\rm NR}, \ {\rm M} \Gamma$ ц
$2^3S_1 - 3^3D_1$	786823850.002(56)	786823849.540(57)	13.2(4) - 29.2(4)	0.016(1) - 0.082(19)
$2^3S_1 - 4^3D_1$	947000197.11(1.8)	947000194.44(5)	39(1.4) - 107(4)	0.350(23) - 2.65(2)
$2^3S_1 - 5^3D_1$	1021128697.31(2.4)	1021128698.36(5)	41.9(1.4) - 120(4)	0.79(5) - 6.6(4)

Несмотря на то, что представленный анализ не может полностью устранить текущие расхождения экспериментальных и теоретических значений для частот переходов, необходимо точно учитывать нерезонансные поправки в экспериментах типа [56, 212]. Можно ожидать, что согласование эксперимента и теории, скорее всего, связано с вопросом более аккуратного измерения и соответствующей экстраполяции (с учетом нерезонансных вкладов) экспериментальных результатов.

6.5. Эффект теплового уширения

Учитывая обсуждение, представленное в предыдущем разделе 6.4, наблюдаемая ширина линии играет решающую роль в определении частоты перехода. Этот вывод следует непосредственно из выражения для нерезонансной поправки (6.9). Пропорциональность поправки $\sim \Gamma^2$ делает ее чувствительной к ширине наблюдаемой в эксперименте спектральной линии. Существует ряд факторов, приводящих к уширению спектральной линии, например, время прохождения, давление, остаточные электрические и магнитные поля, и мн.др. В принципе, все эти эффекты требуют использования конкретного профиля линии, но простейшим образом такое рассмотрение можно свести к параметру, характеризующему ширину контура линии, определяемой суммой соответствующих вкладов, см. (6.24). Уменьшение роли указанных эффектов позволяет более точно определять частоты переходов за счет сужения наблюдаемых спектральных полос до линий естественной ширины, но сопровождается существенным усложнением эксперимента. Другой очевидный способ избежать соответствующей ошибки - провести соответствующие теоретические расчеты этих "тонких" эффектов.

В этом разделе обращается внимание еще на один эффект уширения линий, который также хорошо известен и рассматривался многими авторами, а именно тепловое уширение. Теоретическое описание этих эффектов сводится к расчету вероятностей переходов, индуцированных излучением абсолютно черного тела (AЧT). Последнее можно осуществить в нерелятивистском пределе и в дипольном приближении с помощью следующего выражения (см., например, [214–216]):

$$\Gamma_{a}^{\beta} = \frac{4}{3}e^{2}\sum_{n} \left| \langle a | \boldsymbol{r} | n \rangle \right|^{2} n_{\beta} (\omega_{an}) \omega_{an}^{3}, \qquad (6.25)$$

где $\omega_{ab} = E_a - E_b$ - разность энергий между состояниями атома *a* и *b* (резонансная частота перехода), k_B - постоянная Больцмана, *T* - температура в кельвинах, $n_\beta(\omega)$ - функция распределения Планка,

$$n_{\beta}(\omega) = \frac{1}{e^{\frac{\omega}{k_B T}} - 1}.$$
(6.26)

Суммирование в (6.25) проходит по всему спектру уравнения Шрёдингера и включает вышележащие состояния. При низких температурах парциальные вклады из сплошного спектра энергий незначительны. При комнатной температуре численные значения ширин, индуцированных излучением АЧТ, для уровней ns/nd (n = 4, 6, 8, 12) в водороде приведены в таблице 6.3, где для сравнения также приведены естественные ширины. Влияние теплового уширения линий на НР поправки можно учесть, подставив полные ширины атомных уровней $\Gamma_a^{tot} \equiv \Gamma_a^\beta + \Gamma_a^{nat}$, в выражение

Таблица 6.3. Естественные и индуцированные излучением АЧТ ширины линий для состояний ns/nd в атоме водорода при T = 300 К. Все значения указаны в Гц. Суммирование по n в (6.25) ограничено только дискретным спектром и n = 300, что оправдано достаточно малым коэффициентом $k_BT \approx 9.5 \times 10^{-4}$ в атомных единицах. Значения даны в Гц. Указана также доля от вклада в нерезонансную поправку, x (безразмерная величина).

	ns			nd				
11	$\Gamma_{ns}^{\beta}, [214]$	Γ_{ns}^{β}	$\Gamma_{ns}^{\rm nat}$	$x = 2\Gamma_{ns}^{\beta}/\Gamma_{ns}^{\text{nat}}$	$\Gamma^{\beta}_{nd}, [214]$	Γ^{β}_{nd}	$\Gamma_{nd}^{\mathrm{nat}}$	$x = 2\Gamma_{nd}^{\beta}/\Gamma_{nd}^{\text{nat}}$
4	2.54966	2.53778	7.03×10^5	7.22×10^{-6}	4.30037	4.2809	4.41×10^6	1.94×10^{-6}
6	1120.13	1119.48	2.98×10^5	0.075	1530.75	1529.73	1.34×10^6	0.0023
8	4036.17	4036.93	1.44×10^5	0.056	5026.11	5027.23	$5.72 imes 10^5$	0.018
12	5718.44	5721.15	4.77×10^4	0.24	6434.63	6437.68	1.72×10^5	0.075

(6.9) для резонансного состояния *a*. Поскольку Γ_a^β меньше Γ_a^{nat} , то порядок величины термоиндуцированной нерезонансной поправки можно оценить как отношение $x = 2\Gamma_a^\beta/\Gamma_a^{\text{nat}}$ относительно значения, заданного естественной шириной уровня. Значения *x* приведены в Таблице 6.3 и могут быть использованы путем умножения результатов предыдущих разделов на этот коэффициент. В частности, из значений *x* следует, что термоиндуцированное уширение становится существенным для высоковозбужденных состояний *ns*, приводя к дополнительному вкладу порядка четверти от "естественного".

6.6. Заключение по НР поправкам

В заключение стоит отметить, что спектроскопические измерения частот переходов в различных атомных системах составляют значительную часть современной физики. Они позволяют с беспрецедентной точностью проверять фундаментальные взаимодействия, определять физические константы и изучать фундаментальные симметрии, встречающиеся в природе. Исследования, основанные на двухфотонной спектроскопии простых атомов, представляют собой одни из наиболее точных экспериментов на сегодняшний день. Проверка прецизионных экспериментальных результатов во многом поддерживается теоретическим анализом, который наиболее строг для легких нерелятивистских атомов и ионов. В последнее десятилетие большое внимание в научной литературе уделяется изучению эффекта квантовой интерференции в водороде и водородоподобных атомных системах. Это позволило существенно уменьшить экспериментальную погрешность определения соответствующих частот переходов. Теоретическое описание ЭКИ относится к рассмотрению интерферирующих переходов, возникающих для состояний близко расположенных с резонансным уровнем. Таким образом, исследования влияния нерезонансных процессов, включая необходимость учета эмиссионного процесса на формирование профиля поглощения, являются неотъемлемой частью спектроскопических измерений. Совсем недавно были проведены расчеты, показывающие необходимость учета ЭКИ в каскадном излучении (аналогично результатам раздела 5.5) для точного определения частоты абсорбционного перехода в высоковозбужденные состояния в двухфотонных спектроскопических экспериментах [190].

Наконец, для эксперимента [32] эффект асимметрии контура линии можно схематически проиллюстрировать графиками, представленными на Рис. 6.6.



Рис. 6.6. Схематическая иллюстрация асимметрии профиля линии, возникающей за пределами резонансного приближения для эксперимента [32].

Графики приведены в произвольных единицах по оси ординат, по оси абсцисс отложена частота в единицах естественной ширины резонансно-

го состояния. На левой верхней панели показаны симметричный (пунктирная кривая) и асимметричный (сплошная кривая) профили, неразличимые невооруженным глазом. То же самое показано в логарифмическом масштабе на правой верхней панели. Часть профиля линии, близкая к области максимума линии, представлена в логарифмическом масштабе на левой нижней панели. Разница между симметричным и асимметричным профилями в зависимости от угла между поляризацией падающего фотона и направлением испускаемого фотона показана на правой нижней панели. Шкала значений профиля задается так, чтобы эффект был виден (используется нормировочный коэффициент), то же самое и с выбором шкалы частот.

6.7. Адаптированный метод моментов для определения частоты перехода

Данный раздел посвящен поиску альтернативных возможностей определения спектроскопических стандартов атомной частоты. Если оставить в стороне обсуждение нерезонансных эффектов, то поиск альтернативных способов сравнения теоретических результатов с экспериментальными становится одной из значимых задач прецизионной атомной спектроскопии. Например, если профиль наблюдаемой линии удастся детально измерить, то в качестве одного из методов такого определения можно предложить детальное сравнение теоретического и экспериментального спектральных распределений. Тогда, оценив дисперсию двух спектральных функций, можно определить частоту перехода, ширину, амплитуду и т.д. по минимуму их отклонения:

$$\overline{\left(S^{\exp}(\omega_i) - S^{\text{theor}}(\omega_i)\right)^2} - \left(\overline{S^{\exp}(\omega_i) - S^{\text{theor}}(\omega_i)}\right)^2.$$
(6.27)

Здесь $S^{\exp}(\omega_i)$ - значение наблюдаемого спектрального распределения в точке ω_i , а $S^{\text{theor}}(\omega_i)$ - теоретически оцененное спектральное распределение в той же точке ω_i .

Обычная процедура определения частоты перехода в атомной и моле-

кулярной спектроскопии заключается в фитировании наблюдаемой спектральной линии профилем Лоренца, Гаусса, Фойта или другими. Профиль линии Лоренца описывает процесс однофотонного испускания (поглощения) с учетом естественной ширины уровней, обусловленной радиационным распадом возбужденного состояния. Однако, в более общих случаях экспериментально наблюдаемая ширина линии значительно превышает естественную. Уширение спектральных линий связано, например, с доплеровскими и столкновительными эффектами, с влиянием внешних полей и т.д. Гауссов профиль может быть использован для экстраполяции экспериментальных данных в случае значительного искажения спектральной линии. В свою очередь, комбинированное естественное и "внешнее" (например, столкновительное и доплеровское) уширение описывается профилем Фойта. Как следствие, максимум (или значение частоты на полувысоте) наблюдаемой формы линии интерпретируется как частота перехода.

Выбор фитирующего контура соответствует различным физическим условиям и не ограничивается этими тремя профилями [217]. Каждый из профилей служит своему назначению и должен использоваться для детального описания физических процессов, происходящих в эксперименте. Наиболее проблемный случай возникает при описании экспериментальных данных с плохим соотношением сигнал/шум. Предполагая, что эффекты, описанные, например, в [217], сведены к минимуму с помощью рутинных теоретических расчетов, неразрывно связанных с экспериментальным моделированием [218], теоретическое описание, представленное ниже, ограничивается профилями Лоренца, Гаусса и Фойта. Основной целью данного раздела служит демонстарция различных возможностей для аккуратного извлечения частоты перехода из наблюдаемого асимметричного профиля (детали см. в [109]).

Экспериментально наблюдаемая спектральная линия может быть опи-

сана одним из трех различных профилей:

$$L(\omega) = \frac{f^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \alpha_L^2}, \quad G(\omega) = f^2 e^{-\frac{(\omega - \omega_0)^2}{2\alpha_D^2}},$$
$$V(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} G(\omega') L(\omega - \omega') d\omega' = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f^2 e^{-\frac{\omega'^2}{2\alpha_D^2}} d\omega'}{(\omega - \omega_0 - \omega')^2 + \alpha_L^2}.$$
 (6.28)

Здесь $\alpha_L \equiv \Gamma/2$, Γ - естественная ширина атомного уровня, α_D - гауссова полуширина на полувысоте, ω_0 - теоретическое значение разности энергий между атомными уровнями, а f представляет собой амплитуду перехода, зависящую от всех возможных величин (в частности, квантовых чисел и углов). Такие обозначения введены для удобства и не влияют на общность вычислений. Первая форма линии - это профиль Лоренца, вторая - функция Гаусса, а третья форма линии называется профилем линии Фойта. Эти функции распределения должны быть нормированы на единицу: $\int_{-\infty}^{\infty} [L(\omega), G(\omega), V(\omega)] d\omega = 1.$

Функции (6.28) можно использовать для определения хорошо известных моментов: нулевой момент - это общая вероятность, первый момент среднее значение, второй центральный момент - дисперсия, третий момент - это асимметрия (числовая характеристика симметрии распределения), а четвертая - эксцесс (насколько тяжелые у распределения хвосты). Нулевой момент дает константу нормировки, а первый момент воспроизводит среднюю частоту, совпадающую с теоретической величиной ω_0 :

$$\overline{\omega} \equiv \mu_1 = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \,\omega \left[L(\omega), G(\omega), V(\omega) \right]}{\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left[L(\omega), G(\omega), V(\omega) \right]} = \omega_0.$$
(6.29)

Оценка любых моментов для распределения Гаусса не представляет труда, а результат (6.29) для профилей Лоренца или Фойта заслуживает отдельного обсуждения. Вычисления для обоих могут быть выполнены с использованием главного значения интегралов, когда верхний и нижний пределы интегрирования одинаково стремятся к бесконечности. Однако для высших моментов эта процедура нарушается. Для решения этой проблемы можно использовать характеристическую функцию соответствующего распределения.

Результат (6.29) можно легко адаптировать к обработке экспериментальных данных, т.е. использовать таблицу данных со значениями частот и спектральных функций. Среднее значение частоты (первый момент)

$$\overline{\omega}^{\exp} = \frac{\sum_{i} \omega_i \left[L(\omega_i), G(\omega_i), V(\omega_i) \right]}{\sum_{j} \left[L(\omega_j), G(\omega_j), V(\omega_j) \right]},$$
(6.30)

где суммирование проводится по всем доступным значениям. Тогда средняя частота $\overline{\omega}^{\exp}$ должна совпадать с теоретическим значением ω_0 и быть близкой к частоте, найденной как максимум наблюдаемой формы линии (симметричный профиль).

Выражение (6.30) можно сравнить с процедурой фитирования: i) оно основано только на экспериментальных данных; ii) выражение (6.30) не зависит от теоретической модели формы линии, т.е. профили Лоренца, Гаусса или Фойта приводят к одному и тому же результату; iii) точность определения $\overline{\omega}^{\text{ехр}}$ ограничена неопределенностью измеренных значений ω_i и $L(\omega_i)$, $G(\omega_i)$ или $V(\omega_i)$. Далее показаны некоторые результаты адаптации этого метода для нескольких близких гладких (нешумных) линий, представляющих наибольший интерес в прецизионной спектроскопии.

Применение "лоренцевой модели" для двух соседних линий дает

$$N_{L} = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega L(\omega) = \pi \left[\frac{f_{1}^{2}}{\alpha_{L1}} + \frac{f_{2}^{2}}{\alpha_{L2}} \right],$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \,\omega L(\omega) = \pi \frac{\delta f_{2}^{2} \alpha_{L1} + f_{1}^{2} \alpha_{L2} \omega_{0} + f_{2}^{2} \alpha_{L1} \omega_{0}}{\alpha_{L1} \alpha_{L2}},$$

$$\overline{\omega}_{L}^{\exp} \equiv \mu_{1}^{L} = \omega_{0} + \delta \frac{f_{2}^{2} \alpha_{L1}}{f_{1}^{2} \alpha_{L2} + f_{2}^{2} \alpha_{L1}},$$
(6.31)

где δ - сдвиг второго максимума относительно первого (в случае эксперимента [32] - энергия расщепления тонкой структуры), $\alpha_{L1(2)}$ и $f_{1(2)}$ представляют собой ширины и амплитуды уровней для резонансных линий 1, 2 соответственно. Спектральная функция $L(\omega)$ имеет вид:

$$L(\omega) = \left| \frac{f_1}{\omega - \omega_0 - i\alpha_{L1}} + \frac{f_2}{\omega - \omega_0 - \delta - i\alpha_{L2}} \right|^2, \qquad (6.32)$$

т. е. учитывает интерференцию и "квадратичные" вклады двух резонансных линий. Находя следующие моменты, можно составить систему независимых уравнений на все неизвестные в (6.31).

Есть еще одна возможность определения частоты ω₀ по экспериментальным данным (не только для двух пиков). Её можно выразить формулой:

$$\overline{\omega}^{\exp} \approx \omega_0 = \frac{\sum_{i} \omega_i \left[L(\omega_i), G(\omega_i), V(\omega_i) \right]^n}{\sum_{j} \left[L(\omega_j), G(\omega_j), V(\omega_j) \right]^n}, \tag{6.33}$$

где $n \to \infty$. В этом случае множитель в слагаемом, пропорциональном δ (см. (6.31)) стремится к нулю при $f_1 \neq f_2$. На практике это означает, что распределение самого высокого пика стремиться к дельта-функции и, следовательно, данная процедура соответствует определению максимума. Это определение можно использовать с желаемой точностью; для достижения большей точности следует использовать большие значения n.

Подробный анализ различных моделей профиля, а также апробация метода для некоторых переходов в различных атомных системах на основе *Базы данных атомных спектров NIST*, были представлены в [109]. Опуская далее детали расчетов, применение метода моментов можно проиллюстрировать на "реальных" (необработанных) экспериментальных данных.

В качестве первой тестовой системы была рассмотрена изолированная линия комбинационного рассеяния поликристаллического кремния. Оптическая фононная полоса кремния на частоте 520.7 см⁻¹ служит стандартом в колебательной спектроскопии. Поэтому представляет интерес точное определение ее положения [219–221]. Экспериментальные данные для этой полосы показаны на Рис. 6.7 для четырех спектров, зарегистрированных с различным соотношением сигнал/шум.



Рис. 6.7. Экспериментальный профиль оптической фононной полосы комбинационного рассеяния поликристаллического кремния. Значения *x* показывают отношение сигнал/шум. Здесь и далее спектры измерены на спектрометре LabRam HR-800 с возбуждением лазерной линией 632.8 нм от источника He-Ne, конфокальным отверстием 100 микрон и дифракционной решеткой 1800 град/мм. Ошибка измерения равна 0.35 см⁻¹. Отношение сигнал/шум варьировалось за счет использования фильтров нейтральной плотности в лазерном тракте.

Используя таблицу экспериментальных данных, были найдены значения частоты, соответствующие пику (максимуму): 520.63 ± 0.35 см⁻¹ и 520.74, рассчитанные согласно (6.29) и в приближении (6.33) для параметра отношения сигнал/шум x = 252. Результат находится в прекрасном соответствии с [221]. Для проверки эффективности метода при различных отношениях сигнал/шум x представлена Таблица 6.4, в которой показаны значения длин волн, рассчитанные для различных x, а также значения, полученные с помощью процедуры фитирования профиля.

Прежде всего, следует отметить, что значения, найденные аппроксимацией по контурам Гаусса или Лоренца, дали одинаковые результаты для данных, представленных на Рис. 6.7. Результаты для аппроксимации профилем Фойта в Таблице 6.4 не приводятся, в предположении ее очевидной Таблица 6.4. Максимум полосы комбинационного рассеяния кремния, полученный в результате расчетов и фитирования (волновые числа, ν , в см⁻¹). В первом столбце показано отношение сигнал/шум x, во втором столбце показана экспериментальная погрешность. Значения, полученные с использованием приближений Гаусса, ν_{max}^{G} , и Лоренца, ν_{max}^{L} , приведены в третьем и четвертом столбцах соответственно. Результаты расчетов методом моментов приведены в пятом столбце. Наконец, в последнем столбце указаны значения, рассчитанные в приближении (6.33) с разницей между n = 20 и n = 40 в скобках.

	<u> </u>				
x	погр., см ⁻¹	$\nu_{\rm max}^G, { m cm}^{-1}$	ν_{max}^L , cm ⁻¹	$\bar{\nu}, \mathrm{cm}^{-1}$	$\bar{\nu}^{(n)}, \mathrm{c}\mathrm{m}^{-1}$
23	± 0.35	520.70	520.69	520.47	520.65(1)
68	± 0.35	520.75	520.76	520.55	520.84(4)
135	± 0.35	520.75	520.76	520.59	520.80(1)
252	± 0.35	520.72	520.72	520.63	520.74(1)

справедливости, поскольку $\lambda_{\text{max}}^G = \lambda_{\text{max}}^L$. В свою очередь, результаты, соответствующие расчетам методом моментов, согласуются с ними в пределах экспериментальной неопределенности. Как и ожидалось, с ростом параметра x значения, определенные методом моментов, стремятся к табличному значению (520.70 см⁻¹ [221]), но даже при x = 23 можно найти приемлемое совпадение в пределах погрешности измерения. Кроме того, расчетная полная ширина на половине высоты (FWHM) составляет 2.64 см⁻¹ при x = 252, а процедура фитирования дает 2.89 см⁻¹, что соогласуется друг с другом с учетом точности численных расчетов, оцениваемой шагом частоты около 0.3 см⁻¹.

В качестве другого примера рассмотрим двойную линию около 219 см⁻¹ для серы, которая также используется в качестве эталонного образца в рамановской спектроскопии. Соответствующие данные показаны на Рис. 6.8, включая результаты аппроксимации двумя профилями Лоренца. Как и для рассмотренной выше одиночной линии кремния, погрешность измерений составляет 0.35 см⁻¹. Значения двух наблюдаемых максимумов, найденных фитированием, составляют 219.15 и 214.68 см⁻¹. Волновое число более высокого пика хорошо согласуется с результатами базы данных https://www.chem.ualberta.ca/ mccreery/ramanmaterials.html, т.е. 219.1 см⁻¹ со стандартным отклонением 0.57 см⁻¹, см. также [222]. В свою оче-

Рис. 6.8. Экспериментальный профиль полосы α для серы с двойной структурой на частоте около 219 см⁻¹, фитированные согласно лоренцевой модели. Ошибка измерений составляет ± 0.35 см⁻¹.



редь, применяя метод моментов, значения оказываются равными 219.15 и 214.63 см⁻¹, соответственно. Рассчитанные значения FWHM 1.59 и 1.55 см⁻¹ согласуются с результатами фитирования 1.63 и 1.54 см⁻¹.

Наконец, на Рис. 6.9 проиллюстрированы результаты еще одной двойной полосы серы в районе 473 см⁻¹, отличающейся более размытой структурой. Табличное значение этой частоты составляет 473.2 ± 0.49 см⁻¹ (см.

Рис. 6.9. Наблюдаемый профиль полосы для серы с размытой двойной структурой при 473 см⁻¹. Для аппроксимации экспериментальных данных использовалась лоренцева модель. Ошибка измерения равна ±0.35 см⁻¹.



https://www.chem.ualberta.ca/ mccreery/ramanmaterials.html), а значения, полученные путем аппроксимации экспериментальных данных, составля-

ют 473.08 ± 0.35 и 467.59 ± 0.35 см⁻¹ для высокого и низкого пиков, соответственно. Этот случай представляет особый интерес, поскольку имеется сильное перекрытие двух полос. Метод моментов дает значения 473.10 и 467.67 см⁻¹, которые согласуются с результатом фитирования в пределах экспериментальной ошибки. В свою очередь, ширины коррелируют как 4.52 и 4.92 для более высокого пика, 5.31 и 5.61 для нижнего пика, найденные фитированием и численно в см⁻¹, соответственно.

Полученные результаты демонстрируют возможность применения метода моментов для определения характеристик спектральных линий, таких как частота перехода, амплитуды, ширины и т.д. Этого можно добиться, рассчитав соответствующие моменты в таблице данных с экспериментальными значениями наблюдаемого спектрального распределения. Метод моментов можно сравнить с укоренившейся процедурой фитирования. Важно отметить, что, во-первых, значение частоты не зависит от выбора модели, т.е. совпадает для форм линий Лоренца, Гаусса или Фойта. Во-вторых, метод моментов также использует только экспериментальные данные: расчеты производятся только в рамках полученной экспериментально таблицы значений, основываясь на вышеизложенной теории. В-третьих, метод показал хорошую точность для перекрывающихся резонансов. В-четвертых, не имеет значения, связаны ли линии с излучением или другими процессами. Наконец, в представленные результаты ограничены наличием двух резонансов, но могут быть распространены и на большее число спектральных линий.

Однако метод моментов имеет свои недостатки. Первый (и наиболее проблематичный) заключается в том, что система уравнений совершенно нелинейная. В результате метод поиска решений или выбора приближений усложняется. Тем не менее можно обнаружить, что вся нелинейность возникает из-за учета ширины уровней. Тогда, полагая, что ширины уровней малы по сравнению с частотами переходов и энергетическим расщеплением линий, решение можно найти в приближении эквивалентных ширин (или, в более простом случае, соответствует нулевой ширине), см. детали в [109]. Также может возникнуть проблема с выбором решения. Но опять же, используя экспериментальные данные, можно определить соответствующие значения максимумов в качестве нулевого приближения. Можно ожидать, что большого расхождения между этим методом и поиском максимумов (центра линии) быть не должно.

Таким образом, представленный анализ устанавливает принципиальную возможность использования метода моментов для обработки экспериментальных спектральных данных и определения частот переходов. По крайней мере, метод моментов можно использовать для контроля точности искомых параметров путем сопоставления соответствующих моментов, оцененных по таблице экспериментальных данных и по данным, полученным при фитировании в соответствии с (6.27).

Экспериментальные данные были предоставлены Е. Соловьевой (соавтор работы [109]).

Глава 7.

Спектроскопия атома анти-водорода

Достижения по получению атомов анти-водорода позволили проводить спектроскопические исследования их свойств [66, 70, 72, 223-226]. Детальное сравнение спектроскопических характеристик анти-водорода (\overline{H}) с прецизионно измеренными свойствами спектров атомов водорода (Н) могут дать информацию о возможном нарушении СРТ и Лоренц-инвариантности [227]. Согласно СРТ-теореме, спектры атомов вещества и антивещества должны быть идентичны. Тем не менее, было показано, что нарушения СРТ- и Лоренц-симметрий в планковском масштабе могли бы наблюдаться в рамках спектроскопии водорода и анти-водорода [227]. Эффекты этого типа могут проявляться в спектрах Н и Н в нулевом порядке по постоянной тонкой структуры и могут быть обнаружены не только в линии 1s – 2s, но также в сверхтонком переходе с переворотом спина. Более того, сверхточные измерения частоты перехода в водороде (см., например, [20, 137, 228]) стимулировали развитие спектроскопических экспериментов с атомами анти-материи. На сегодняшний день точность последних находится на уровне 10^{-8} относительной виличины [73–75].

Спектры атомов водорода и анти-водорода во внешнем электрическом поле различаются из-за наличия в выражениях для вероятностей перехода [103–105] слагаемых, линейных по электрическому полю. Такие члены отсутствуют в энергии из-за сохранения пространственной (P) и временной (T) четностей. Однако, они могут войти в выражение для профиля линии, поскольку последний пропорционален вероятности перехода. Профиль линии Лоренца при резонансном рассеянии фотона на атомном электроне в присутствии внешнего электрического поля остается симметричным относительно резонансной частоты ω_0 . Эта симметрия нарушается при учете нерезонансных поправок. НР поправки были рассмотрены в разделах выше. В отличие от "стандартных" энергетических поправок, было показано, что они могут линейно зависеть от электрического поля и, таким образом, различаться для атомов водорода и анти-водорода. Подобные эффекты выявляют специфическое различие в спектрах атомов Н и \overline{H} в присутствии внешнего электрического поля.

Данная глава посвящена теоретическим аспектам, связанным с учетом внешних полей при сравнительном анализе спектров атомов H и H. В частности, сначала приведены оценки поправок, влияющих на определение частоты перехода и возникающих за счет асимметрии наблюдаемого профиля линии, а затем представлен сравнительный анализ отличительных особенностей линий излучения (поглощения) в присутствии внешнего магнитного поля. Последнее адресовано к возможности поиска атомов H в межзвездной среде. Важность представленного анализа можно подчеркнуть недавними экспериментами [66, 73, 74], направленными на детальное сравнение спектров водорода и анти-водорода. Можно ожидать, что полученные результаты могут послужить дальнейшему экспериментальному совершенствованию таких измерений.

7.1. Оценки HP поправки во внешнем электрическом поле к частоте Ly_{α} линии в \overline{H}

В данном разделе показано, что нерезонансные поправки к частоте перехода могут содержать слагаемые, линейные по электрическому полю. В частности, рассматривается процесс упругого резонансного рассеяния фотонов на основном состоянии атома водорода или анти-водорода, помещенных в слабое электрическое поле. Частота налетающих фотонов близка к энергии перехода Ly_α. Предполагается, что можно наблюдать естественный профиль линии 1s – 2p перехода, как это было впервые указано в [137]. Внешнее электрическое поле предполагается "слабым". Будет показано, что существование линейных по полю членов не нарушает PT-четности и приводит к различию резонансных спектроскопических измерений атомов водорода и анти-водорода во внешнем электрическом поле.

Адаптируя выражение (6.6) и формализм, использованный в разделе 4.1, в качестве оценки НР поправки сечение для однофотонного рассеяния для Ly_{α} перехода в атоме водорода может быть сведено к виду (см. [126]):

$$\sigma \sim \frac{W_{2p_{1/2}'}(\boldsymbol{k}')W_{2p_{1/2}'}(\boldsymbol{k})}{x^2 + \frac{1}{4}\Gamma_{2p_{1/2}'}^2} + 2\Re \frac{W_{2p_{1/2}';2p_{3/2}'}(\boldsymbol{k}')W_{2p_{1/2}';2p_{3/2}'}(\boldsymbol{k})}{\left(x - \frac{1}{2}\Gamma_{2p_{1/2}'}\right)\left(x + \Delta_{\mathrm{fs}}\right)},\tag{7.1}$$

где $x \equiv \omega - \omega_0$, k', k обозначают поглощенный и излученный фотоны, соответственно. $W_{2p'_{1/2}}$ - дифференциальная вероятность 1s - 2p перехода, а $W_{2p'_{1/2};2p'_{3/2}}$ - "смешанная" (за счет интерференции для $2p_{1/2}$ и $2p_{3/2}$ состояний) вероятность перехода, см. [43]. Штрихами заданы состояния, для которых учтена примесь состояния противоположной четности, возникающей во внешнем электрическом поле [103–105].

В дальнейшем считается, что влияние внешнего электрического поля на энергии уровней несущественно, и эффективно смешаны лишь $2p_{1/2}$ и 2s состояния. Согласно (4.14), непосредственно следует

$$\psi_{2p'_{1/2}} = \psi_{2p_{1/2}} - \xi_{\rm S} \psi_{2s}, \qquad (7.2)$$

$$\psi_{2s'} = \psi_{2s} + \xi_{\rm S} \psi_{2p_{1/2}},$$

где состояния определены через параметр Штарка $\xi_{\rm S}$. Как и прежде для малого электрического поля $\xi_{\rm S} = \langle 2s | d \boldsymbol{\mathcal{E}} | 2p \rangle / \Delta E_L \ll 1$. Для состояния $2p_{3/2}$ лэмбовский сдвиг ΔE_L должен быть заменен на соответствующий интервал тонкой структуры, который значительно больше ΔE_L . Далее полагается $2p'_{3/2} \equiv 2p_{3/2}$. Также важным обстоятельством является наличие дифференциальных вероятностей переходов $W_{2p'_{1/2}}$, поскольку полная вероятность (проинтегрированная по всем возможным направлениям), совпадающая в данном случае с шириной уровня, зависит от поля лишь квадратично. Этот результат будет получен в следующих разделах явно.

Пользуясь для простоты условием экстремума, нерезонансная поправка может быть найдена в виде:

$$x_{\rm NR} = \frac{1}{4} \frac{\Gamma_{2p}^2}{\Delta_{\rm fs}} \frac{W_{2p_{1/2}';2p_{3/2}}(\boldsymbol{k}') W_{2p_{1/2}';2p_{3/2}}(\boldsymbol{k})}{W_{2p_{1/2}'}(\boldsymbol{k}') W_{2p_{1/2}'}(\boldsymbol{k})}$$
(7.3)

Переходя к полностью нерелятивистскому описанию, угловые моменты в (7.3) могут быть полностью опущены. Также учтено, что примесь 2s состояния слабо меняет естественную ширину уровня 2p и, следовательно, $\Gamma_{2p'_{1/2}} \approx \Gamma_{2p'} \approx \Gamma_{2p}$.

Линейная зависимость от внешнего поля может быть получена с учетом результатов, полученных в [103–105], где, в частности, дифференциальная вероятность излучения была сведена к виду:

$$W_{2s'} = W_{2s} - \sqrt{3} \frac{e\Gamma_{2p}}{\Delta E_L^2} \left(\boldsymbol{k}\boldsymbol{\mathcal{E}} \right) \sqrt{W_{2p}W_{2s}}.$$
(7.4)

Здесь заряд электрона, e, выписан явно, а W_{2p} и W_{2s} не зависят от k и представляют вероятности излучения соответствующих состояний в отсутсвии поля. Также в (7.4) пренебрегается квадратичным по полю вкладом. Соответственно, можно получить (см. подробнее в [126])

$$W_{2p'} = W_{2s} + \sqrt{3} \frac{e\Gamma_{2p}}{\Delta E_L^2} \left(\boldsymbol{k}\boldsymbol{\mathcal{E}} \right) \sqrt{W_{2p}W_{2s}}, \tag{7.5}$$

$$W_{2p';2p} = W_{2p} + \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{e\Gamma_{2p}}{\Delta E_L^2} (\mathbf{k} \mathbf{\mathcal{E}}) \sqrt{W_{2p} W_{2s}}.$$
 (7.6)

Если интерес представляет корреляция ($k\mathcal{E}$), т.е. зависимость от угла между вектором направления излученного фотона и полем, то можно положить $W_{2p'}(\mathbf{k}') = W_{2p';2p}(\mathbf{k}') = W_{2p}$. Тогда, в соответстсвии с (7.5), (7.6), разложение в ряд знаменателя в (7.3) дает

$$x_{\rm NR} = \frac{1}{4} \frac{\Gamma_{2p}^2}{\Delta_{\rm fs}} \left[1 - e \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{\Gamma_{2p}}{\Delta E_L^2} \sqrt{\frac{\Gamma_{2s}}{\Gamma_{2p}}} \left(\boldsymbol{k}\boldsymbol{\mathcal{E}} \right) \right]$$

$$= x_{\rm NR}^{(0)} + \delta x_{\rm NR}.$$
(7.7)

Здесь $x_{\rm NR}^{(0)}$ в точности соответствует результату [43], а $\delta x_{\rm NR}$ представляет собой вклад, зависящие от поля.

Линейная зависимость HP поправки от электрического поля не означает существования линейного эффекта Штарка. Следует помнить, что такие поправки не являются сдвигами энергии атомных уровней в буквальном смысле; они представляют собой поправки, которые следует внести для сравнения результатов измерений частоты с теоретическими расчетами энергетических уровней [35, 43].

Формальная Т-неинвариантность множителя ($k\mathcal{E}$) (k, \mathcal{E} являются Тнечетными и Т-четными векторами, соответственно) компенсируется линейной зависимостью от Γ_{2p} в (7.7). Такая имитация Т-неинвариантности в нестабильных системах была предсказана Зельдовичем [229]. Указанная Тнеинвариантность содержится уже в выражении (7.4) и может быть объяснена следующим образом [103, 104]. Выражение (7.4) описывает излучение фотона с импульсом k. В обращенном во времени процессе, т.е. поглощении фотона с импульсом -k, необходимо также изменить знак Γ в энергетических знаменателях амплитуды, которые зависят от граничных условий, определяющих положение полюса в электронном пропагаторе электронов (2.3). Тогда, выражения (7.4) и (7.7) инвариантны относительно обращения времени.

Рассматривая слабое электрическое поле, когда $\xi_{\rm S} = 0.1$ (соответствующее значение напряженности поля $\mathcal{E} = 47.5$ B/cм), следует учесть, что $\Delta_{\rm fs} = 0.03m(\alpha Z)^4$, $\Delta E_L = 0.4m\alpha(\alpha Z)^4$ и $\Gamma_{2p} = 0.04m\alpha(\alpha Z)^4$, $\Gamma_{2s} = 10^{-3}m\alpha(\alpha Z)^{10}$ (в выражение (7.7) входят однофотонные вероятности/амплитуды). Тогда $\delta x_{\rm NR} \simeq -e10^{-4} (\mathbf{k}\varepsilon)$ Гц ($\varepsilon \equiv \mathcal{E}/\mathcal{E}$ - единичный вектор направления поля). Пропорцианальность заряду электрона, выписанная для наглядности явно, демонстрирует различие для атомов H и H. Оценка (7.7), хотя и является грубой (указывает лишь на порядок величины) и допускает, что эффект может быть значительнее, демонстрирует принципиальную важность мониторинга внешнего электрического поля в экспериментах, относящихся к анализу спектральных характеристик атома \overline{H} . Порядок величины этого эффекта показывает, что он вряд ли будет наблюдаться при резонансном рассеянии фотонов на переходе 1s-2p в ближайшее время: погрешность измерения частоты в этом процессе составляет около МГц [74, 137].

7.2. "Квадратичная" НР поправка к частоте Ly_α линии линейная по полю

Учитывая, что во внешнем электрическом поле за счет смешивания 2s, 2p уровней (см. (7.2)) однофотонное поглощение может эффективно проходить и в 2s' состояние (например, коэффициент Штарка $\xi_{\rm S} = 1$ говорит о полном смешивании близколежащих 2s, 2p состояний [103, 104]). Сечение рассеяния Ly_{α} фотона может быть представлено в виде квадратичных вкладов (см. [38, 39]):

$$\sigma \sim \frac{W_{2p_{1/2}'}(\vec{k'})W_{2p_{1/2}'}(\vec{k})}{x^2 + \frac{1}{4}\Gamma_{2p_{1/2}'}^2} + \frac{W_{2s_{1/2}'}(\vec{k'})W_{2s_{1/2}'}(\vec{k})}{(x + \Delta E_L)^2}.$$
(7.8)

Здесь, как и ранее, $W_{2p'_{1/2}}(\mathbf{k}')$ и $W_{2s'_{1/2}}(\mathbf{k}')$ обозначают дифференциальные вероятности поглощения (соответствуют "штрихованному" фотону), а $W_{2p'_{1/2}}(\mathbf{k}), W^e_{2s'_{1/2}}(\mathbf{k})$ - дифференциальные вероятности излучения (соответствуют "нештрихованному" фотону) для переходов $2p'_{1/2} \leftrightarrow 1s$ и $2s'_{1/2} \leftrightarrow 1s$, соответственно. Аналогично, можно положить $\Gamma_{2p'_{1/2}} \equiv \Gamma_{2p}$, поскольку даже для $\xi_{\rm S} = 1$ ширина $\Gamma_{2p'}$ слабо подвержена изменению (из-за малости ширины уровня 2s). Первый член в выражении (7.8) представляет собой резонансный ввклад (профиль линии Лоренца), тогда как второй член обеспечивает нерезонансную поправку. Учет HP вклада в (7.8) в ведущем порядке дает

$$x_{\rm NR} = -\frac{1}{16} \frac{\Gamma_{2p}^4}{\Delta E_L^3} \frac{W_{2s'}(\mathbf{k}') W_{2s'}(\mathbf{k})}{W_{2p'}(\mathbf{k}') W_{2p'}(\mathbf{k})}.$$
(7.9)

В отсутствие электрического поля ($\xi = 0$) для полного сечения нерезонансная поправка (7.9) исчезающе мала. В этом случае $\Gamma_{2p} = 0.04\alpha^3$, $\Delta E_L = 0.4\alpha^3$, $W_{2p} \approx \Gamma_{2p}$ и $W_{2s} \approx \Gamma_{2s} = 10^{-3}\alpha^9$ (в атомных единицах). Тогда получается $x_{\rm NR} \approx -10^{-22}$ Гц. Основной вклад в сдвиг максимума $x_{\rm NR}$ в отсутствие поля вносят интерференционные члены между $1s - 2p_{1/2}$ и $1s - np_{1/2}$ переходов и от квадратичного $1s - 2p_{3/2}$ вклада (см. предыдущие разделы). Однако, при наличии электрического поля $\xi_{\rm S} = 1$ поправка (7.9) становится наибольшей: $x_{\rm NR} \approx -6.4$ кГц.

Интересуясь линейным по полю вкладом, можно провести выкладки аналогичные предыдущему разделу (см. также [38]). Разложение в ряд знаменателя в (7.9) дает

$$x_{\rm NR} = -\frac{1}{16} \frac{\Gamma_{2p}^4}{\Delta E_L^3} \xi_{\rm S}^4 \left[1 - e\left(\xi_{\rm S} + \frac{1}{\xi_{\rm S}}\right) \frac{\Gamma_{2p}}{\Delta E_L} \left(\frac{W_{2s}}{W_{2p}}\right)^{1/2} (\boldsymbol{k}\boldsymbol{\mathcal{E}}) \right].$$
(7.10)

Здесь заряд связанной частицы вновь выписан явно для наглядности.

Для $\xi_{\rm S} = 1$ HP поправка линейная по полю определяется формулой:

$$\delta x_{\rm NR} = -e \frac{1}{8} \frac{\Gamma_{2p}^5}{\Delta E_L^4} \left(\frac{W_{2s}}{W_{2p}}\right)^{1/2} (\boldsymbol{k\mathcal{E}})$$
(7.11)

Численный результат сводится к оценке $|\delta x_{\rm NR}| \approx 10^{-4}$ Гц.

Таким образом, прямое наблюдение этой разницы в настоящее время также представляется весьма маловероятным. Отметим, однако, что часть поправки $x_{\rm NR}$, не зависящая от направления поля и, следовательно, равная для атомов Н и $\overline{\rm H}$, всего лишь на три порядка раз меньше экспериментальной ошибки [137].

7.3. Двухфотонный 1s-2s резонанс: Н и \overline{H} атомы во внешнем электрическом поле

В этом разделе вычисляется HP поправка к частоте перехода для 1s - 2s двухфотонного резонанса в атомах H и \overline{H} . В качестве экспериментальной базы для такого рода исследований считаются измерения, проведенные в атоме водорода с точностью около 46 Гц [134, 182].

В [182] для описания формы резонансной линии процесса 1s - 2s двухфотонного возбуждения с отложенной регистрацией флуоресценции за счет приложения электрического поля был использован упрощенный квантовомеханический подход, основанный на формализме матрицы плотности. В [37] была представлена оценка $x_{\rm NR}$, основанная на чисто феноменологических соображениях (см. раздел 4 диссертации). В данной части работы представлено описание процесса, противоположного к рассмотренному в [43]: двухфотонное 1s - 2s возбуждение и распад во внешнем электрическом поле. Рассмотренный здесь случай будет соответствовать $\xi_{\rm S} = 1$, а случай [43] соответствует $\xi_{\rm S} = 0$.

Следует подчеркнуть, что рассматриваемый здесь процесс также отличается от реального эксперимента [134,182], где электрическое поле присутствует только в области регистрации флуоресценции, а не в "части возбуждения". Процесс с постоянным наличием электрического поля, конечно, теряет большую часть преимуществ экспериментального подхода, развитого в [134, 182], и должен обеспечивать гораздо меньшую точность. Однако, именно такой подход более реалистичен в экспериментах, направленных на поиск разницы спектральных характеристик H и H атомов [73, 74].

Используя прежние приближения, в том числе пренебрегая штарковскими сдвигами атомных уровней, сечение процесса было представлено в [38] следующим образом:

$$\sigma \sim \frac{W_{2s',2\gamma}(\mathbf{k}')W_{2s',1\gamma}(\mathbf{k})}{x^2 + \frac{1}{4}\Gamma_{2s'}^2} + \frac{W_{2p',2\gamma}(\mathbf{k}')W_{2p',1\gamma}(\mathbf{k})}{(x + \Delta E_L)^2}.$$
 (7.12)

Индексы 2γ , 1γ означают двух- и однофотонные процессы поглощения и
излучения $2s' \leftrightarrow 1s + 2\gamma, 2p' \leftrightarrow 1s + 2\gamma, 2s' \leftrightarrow 1s + \gamma, 2p' \leftrightarrow 1s + \gamma$, а $x = E_{2s'} - E_{1s} - \omega$ (как и ранее).

Повторяя вычисления, изложенные в разделе 7.1, для нерезонансной поправки возникает выражение:

$$x_{\rm NR} = -\frac{1}{16} \frac{\Gamma_{2s'}^4}{\Delta E_L^3} \frac{W_{2p',2\gamma}(\mathbf{k}') W_{2p',1\gamma}(\mathbf{k})}{W_{2s',2\gamma}(\mathbf{k}') W_{2s',1\gamma}(\mathbf{k})}$$
(7.13)

Максимальному нерезонансному вкладу соответствует случай $\xi_{\rm S} = 1$. Тогда, с учетом $\Gamma_{2s'} = \Gamma_{2p}$ и $W_{2p',2\gamma}(\mathbf{k}') \approx W_{2s',2\gamma}(\mathbf{k}'), W_{2p',1\gamma}(\mathbf{k}) \approx W_{2s',1\gamma}(\mathbf{k}) \approx \Gamma_{2p}$, можно получить тот же результат, что и для однофотонного перехода 1s - 2p: поправка, независимая от направления поля, составляет $x_{\rm NR} \approx -6.4$ кГц. Аналогичный результат получается и для поправки, которая зависит от направления поля: $|\delta x_{\rm NR}| \approx 10^{-4}$ Гц.

Таким образом, показано, что резонансные спектры во внешнем электрическом поле различны для атомов H и H. Оценки показывают, что положения максимумов профилей линий для Ly_{α} резонансов в атомах H и H сдвинуты друг относительно друга на величину $\sim 2 \times 10^{-4}$ Гц. То же касается и двухфотонных переходов в процессах поглощения $1s + 2\gamma \rightarrow 2s$, происходящих во внешнем электрическом поле. Более того, в электрическом поле с $\xi_{\rm S} = 1$ нерезонансные поправки, не зависящие от направления поля, оказываются на несколько порядков больше, чем нерезонансные поправки в отсутствие поля. Это усиление связано с перекрыванием резонансов с одинаковыми квантовыми числами. Последнее было теоретически изучено для высокозарядных ионов в [133]. В случае атомов водорода и анти-водорода уровни 2p', 2s' в поле $\xi_{\rm S} = 1$ фактически не перекрываются, но в отличие от уровней 2p, 2s они имеют одинаковые квантовые числа. Поскольку эти уровни по-прежнему близки друг к другу, их взаимное влияние приводит к большим HP поправкам.

Также следует упомянуть еще один эффект, который выглядит по разному в атомах H и \overline{H} , помещеных во внешнее электрическое поля. Это эффект квантовых биений в Ly_{α} излучении. Его исследовали теоретически и экспериментально многие авторы, см., например, [230–232] и соответствующие ссылки в этих работах. Применительно к атомам водорода и антиводорода эффект квантовых биений был рассмотрен в работах [233, 234].

В заключение по НР поправкам во внешнем электрическом поле стоить отметить, что приведенные выше оценки являются скорее грубыми и указывают лишь на порядок величины асимметрии спектральной линии. Присутстсвие внешнего электрического поля в экспериментах, относящимся к измерению частот в атоме анти-водорода [73, 74], на данном этапе скорее несущественно [73]. Более того, измерения частот переходов в Н имеют погрешность порядка нескольких МГц [74] для Ly_a линии и долей МГц для сверхтонкого расщепления основного состояния [73]. Данное обстоятельство делает результаты, представленные выше, скорее ненаблюдаемыми в настоящее время. Однако, детальное сравнение спектров атомов Н и Н имеют чрезвычайно важное значение для верификации, например, СРТ-симметрии, а, следовательно, повышение экспериментальной точности является приоритетным. Таким образом, на основе того, что линейные по полю эффекты асимметрии спектральной линии приводят к противоположным искажениям профиля, можно заключить о важности данных результатов.

7.4. Атомы H и \overline{H} во внешнем магнитном поле

В этом разделе рассматриваются атомы H и H во внешнем поле. Основная цель здесь - исследовать возможные спектроскопические различия между атомами водорода и анти-водорода. Электрические и магнитные поля фактически применяются во всех экспериментах по синтезу атомов антиводорода [66, 70, 72, 223]. Поэтому необходимо изучить все спектроскопические свойства атома H для поиска вкладов в выражениях для расщепления энергетических уровней, сдвигов или вероятностей перехода, которые могут обеспечить различие между атомами H и H.

Гамильтониан атома водорода (анти-водорода) в однородных электрическом и магнитном внешних полях имеет вид:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \hat{\boldsymbol{d}}\boldsymbol{\mathcal{E}} - \hat{\boldsymbol{\mu}}\boldsymbol{\mathcal{H}}, \qquad (7.14)$$

где \hat{H}_0 - гамильтониан в отсутствие внешних полей, $\hat{d} = \mp |e|r$ - оператор электрического дипольного момента электрона (позитрона), r - радиусвектор легкой частицы, |e| - абсолютное значение заряда электрона, $\hat{\mu} = -\mu_0(\hat{L}+2\hat{S})$ - оператор магнитного дипольного момента, \hat{L} и \hat{S} - операторы орбитального и спинового момента электрона (позитрона), $\mu_0 = \mp |e|\hbar/2mc$ - магнетон Бора, m - масса легкой частицы и, наконец, \mathcal{E} и \mathcal{H} - напряженности внешнего электрического и магнитного полей. В выражении (7.14) квадратичными по магнитному полю вкладами пренебрегается. Гамильтониан \hat{H}_0 инвариантен относительно зарядового сопряжения, но полный гамильтониан \hat{H} нарушает эту симметрию. Это обстоятельство может привести к различиям в спектрах атомов H и H. Инетерес представляют вклады, линейно зависящие от напряженности поля, поскольку они пропорциональны заряду легких частиц, а, следовательно, противоположного знака для атомов водорода и анти-водорода.

Линейный эффект Штарка $\Delta E = -\mathcal{E}\langle \hat{d} \rangle$, где $\langle \hat{d} \rangle$ - усредненный оператор дипольного момента, запрещен из-за симметрии при комбинированном преобразовании зарядовой и пространственной четности (CP), или преобразовании обращения времени (T), если нарушение CPT отсутствует. Если $\langle \hat{d} \rangle \neq 0$, то должна существовать пропорциональность $\langle \hat{d} \rangle \sim \hat{S}$, но тогда она нарушает P и T-инвариантность. "Линейный" эффект Штарка в атоме водорода на самом деле является "псевдолинейным", поскольку расщепление между 2s и 2p состояниями во внешнем электрическом поле пропорционально $\langle 2s | \hat{d} \mathcal{E} | 2p \rangle = \sqrt{3} e a_0 \mathcal{E}$ (коэффициенту Штарка), где a_0 - радиус Бора. Этот эффект возникает, когда в формуле для сдвига энергии $\Delta E = \sqrt{\langle 2s | \hat{d} \mathcal{E} | 2p \rangle^2 + \Delta E_L^2}$ пренебрегается лэмбовским сдвигом ΔE_L . Так что ΔE одинаков для атомов H и \overline{H} .

Сравнение спектров атомов водорода и анти-водорода на основе эффекта Зеемана для Ly_{α} перехода было проведено в [39], см. также [235]. Зеемановское расщепление пропорционально μ_0 , которое имеет противоположные знаки для электронов и позитронов соответственно. Таким образом, схема расщепления одинакова для атомов Н и \overline{H} , но верхняя и нижняя зеемановские компоненты соответствуют разным значениям проекций углового момента электронов. Это наиболее простое спектроскопическое различие между атомами водорода и анти-водорода во внешних полях. Экспериментальное наблюдение этого эффекта требует только анализа поляризации излучения и зависит от количества доступных атомов **H**. Если направление испускания фотонов совпадает с направлением магнитного поля, то высокочастотная компонента зеемановского дублета имеет левую круговую поляризацию, а низкочастотная компонента - правую. Для атома H картина противоположная [39, 235].

Более сложная ситуация возникает при наличии внешних электрических и магнитных полей. Ссылаясь на работы [39, 103, 235] данный анализ далее не проводится. Стоит, однако, подчеркнуть, что случай параллельных полей (электрического и магнитного) делает возможным различить спектроскопически атомы водорода и анти-водорода. Как следствие в [127] было предложено использовать это явление для поиска анти-материи во Вселенной.

В частности, для этих целей может служить линия поглощения 21 см (СТС основного состояния) в атоме водорода, которая имеет особое значение при исследовании факторов и механизмов, ответственных за образование газопылевых облаков в межзвездной среде (МЗС), их роли в эволюции звезд и т.д. [236]. Достигнутая точность наблюдений дает детальное представление о профиле линии поглощения 21 см, см., например, [237]. В данном случае наиболее важным фактом является то, что зеемановское расщепление может быть разрешимо в таких наблюдениях [238].

Анализ поляризации излучения линии 21 см сводится к расчету матричного элемента, соответствующего переходу между сверхтонкими компонентами основного состояния в атоме водорода. Предполагая регистрацию излучения по направлению поля (детали см. в [127]), было найдено, что

$$\langle n \, 1 \, M_F | \boldsymbol{e}[\boldsymbol{k} \times \boldsymbol{\mu}] | n \, 0 \, 0 \rangle = -i \sqrt{\frac{2}{3}} (-1)^{M_F} \sum_r C_{1r \ 00}^{1-M_F} e_r \, k_0 \, \langle n \frac{1}{2} || \mu_1 || n \frac{1}{2} \rangle. (7.15)$$

Здесь матричный элемент от оператора магнитодипольного излучения [6] получен для произвольного значения главного квантового числа *n* и соот-

ветствует переходу из верхнего подуровня сверхтонкой структуры (с полным атомным моментом F = 1 и проекцией M_F) одноэлектронного состояния атома с орбитальным моментом равным нулю в подуровень с F' = 0 и, следовательно, $M_{F'} = 0$. Для основного состояния атома водорода данный переход изображен на Рис. 7.1 и соответствует линии 21 см.

Редуцированный матричный элемент (см. [179]) в (7.15), как и общий множитель, не имеют значения для дальнейшего анализа. Важным является то, что коэффициент Клебша-Гордана, $C_{1r\ 00}^{1-M_F}$, отличен от нуля при $r = -M_F \neq 0$. Круговая поляризация с $r = \pm 1$ (по и против часовой стрелки) возникает при переходе между нижними ($M_F = -1$) или верхними ($M_F = +1$) зеемановскими компонентами возбужденного (F = 1) и основного (F' = 0) сверхтонкими подуровнями. Линейная поляризация соответствует переходу $n10 \rightarrow n00$ (F = 1 $M_F = 0 \rightarrow F' = 0$ $M_{F'} = 0$) [5].

Учитывая что, расщепление в магнитном поле в низшем порядке определяется согласно $\mu_0 g M_F \mathcal{H}$, где g - фактор Ланде, M_F - магнитное квантовое число соответствующего состояния, значения M_F для нижней и верхней компонент зеемановского расщепления для атомов Н и $\bar{\mathrm{H}}$ имеют противоположные знаки при фиксированном направлении поля. Поэтому синее и красное крылья профиля линии имеют разную поляризацию для атомов водорода и анти-водорода с одним и тем же направлением поля, см. Рис. 7.1. Максимум эффекта соответствует случаю полностью разделенных зеемановских подуровней (неперекрывающиеся зеемановские линии поглощения/излучения).

Для типичных магнитных полей порядка 10 мкГс расстояние между сверхтонкими подуровнями существенно меньше ширины линии 21 см. Соответствующее зеемановское расщепление в поле 10⁻⁵ Гс составляет около 14 Гц, а ширина линии превышает кГц при температуре 100 К из-за большого доплеровского уширения. Поэтому для обнаружения эффекта Зеемана обычно выбирают линии поглощения, линии поглощения возникают в более холодном газе и, следовательно, обладают меньшей шириной. Слабость зеемановского расщепления в межзвездной среде позволяет наблюдать его только в тех областях, где межзвездные поля сильнее, а температура газа ниже средней, т.е. в достаточно плотных облаках. Таким



Рис. 7.1. Схема уровней основного $1s_{1/2}$ состояния в атомах водорода (H) и антиводорода ($\bar{\rm H}$). Уровни изображены с учетом спина ядра (полного момента F) и зеемановского расщепления, соответствующего расщеплению вырожденных подуровней с разными магнитными квантовыми числами M_F . Линейная поляризация, соответствующая переходу $F M_F = 10 \rightarrow F' M_{F'} = 00$, показана стрелкой вверх-вниз. Левая и правая круговые поляризации обозначены кружками со стрелками.

образом, наблюдение двух отдельных пиков профиля линии вообще говоря затруднительно. В то же время бывают ситуации, когда обнаружен эффект Зеемана в линии 21 см [239]. Поляризация сверхтонких подуровней является потенциально измеримой величиной, если напряженность магнитного поля такова, что величина разницы между левой и правой поляризациями превышает шум детектора [240]. Таким образом, для поиска атома антиводорода в принципе не обязательно наблюдать зеемановское расщепление; достаточно было бы зафиксировать разную поляризацию в синем и красном крыльях профиля линии 21 см.

Другим эффектом, который также позволяет различать атомы водорода и анти-водорода в магнитном поле, является вращение Фарадея, то есть вращение плоскости линейной поляризации вокруг направления распространения света. Центральная компонента профиля линии 21 см, соответствующая переходу $M_F = 0 \rightarrow M_{F'} = 0$ (см. Рис. 7.1), линейно поляризована, и плоскость этой поляризации вращается вокруг направления распространения света в противоположных направлениях для атомов H и $\overline{\rm H}$. Таким образом, эффект Фарадея на этой центральной линии также можно использовать для различения атомов H и $\overline{\rm H}$ при условии, что известно направление внешнего магнитного поля. Фарадеевское вращение часто используется для наблюдений поляризации и геометрии излучения пульсаров, см., например, [241].

Глава 8.

Одно- и двухфотонные переходы

Данная глава посвящена главным образом расчету одно- и двухфотонных переходов как в отсутствие (спонтанное излучение), так и при наличии внешнего электрического поля. Глава начинается с общих положений и относится к материалу изложенному в книге [242]. Тем не менее, ввиду использования последнего для проверки результатов, краткое изложение этих основ кажется уместным. Кроме того, в отличие от предыдущих разделов, здесь будет использовано иное также хорошо известное представление для мультипольного разложения волновой функции фотона, а именно мультипольные операторы для фотона будут представлены в терминах поляризации и волнового вектора фотона [243]. Данное представление является удобным для выявления влияния внешнего электрического поля на вероятности переходов и соответствующего сравнительного анализа спектров атомов Н и Н. По-мимо вычисления одно- и двухфотонных вероятностей переходов в приложении к атомам Н и Н, рассматриваются задачи связанные с астрофизическими исследованиями микроволнового космического излучения (МКИ).

8.1. Вероятности перехода в различных формах и калибровках

В этом разделе описаны различные калибровки в сочетании с разными "формами" вероятности однофотонного перехода [242]; используется атомная система единиц $\hbar = e = m = 1$.

Вероятность излучения фотона с определенным угловым моментом и четностью в произвольной калибровке может быть описана в первом порядке теории возмущений следующим образом:

$$W_{AA'} = \sum_{kq} \left[\left| \langle A' | \left(\boldsymbol{\alpha}_{e} \boldsymbol{A}_{\omega kq}(\boldsymbol{r}) \right) + \Phi_{\omega kq}(\boldsymbol{r}) | A \rangle \right|^{2} + \left| \langle A' | \boldsymbol{\alpha}_{m} \boldsymbol{A}_{\omega kq}(\boldsymbol{r}) | A \rangle \right|^{2} \right], (8.1)$$

где ${}_{\rm e}A_{\omega kq}$ и ${}_{\rm m}A_{\omega kq}$ обозначают электрический и магнитный векторные потенциалы, а $\Phi_{\omega kq}$ соответствует скалярному потенциалу; ω - частота фотона, k, q - импульс и проекция испущенного фотона. Состояния $|A\rangle$ и $\langle A'|$ являются стационарными решениями уравнения Дирака (волновыми функциями) с энергиями E_A и $E_{A'}$, а α обозначают матрицы Дирака.

В импульсном представлении эти потенциалы принимают вид:

$${}_{\mathrm{e}}\boldsymbol{A}_{\omega kq}(\boldsymbol{k}) = \frac{4\pi^{2}c^{3/2}}{\omega^{3/2}}\delta\left(k-\frac{\omega}{c}\right)\left({}_{\mathrm{e}}\boldsymbol{Y}_{kq}(\boldsymbol{n}_{\boldsymbol{k}}) + \mathcal{K}\boldsymbol{n}_{\boldsymbol{k}}Y_{kq}(\mathbf{n}_{\boldsymbol{k}})\right), \quad (8.2)$$

$${}_{\mathrm{m}}\boldsymbol{A}_{\omega kq}\left(\boldsymbol{k}\right) = \frac{4\pi^{2}c^{3/2}}{\omega^{3/2}}\delta\left(\boldsymbol{k}-\frac{\omega}{c}\right){}_{\mathrm{m}}\boldsymbol{Y}_{kq}(\boldsymbol{n}_{\boldsymbol{k}}), \qquad (8.3)$$

$$\Phi_{\omega kq}\left(\boldsymbol{k}\right) = \frac{4\pi^2 c^{3/2}}{\omega^{3/2}} \delta\left(\boldsymbol{k} - \frac{\omega}{c}\right) \mathcal{K} Y_{kq}(\boldsymbol{n_k}).$$
(8.4)

Здесь \boldsymbol{k} обозначает переменную в импульсном представлении, скорость c света выписана для наглядности. Функции ${}_{\mathrm{e}}\boldsymbol{Y}_{kq}$ и ${}_{\mathrm{m}}\boldsymbol{Y}_{kq}$ являются векторными сферическими гармониками электрического и магнитного типа соответственно, Y_{kq} - обычная сферическая гармоника, c - скорость света, \mathcal{K} - калибровочная константа. Потенциалы ${}_{\mathrm{e}}\boldsymbol{A}_{\omega kq}(\boldsymbol{k})$, ${}_{\mathrm{m}}\boldsymbol{A}_{\omega kq}(\boldsymbol{k})$ в импульсном представлении связаны с выражениями (2.12)-(2.14). С помощью Фурьепреобразования они могут быть определены в координатном представлении согласно (2.9)-(2.11), см., например, [244] (здесь и ниже $k = j_{\gamma}$).

Обычно используются две калибровки: так называемая кулоновская калибровка, соответствующая условию $\nabla \cdot \mathbf{A} = \nabla \cdot_{e} \mathbf{A} = 0$ и характеризуемая выбором калибровочного параметра $\mathcal{K} = 0$; другая удобная калибровка определяется значением параметра $\mathcal{K} = -\sqrt{\frac{k+1}{k}}$. Расчеты проводятся обычно в нескольких калибровках: "длины", $\mathcal{K} = 0$, и "скорости", $\mathcal{K} = -\sqrt{\frac{k+1}{k}}$), что служит независимой проверкой правильности результата (конечный ответ должен быть калибровочно инвариантным).

Однако, используя интегральное соотношение для волновых функций уравнения Дирака [2],

$$i \int \psi_{A'}^* \left(\boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{\nabla} \chi \right) \psi_A \, d^3 \tau = \frac{\omega}{c} \int \psi_{A'}^* \chi \psi_A \, d^3 \tau, \qquad (8.5)$$

где χ произвольная функция, для вероятности излучения Ek-фотона (см. детали в [242], а также [114]) можно получить два выражения:

$$W_{AA'}^{Ek} = \frac{2(k+1)\omega^3}{k(2k+1)c} \left| \langle A'|_r O_{-q}^{(k)} + \mathcal{K}\sqrt{\frac{k}{k+1}} \left[\frac{1}{\omega} O_{-q}^{(k)} - O_{-q}^{(k)} \right] |A\rangle \right|^2, \quad (8.6)$$

$$W_{AA'}^{Ek} = \frac{2(k+1)\omega}{k(2k+1)c} \left| \langle A'|_v O_{-q}^{(k)} + \mathcal{K}\sqrt{\frac{k}{k+1}} \left[{}_v O_{-q}^{(k)} - \omega_r O_{-q}^{(k)} \right] |A\rangle \right|^2, \quad (8.7)$$

где релятивистские операторы излучения определены согласно

$${}_{v}O_{-q}^{(k)} = -i\left[k\sqrt{\frac{2k+3}{k+1}}g_{k+1}(\omega r)\left[C^{(k+1)}\times\alpha^{(1)}\right]_{-q}^{(k)}(8.8)\right.$$
$$\left.+\sqrt{k(2k-1)}g_{k-1}(\omega r)\left[C^{(k-1)}\times\alpha^{(1)}\right]_{-q}^{(k)}\right],$$
$${}_{r}O_{-q}^{(k)} = -\frac{2k+1}{\omega}\left[g_{k}(\omega r)C_{-q}^{(k)} + i\sqrt{\frac{2k+3}{k+1}}\left[C^{(k+1)}\times\alpha^{(1)}\right]_{-q}^{(k)}g_{k+1}(\omega r)\right].(8.9)$$

Здесь использованы обозначения: $C_{-q}^{(k)} = \sqrt{\frac{4\pi}{2k+1}} Y_{k-q}$, $[a^{(s_1)} \times b^{(s_2)}]_q^{(s)}$ представляет собой тензорное произведение двух неприводимых сферических тензоров ранга s_1 и s_2 , связанных со сферическим тензором ранга s с компонентами q (обозначения сохранены согласно [242]). Второе выражение, (8.7), получено с помощью (8.5), а релятивистские операторы излучения (8.8), (8.9) в нерелятивистском пределе сводятся к хорошо известным выражениям для мультипольного разложения волновой функции фотона [244].

Таким образом, имеется две различные (эквивалентные) формы вероятности Ek-перехода (выражения (8.6) и (8.7)) вместе с произвольным выбором калибровочной константы \mathcal{K} . Выбирая $\mathcal{K} = 0$, оператор в (8.6) соответствует оператору перехода в форме "скорости", а при $\mathcal{K} = -\sqrt{\frac{k+1}{k}}$ он связан с оператором перехода в форме "длины". Однако, соответствие определенного выбора калибровки определенному типу операторов перехода не является единственным. С учетом выражения (8.7) можно указать, что выбор K = 0 преобразует оператор излучения в "длину", а $K = -\sqrt{\frac{k+1}{k}}$ в форму "скорости". Наконец, в качестве основного вывода этого раздела, можно заключить, что для верификации результата наряду с градинетным преобразованием оператора излучения может быть использовано преобразование (8.5) для волновой функции. Тем не менее, далее используется общепринятое отношение к данному вопросу: градинетное преобразование оператора излучения для проверки результатов расчетов вероятностей переходов.

8.2. Вероятность однофотонного излучения в приближении Паули

В данном разделе рассматривается процесс однофотонного излучения в одноэлектронном атоме. При этом для оператора излучения используется приближение Паули [243]. Используя "стандартный" полностью релятивистский формализм *S*-матрицы, амплитуда излучения может быть получена следующим образом. Согласно [2] процесс однофотонного излучения может быть описан с помощью *S*-матричного элемента

$$S_{AA'} = e \sqrt{\frac{4\pi}{2\omega}} \int d^4 x \overline{\psi}_{A'}(x) \hat{e}^{(\lambda)*}_{\mu} \gamma^{\mu} e^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{kr}-\omega t)} \psi_A(x), \qquad (8.10)$$

где использованы релятивистская система единиц и обозначения соответствующие предыдущим разделам. После интегрирования по временной переменной амплитуда излучения поперечного фотона сводится к (см. [106])

$$A_{AA'}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{e}) = \left(\sqrt{2\pi\omega}/e\right) U_{AA'} = \langle A' | \boldsymbol{e}\boldsymbol{\alpha} e^{-i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}} | A \rangle.$$
(8.11)

Выражение для вероятности перехода, проинтегрированное по углам вылета фотонов $\boldsymbol{\nu} = \boldsymbol{k}/\omega$ и просуммированное по поляризациям \boldsymbol{e} , задается выражением:

$$W_{AA'}^{(1\gamma)} = \frac{e^2 \omega_{AA'}}{2\pi} \sum_{e} \int d\nu |A_{AA'}(k, e)|^2.$$
 (8.12)

Здесь снято интегрирование по частоте за счет δ -функции, возникающей после интегрирования по временны́м переменным. Как следствие $\omega = |\mathbf{k}| = \omega_{AA'} = E_A - E_{A'}$ (подразумевается, что конечное состояние A' расположено ниже начального состояния A, а значит $\omega_{AA'} > 0$). Энергии $E_{A'}$ и E_A энергии Дирака атомных уровней A' и A, соответственно. Интеграл по $d\boldsymbol{\nu}$ происходит от фазового объема $d\mathbf{k} = \omega^2 d\omega d\boldsymbol{\nu}$. Для суммирования по поляризациям фотона \boldsymbol{e} может быть использовано соотношение:

$$\sum_{e} e_i e_k = \delta_{ik} - \nu_i \nu_k, \qquad (8.13)$$

а интеграл $\int d\boldsymbol{\nu}$ может быть вычислен с помощью

$$\int d\boldsymbol{\nu} = 4\pi, \qquad (8.14)$$

$$\int d\boldsymbol{\nu} \nu_i = \int d\boldsymbol{\nu} \nu_i \nu_k \nu_k = \int d\boldsymbol{\nu} \text{odd} = 0, \qquad \int d\boldsymbol{\nu} \nu_i \nu_k = \frac{4\pi}{3} \delta_{ik}, \qquad \int d\boldsymbol{\nu} \nu_i \nu_k \nu_j \nu_l = \frac{4\pi}{15} (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{il} \delta_{kj}).$$

Вычисление амплитуд поглощения (излучения) фотонов в приближении Паули (обозначено далее верхним индексом *P*) преобразует формулу (8.12) в

$$W_{AA'}^{(1\gamma)} = \frac{e^2 \omega_{AA'}}{2\pi} \sum_{\boldsymbol{e}} \int d\boldsymbol{\nu} \left| A_{AA'}^P(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{e}) \right|^2, \qquad (8.15)$$

где амплитуда $A^P_{A\,A'}({m k},{m e})$ (см. [243]) определена следующим выражением:

$$A_{AA'}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{e}) = \left(\left[(\boldsymbol{e}\boldsymbol{p}) + i[\boldsymbol{k} \times \boldsymbol{s}] \right] e^{-i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}} \right)_{AA'}.$$
(8.16)

Здесь $\boldsymbol{p} = -i\boldsymbol{\nabla}$ - нерелятивистский оператор импульса, $\boldsymbol{s} = \boldsymbol{\sigma}/2$ - оператор спина электрона, а $\boldsymbol{\sigma}$ - матрицы Паули. Скобки $(\dots)_{AA'}$ означают, что матричный элемент рассчитывается с использованием нерелятивистских волновых функций. В случае дипольного приближения $exp(-i\boldsymbol{kr}) \approx 1$, первое слагаемое матричного элемента (8.16) описывает излучение фотона Е1 (электрический дипольный фотон), а второе слагаемое соответствует магнитному переходу М1 (магнитный дипольный фотон). Возможные переходы между атомными уровнями определяются согласно правилам отбора [6].

Высшие мультиполи могут быть получены с учетом разложения экспоненты в (8.16). В частности, можно получить (см. [112, 114])

$$A^{P}(\boldsymbol{e},\boldsymbol{k}) = ((\boldsymbol{e}^{*}\boldsymbol{p}) + i(\boldsymbol{e}^{*}[\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{s}]))e^{-i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}} \quad (8.17)$$
$$\approx \frac{im}{\hbar}[H,\boldsymbol{e}^{*}\boldsymbol{r}] + \frac{m}{2\hbar}[H,(\boldsymbol{e}^{*}\boldsymbol{r})(\boldsymbol{k}\boldsymbol{r})] + \frac{i}{2}\left(\boldsymbol{e}^{*}[\boldsymbol{k}\times([\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}]+2\boldsymbol{s})]\right).$$

Первый член в этом выражении представляет собой электрический дипольный момент испускаемого фотона, второй - электрический квадрупольный момент, а последний член в (8.17) представляет магнитный дипольный момент испускаемого фотона, пропорцианальный оператору магнитного момента $\sim l+2s$, $l \equiv [r \times p]$. Для краткости опущены детали преобразований, а также следующие вклады.

Порядок величины соответствующих вкладов мультипольного излучения можно оценить стандартным образом. Так, для атомного электрона выполняется соотношение: $r \sim a_0 = 1/m\alpha Z$ (a_0 - радиус Бора, m - масса электрона, $\alpha \approx 1/137$ - постоянная тонкой структуры), характерная частота перехода $\omega \approx m(\alpha Z)^2$ и, следовательно, $kr \sim \alpha Z$. Усредняя (8.17) на волновых функциях согласно (8.16), действие оператора Гамильтона H(шляпки опущены для краткости) сводится к разнице энергий или (что тоже самое) к частоте перехода $\omega_{AA'}$.

В качестве примера, можно провести вычисление однофотонного 2*s* – 1*s* перехода в атоме водорода (см. [106, 243] и соответствующие ссылки). Данный переход электрона сопровождается излучением М1 фотона. Для расчета следует использовать, соответственно, третье слагаемое в (8.17), а волновую функцию в приближении Паули в виде:

$$\psi_{njlm}(\mathbf{r}) = \sum_{m_l, m_s} C_{lm_l \ sm_s}^{jm} R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\mathbf{n_r}) \chi_{m_s}.$$
(8.18)

Здесь атомное состояние задано с помощью следующего набора квантовых чисел: n - главное квантовое число, jm - полный угловой момент электрона и его проекции (соответственно) и орбитальный момент l. Поскольку рассматриваться будут одноэлектронные состояния, то электронный спин всегда равен 1/2. Спиновая часть волновой функции электрона задана с помощью χ_{m_s} , суммирование проводится по проекциям орбитального момента m_l и спина m_s . Амплитуда перехода равна

$$A_{2s_{1/2}m,1s_{1/2}m'}^{P} = -ik^{2} \langle m | \boldsymbol{e} [\boldsymbol{k} \times \boldsymbol{\sigma}] | m' \rangle R_{2s,1s}, \qquad (8.19)$$
$$R_{2s,1s} = \int_{0}^{\infty} dr \, r^{4} R_{2s}(r) R_{1s}(r).$$

Интеграл $R_{2s,1s}$ возникает с учетом релятивистской поправки к волновой функции (детали см. в [243]). С учетом оценок выше, конечным результатом является

$$W_{2s,1s}^{(1\gamma)} = \frac{1}{972} m\alpha (\alpha Z)^{10} = 2.8 \times 10^{-6} \text{ c}^{-1}.$$
(8.20)

В заключение раздела стоит отметить, что представление оператора излучения в виде (8.17) оказывается удобным при учете внешнего поля, поскольку позволяет довольно просто определять корреляцию направления вылетающего фотона ($\boldsymbol{k} = \omega \boldsymbol{\nu}$) с направлением поля. Последнее выражается скалярным произведением ($\boldsymbol{k}\boldsymbol{\mathcal{E}}$).

8.3. Двухфотонные вероятности распада 2s и 2p состояний в атоме водорода

Важным продолжением предыдущего раздела является расчет вероятностей двухфотонных процессов излучения. В частности, хорошо известно, что доминирующим каналом распада состояния 2s в атоме водорода (водородоподобных атомных системах) является E1E1 двухфотонное излучение (с испусканием двух электрических дипольных фотонов, см. (8.17)). Аккуратный расчет в рамках нерелятивистской теории был представлен в [245] (см. также соответствующие ссылки на более ранние работы). E1E1двухфотонное излучение сыграло огромную роль во многих исследованиях, включая область астрофизических исследований (см., например, [77, 79]) и лабораторных задач (см., например, [134, 182]). Расчеты двухфотонных мультипольных переходов, основанные на результатах разделов 3.2, 8.1, были проведены в работе [111], а аккуратный полностью релятивистский расчет был представлен в [110], где были рассчитаны вероятности двухфотонных E1E1, E1E2 и E1M1 переходов.

В нерелятивистском приближении, используя разложение для кулоновской функции Грина по собственным функциям (3.14), (3.15), вероятность процесса двухфотонного распада для произвольных электрических фотонов Ek и Ek' принимает вид:

$$dW_{AA'}^{EkEk'} = \frac{2\pi}{2l_A + 1} \sum_{qq'm_Am_{A'}} \left| \sum_{lm_l} \int \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 R_{n_{A'}l_{A'}}(r_1) Y_{l_{A'}m_{A'}}^*(\mathbf{n_{r_1}}) \times (8.21) \right|^{2} V^{Ek}(\mathbf{r}_1) g_l(\nu; r_1, r_2) Y_{lm_l}(\mathbf{n_{r_1}}) Y_{lm_l}^*(\mathbf{n_{r_2}}) V^{Ek'}(\mathbf{r}_2) R_{n_A l_A}(r_2) Y_{l_A m_A}(\mathbf{n_{r_2}}) + \\ \sum_{lm_l} \int \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 R_{n_{A'}l_{A'}}(r_1) Y_{l_{A'}m_{A'}}^*(\mathbf{n_{r_1}}) V^{Ek'}(\mathbf{r}_1) g_l(\nu'; r_1, r_2) Y_{lm_l}(\mathbf{n_{r_1}}) \\ \times Y_{lm_l}^*(\mathbf{n_{r_2}}) V^{Ek}(\mathbf{r}_2) R_{n_A l_A}(r_2) Y_{l_A m_A}(\mathbf{n_{r_2}}) \right|^2 d\omega,$$

где $V^{Ek}(\mathbf{r}) = \sqrt{(k+1)/k} (2\omega^{k+1/2}/(2k+1)!!)r^k Y_{k-q}$ представляет соответствующий фотонный мультиполь, записанный в калибровке $\mathcal{K} = -\sqrt{(k+1)/k}, \ \nu = Z/\sqrt{-2(E_A - \omega)}, \ \nu' = Z/\sqrt{-2(E_A - \omega')}, \ a$ частоты фотонов связаны согласно закону сохранения энергии соотношением $\omega' = E_A - E_{A'} - \omega$ [111, 112, 114].

Для случая E1E1 двухфотонного излучения все вычисления могут быть проведены аналитически, кроме конечного интегрирования по частоте ω . Окончательный ответ может быть представлен в виде:

$$W_{2s,1s}^{E1E1} = \frac{1}{2} \int_{0}^{\omega_0} dW_{2s,1s}^{E1E1}(\omega) = 0.00131823 \,(\alpha Z)^6 \,\text{a.u.}, \tag{8.22}$$
$$W_{2s,1s}^{E1E1} = 8.22932 \,\,\text{c}^{-1} \,(Z=1),$$

где $\omega_0 = E_{2s} - E_{1s}$. В выражении (8.22) указана Z-зависимость вероятности перехода $W_{2s,1s}^{E1E1}$. Численное значение (8.22) превосходно совпадает с наиболее точным результатом [246].

8.3.1. Вероятность двухфотонного *E*1*E*2 распада для состояния 2*p*

Выражение (8.21) является общим для произвольных двухфотонных переходов. Результат для E1E2 (диполь-квадрупольное двухфотонное излучение) перехода может быть получен следующим образом. Задав состояния A = 2p, A' = 1s и учитывая, что в этом случае угловой момент фотона может принимать значения k = 1, 2, за счет перестановок фотонов в амплитуде излучения возникает четыре разных слагаемых. После углового интегрирования и суммирования по проекциям, см. [114], получается

$$dW_{2p,1s}^{E1E2}(\omega) = \frac{2^2 \omega^3 \omega'^3}{3^3 5^2 \pi} \left[\omega'^2 \left| I_1(\omega') + I_2(\omega) \right|^2 + \omega^2 \left| I_1(\omega) + I_2(\omega') \right|^2 \right] d\omega, \quad (8.23)$$

где

$$I_1(\omega) = \frac{1}{\sqrt{6}} \int_0^\infty \int_0^\infty dr_1 dr_2 r_1^3 r_2^5 e^{-r_1 - \frac{r_2}{2}} g_1(E_A - \omega; r_1, r_2), \qquad (8.24)$$

$$I_2(\omega) = \frac{1}{\sqrt{6}} \int_0^\infty \int_0^\infty dr_1 dr_2 r_1^4 r_2^4 e^{-r_1 - \frac{r_2}{2}} g_2(E_A - \omega; r_1, r_2), \qquad (8.25)$$

Подставляя вновь выражение для радиальной части кулоновской функции Грина (3.15), радиальные интегралы в (8.24) и (8.25) могут быть вычислены аналитически.

В результате окончательный ответ получается равным

$$W_{2p,1s}^{E1E2} = \frac{1}{2} \int_{0}^{\omega_0} dW_{2p,1s}^{E1E2} = 1.98896 \times 10^{-5} \,(\alpha Z)^8 \,\text{a.u.}, \tag{8.26}$$
$$W_{2p,1s}^{E1E2} = 6.61197 \times 10^{-6} \,\text{c}^{-1} \,(Z=1),$$

где $\omega_0 = E_{2p} - E_{1s}$ и указана зависимость от заряда ядра Z. Сравнение с полностью релятивистским расчетом дает относительное отклонение в калибровке "длины" на уровне 0.1% [110].

Расчет двухфотонного E1E2 распада в нерелятивистской форме "скорости" более сложен. Теперь калибровочную константу следует выбрать либо $K = -\sqrt{\frac{k+1}{k}}$ для формы (8.7), либо K = 0 для формы (8.6) [242].

Выбор K = 0 для (8.7) с подстановкой соответствующего потенциала в (8.21), после интегрирования по угловым переменным и суммирования по проекциям, приводит к

$$dW_{2p,1s}^{E1E2}(\omega) = \frac{2^4 d\omega}{3^3 5^2 \pi} \omega' \omega \left[\omega^2 \left| I_1(\omega) + I_2(\omega') \right|^2 + \omega'^2 \left| I_1(\omega') + I_2(\omega) \right|^2 \right], (8.27)$$

$$I_{1}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{6}} \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{\infty} dr dr' r^{2} r'^{3} e^{-r - \frac{r'}{2}} \left[1 - \frac{9i}{2} - \frac{r'}{2} \right] \left[\frac{\partial}{\partial r} - \frac{2i}{r} \right] g_{1}(\nu; r, r'), \quad (8.28)$$
$$I_{2}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{6}} \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{\infty} dr dr' r^{3} r'^{2} e^{-r - \frac{r'}{2}} \left[1 - 5i - \frac{r'}{2} \right] \left[\frac{\partial}{\partial r} - \frac{3i}{r} \right] g_{2}(\nu; r, r'). \quad (8.29)$$

Здесь $\nu = Z/\sqrt{-2(E_{2p} - \omega)}, \nu' = Z/\sqrt{-2(E_{2p} - \omega')}$ и $\omega + \omega' = E_A - E_{A'}$. Интегрирование по r и r' приводит к довольно длинному аналитическому выражению. Наконец, окончательное интегрирование по частоте дает

$$W_{2p,1s}^{E1E2} = \frac{1}{2} \int_{0}^{\omega_0} dW_{2p,1s}^{E1E2}(\omega) = 3.6896 \times 10^{-6} \,(\alpha Z)^8 \,\text{a.u.}$$
(8.30)
$$W_{2p1s}^{E1E2} \simeq 1.227 \times 10^{-6} \,\,\text{c}^{-1} \,(Z=1),$$

Значение (8.30) отличается от результата, полученного в рамках полностью релятивистского расчета в калибровке "скорости" [110] примерно на 0.5%. Это расхождение превышает релятивистские поправки (относительного порядка α^2) и может быть объяснено чисто численными неопределенностями. Самым важным заключением, однако, является сравнение значений (8.30) и (8.26). Калибровочная инвариантность результата восстанавливается лишь с учетом отрицательного спектра энергий при суммировании по промежуточным состояниям в (8.21). В отличие от формы "длины" вклад отрицательной энергии уже не является пренебрежимо малым при использовании формы "скорости". Вклад (8.30) не совпадает с уравнением (8.26) и представляет собой только вклад положительной энергии в $W_{2p,1s}^{E1E2}$ в калибровке "скорости". Поэтому значение 1.227 × 10⁻⁶ следует сравнивать с вкладом положительной энергии, рассчитанным в [110]. В нерелятивист-ском пределе вклад отрицательной энергии в калибровке "скорости" для малых значений Z был оценен аналитически в [110].

8.3.2. Вклад отрицательного спектра энергий в вероятности *E*1*M*1 и *E*1*E*2 2*p*-1*s* переходов в калибровке "скорости" для малых значений *Z*

В этом разделе получено явное выражение для отрицательноэнергетического вклада в E1M1 и E1E2 вероятности 2p - 1s переходов в калибровке "скорости" для малых значений Z. Этот вывод поможет быть использован для проверки справедливости численных нерелятивистских расчетов. Вывод проводится с другим набором характеристик фотона, а именно импульс фотона k и вектор поляризации e. Не различая E1M1 и E1E2 переходы приведенная ниже оценка может быть рассмотрена как поправка к доминирующему дипольному переходу.

В качестве начальной формулы можно использовать (2.1) с соответствующей заменой поглощенного фотона на излучаемый (сопряженный с математической точки зрения). Все аналитические вычисления повторяются в полной аналогии с амплитудой рассеяния. Важным следствием в данном случае является наличие суммирования по промежуточным состояниям в амплитуде (2.6), включающим отрицательный спектр энергии (см. выражения для пропагатора атомного электрона (2.3). Тогда, сохраняя лишь сумму только по состояниям с отрицательной энергией в выражении для амплитуды процесса, соответствующие знаменатели энергии в нерелятивистском пределе можно заменить на -2m, пренебрегая также частотами фотонов, ограниченными величиной $\omega_{if} = E_A - E_{A'}$ (равной в случае (8.30) разнице энергий $E_{2p} - E_{1s}$) [2]. Также разложим в ряд экспоненты, входящие в волновую функцию фотона (2.5), заменив одну из них на единицу и оставляя только следующий член разложения в другой. После суммирования по поляризациям и интегрирования по направлениям излученных фотонов возникнет поправка ведущего порядка. Вклад отрицательного спектра в вероятность излучения может быть представлен с помощью следующих выражений (в релятивистских единицах $e^4 = \alpha^2$):

$$W_{if}^{(-)} = \frac{\alpha^2}{(2\pi)^3} \sum_{\boldsymbol{e},\boldsymbol{e}'} \int d\boldsymbol{\nu} \int d\boldsymbol{\nu}' \left| U_{if}^{(-)} \right|^2, \qquad (8.31)$$
$$U_{if}^{(-)} \approx -\frac{\mathrm{i}}{2m} \sum_{n^{(-)}} \left[\langle i | (\boldsymbol{e}\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}) | n^{(-)} \rangle \langle n^{(-)} | (\boldsymbol{e}'\boldsymbol{\sigma}) | f \rangle + \langle i | (\boldsymbol{e}\boldsymbol{\sigma}) | n^{(-)} \rangle \langle n^{(-)} | (\boldsymbol{e}'\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{k}'\boldsymbol{r}) | f \rangle + [\boldsymbol{e}, \boldsymbol{k} \leftrightarrow \boldsymbol{e}', \boldsymbol{k}'] \right].$$

Выражение (8.31) соответствует калибровке "скорости". Здесь σ - матрицы Паули, а суммирование ведется по множеству решений уравнения Дирака для электрона в поле ядра с отрицательной энергией. В нерелятивистском пределе этот набор становится полным набором решений уравнения Шрёдингера для позитрона в поле ядра. Тогда используя условие полноты

$$U_{if}^{(-)} = -i \frac{(\boldsymbol{e}\boldsymbol{e}')}{m} \langle i | (\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}) + (\boldsymbol{k}'\boldsymbol{r}) | f \rangle.$$
(8.32)

Суммирование по поляризациям и интегрирование по направлениям вылета фотонов проводится согласно выражениеям (8.13), (8.14).

В результате можно прийти к следующему:

$$W_{if}^{(-)} = \frac{4\alpha^2}{9\pi m^2} |\langle i|\boldsymbol{r}|f\rangle|^2 \int_0^{\omega_{if}} d\omega \,\omega(\omega_{if} - \omega \left(\omega^2 + (\omega_{if} - \omega)^2\right)) \qquad (8.33)$$
$$= \frac{2\alpha^2 \omega_{if}^5}{45\pi m^2} |\langle i|\boldsymbol{r}|f\rangle|^2.$$

Порядок величины и масштабирующий фактор для 2p-1s двухфотонного перехода в калибровке "скорости" задаются соотношением

$$W_{2p,1s}^{E1M1(-)} + W_{2p,1s}^{E1E2(-)} = 5.625 \times 10^{-5} (\alpha Z)^8$$
 a.u. (8.34)

Этот результат можно сравнить со значением, полученным в рамках пол-

ностью релятивистского подхода [110] (также в калибровке "скорости"):

$$W_{2p,1s}^{E1M1(-)} + W_{2p,1s}^{E1E2(-)} = 5.806 \times 10^{-5} (\alpha Z)^8$$
 a.u. (8.35)

Расхождение (3.1%) превышает ожидаемое из-за релятивистских поправок (~ α² для Z = 1). Однако, в качестве оценки значение (8.34) весьма удовлетворительно, показывая необходимость учета отрицательного спектра энергий в калибровке "скорости" в расчетах двухфотонных вероятностей переходов с участием "высших" мультиполей. Для E1E1 переходов вклад отрицательного спектра энергий остается пренебрежимо малым как в калибровке "длины", так и "скорости", см. [110].

8.3.3. Вероятность двухфотонного *E*1*M*1 распада для состояния 2*p*

Для двухфотонного *E1M1* перехода вероятность излучения может быть выражена следующим образом:

$$dW_{AA'}^{E1M1} = \sum_{M_E M_M m_A m_{A'}} \left| \sum_n \frac{\langle A' | V^{E1}(\omega) | n \rangle \langle n | V^{M1}(\omega') | A \rangle}{E_n - E_A + \omega} + \frac{\langle A' | V^{E1}(\omega) | n \rangle \langle n | V^{M1}(\omega) | A \rangle}{E_n - E_A + \omega'} + \frac{\langle A' | V^{E1}(\omega') | n \rangle \langle n | V^{M1}(\omega) | A \rangle}{E_n - E_A + \omega'} + \frac{\langle A' | V^{M1}(\omega) | n \rangle \langle n | V^{E1}(\omega') | A \rangle}{E_n - E_A + \omega} \right|^2 d\omega.$$

$$(8.36)$$

Здесь $V^{E1}(\omega) = \frac{4}{3}\omega^{3/2}rY_{1M_E}, V^{M1}(\omega) = \sqrt{\frac{4}{3}}\mu_0\omega^{3/2}(j_{1M_V} + s_{1M_M}), Y_{1M}$ - сферическая функция с единичным моментом и проекцией $M, \mu_0 = \frac{\alpha}{2}$ - магнетон Бора, j_{1M_M} и s_{1M_M} - сферические компоненты полного углового и спинового моментов электрона, соответственно. Данные потенциалы относятся к нерелятивисткому пределу, полученному в калибровке "длины". Поскольку потенциал магнитного фотона включает в себя полный угловой момент и оператор спина, следует использовать волновые функции с набором квантовых чисел nlsjm, см. (8.18).

Стоит отметить, что матричные элементы магнитного момента "вырезают" из суммирования по промежуточным состояниям только n = Aили A' по условию ортогональности радиальных частей волновых функций [179]. После выполнения углового интегрирования и суммирования по всем проекциям,

$$dW_{2p,1s}^{E1M1}(\omega) = \frac{2^8 \mu_0^2}{\pi} \left(\frac{2}{3}\right)^{12} \omega \omega'^3 d\omega$$
(8.37)

и, следовательно,

$$W_{2p,1s}^{E1M1} = \frac{1}{2} \int_{0}^{3/8} dW_{2p,1s}^{E1M1}(\omega) = \frac{2^5}{\pi} \left(\frac{2}{3}\right)^{12} \alpha^8 \int_{0}^{3/8} \omega \left(\frac{3}{8} - \omega\right)^3 d\omega.$$
(8.38)

Наконец, окончательный результат равен

$$W_{2p,1s}^{E1M1} = \frac{2^5}{\pi} \left(\frac{2}{3}\right)^{12} \frac{243}{655360} (\alpha Z)^8 \text{ a.u.} = 9.6769 \times 10^{-6} \text{ c}^{-1} (Z=1).$$
(8.39)

Снова указана Z-зависимость вероятности перехода $W_{2p,1s}^{E1M1}$. Сравнение с результатом полностью релятивистского расчета [110] выявляет расхождение около 0.1%.

Вычисления вероятностей двухфотонных переходов имеют непосредственное отношение к вычислению, например, НР поправок (см. предыдущие разделы). Теория и соответствующие численные расчеты в рамках полностью релятивистского подхода для веротностей трехфотонного излучения была представлена в работе [123] (опущена для краткости изложения). Многофотонные процессы излучения (поглощения) также могут служить для проверки фундаментальных свойств бозонов. Например, два электрических дипольных фотона не переносят момент равный единице (теорема Ландау-Янга), см. [122–125]. Отдельно стоит отметить результат работы [117], который также может быть использован для проверки численных результатов. Опуская детали вычислений, связанных главным образом с угловой алгеброй, была установлена связь вероятностей многофотонных переходов с парциальными каналами распада тонких (сверхтонких) подуровней данного состояния. Были получены выражения аналогичные однофотонным переходам, см., например, [6]. Представленная здесь теория будет далее использоваться для выяснения ряда вопросов, связанных с астрофизическими исследованиями МКИ и для сравнения спектральных характеристик атомов водорода и анти-водорода.

8.3.4. Двухфотонный распад высоковозбужденных состояний в водороде

Недавние достижения в наблюдениях температурной анизотропии космического микроволнового фона (МКИ) и его поляризации, см. [247,248], привели к пересмотрению деталей теоретического описания космологической истории рекомбинации водорода. В свою очередь, соответствующий анализ с необходимостью требует корректного знания процессов двухфотонного распада водорода (см., например, [77,79,164] и мн.др.). Например, принципиальную значимость имеет E1E1 двухфотонный распад метастабильного 2s уровня в атоме водорода [77,79], поскольку это доминирующий канал распада. Двухфотонное излучение характерно тем, что частоты́ отдельного фотона (из имеющихся двух) не достаточно для возбуждения соседнего атома (поглощение в крыле профиля поглощения подавлено) и, таким образом, излучение "отрывается" от вещества, приводя к окончательной рекомбинации атомов.

В рамках изучения одно- и двухфотонных процессов излучения в астрофизическом контексте в данной диссертации рассмотрено несколько вопросов. Первый будет рассмотрен в следующем разделе и относится к возможности разделения двухфотонного излучения высоковозбужденных состояний на "чистое", приводящее к непосредственному "отрыву" излучения, и каскадное. Каскадное (резонансное) излучение эффективно перепоглащается, а механизим "отрыва" такого излучения детально описан, например, в [165, 167, 168]. Аккуратное отделение "чистого" излучения от каскадного имеет принципиальное значение и требует использования различных механизмов "выхода" излучения.

Другой вопрос может быть сформулирован следующим образом. В ра-

ботах [76,99] для аккуратного описания космологической эпохи рекомбинации ранней Вселенной была подчеркнута важность учета по возможности всего спектра атомных состояний. Ввиду очевидных затруднений использования полного набора состояний атома в теории переноса излучения становится необходимым определить допустимое ограничение их числа. Это касается не только однофотонных переходов, но и других возможных (двух-, трех- и т.п.) каналов распада. Следует подчеркнуть, что не смотря на довольно маленькую вероятность, двухфотонные распады 2p уровня, рассмотренные в предыдщих разделах, можно отнести к "чистому" излучению. Таким образом, исследование поведения "чистого" излучения с ростом главного квантового числа возбужденного состояния может дать соответствующий ответ. Исследование было представлено в работе [83], где было определено, что фактически любые двухфотонные переходы (E1E1, E1E2, E1M1, а также E2E2, M1M1, E1M2) для ns, np состояний убывают как $1/n^3$. Стоить отметить, что, как и для однофотонных переходов, такое асимптотическое поведение для некоторых переходов было получено аналитически. Тем самым, можно с высокой точностью определить число необходимых для учета состояний.

Другой целью работы [83] служил поиск эффектов за пределами дипольного приближения (случаев когда обычно используемое дипольное приближение является недостаточным) в астрофизическом контексте. Для этого проводились полностью релятивистские расчеты. Калибровочная инвариантность служила проверкой расчетов. Нерелятивистские расчеты проводились в калибровке "длины" и непосредственно сравнивались с результатами релятивистского расчета, полученными в калибровках "длины" и "скорости" (калибровочно инвариантными).

Дипольное приближение можно охарактеризовать учетом только первого члена в разложении волновой функции фотона, когда аргумент мал (см. выше). Однако для высоковозбужденных состояний аргумент волновой функции фотона растет с увеличением главного квантового числа, поскольку $\omega_{nl,1s}\langle r \rangle \sim n^2$ ($\langle r \rangle$ среднее значение радиуса орбиты в состоянии n). Поиск эффектов, выходящих за рамки нерелятивистского дипольного приближения, заключался в сопоставлении вкладов нерелятивистского и релятивистского оператора излучения дипольного фотона. Также предполагалось, что при больших значениях аргумента функции Бесселя последующие члены разложения, за пределами дипольного приближения, могут быть сравнимы с первым. Вероятности E2E2 и M1M1 переходов представляют собой следующий порядок такого приближения для процессов двухфотонного ns/nd-1s излучения. Дабы избежать вопроса о каскадном излучении, расчеты проводились на частоте равной половине энергетического интервала. Результатом исследования является то, что дипольное приближение довольно хорошо работает и для $ns/np/nd \rightarrow 1s+2\gamma$ переходов в атоме водорода. По очевидным причинам с ростом зарядового числа ядра данное обстоятельство нарушается, см. [110, 123].

8.4. Двухфотонный распад возбужденных уровней в водороде: неоднозначность разделения на каскадное и "чистое" двухфотонное излучение

Существует принципиальное различие между распадом уровней высоко возбужденных ns (аналогично nd, n > 2) и 2s уровней, которое состоит в наличии каскадных переходов как доминирующих каналов распада. Для уровня 2s каскадные переходы отсутствуют. Поскольку каскадные фотоны могут эффективно перепоглощаться, возникает проблема выделения "чистого" двухфотонного вклада от каскадного вклада. Следует также учитывать интерференцию между двумя каналами распада, т.е. произведение амплитуд "чистого" и каскадного двухфотонного распада.

Аналогичная проблема возникла гораздо раньше в рамках теории двухэлектронных МЗИ, см. [249] и соответствующие ссылки. Как правило, "чистый" двухфотонный вклад выделяют путем вычитания лоренцевского контура в качестве каскадного вклада из общего распределения частот двухфотонного распада, см., например, работы [250, 251]. Существование интерференционных членов было признано в [250, 251], но лишь приблизительно включено в лоренцеву аппроксимацию как асимметричное отклонение контура линии. Строгий КЭД подход для оценки ширины двухфотонного распада с наличием каскадов для МЗИ был выполнен в [249] (см. также [8]). Этот подход был основан на стандартной оценке ширины как суммы вероятностей перехода на нижние уровни. В случае каскадов интеграл по частотному распределению испускаемых фотонов становится расходящимся из-за сингулярных членов, соответствующих каскадным резонансам. Чтобы избежать такой сингулярности, в [249] была выполнена регуляризация в соответствии с теорией, изложенной в [85]. В [250,251] ширины уровней в сингулярных знаменателях энергии были также учтены, хотя и сугубо феноменолически. Аналогичным образом, т.е. путем введения ширины уровней в сингулярные знаменатели энергии, совсем недавно в астрофизических работах [164,252] был оценен двухфотонный распад возбужденных уровней *ns* и *nd* в водороде.

В [249] впервые была выявлена неоднозначность разделения "чистого" двухфотонного распада и каскадов для МЗИ. В частности, было показано, что интерференционные члены могут вносить существенный вклад в полную вероятность распада. В [164, 252] неоднозначность разделения "чистого" двухфотонного распада не была ни подчеркнута, ни продемонстрирована явно. Этому будет посвящен данный раздел, в котором внимание уделяется 3s - 1s двухфотонному распаду, см. [82], а также [118]. Численные результаты для 3s-уровня в водороде согласуются с недавними расчетами, выполненными в [164]. Однако, сильно расходятся со значением, полученными в [253]. Результат [253] следует из "альтернативного" подхода к оценке двухфотонного распада, разработанного в [254-256]. Этот "альтернативный" подход основан на оценке мнимой части двухпетлевого вклада в лэмбовский сдвиг для 3s-уровня, см. основания для такого подхода в [88, 257]. В [254–256] утверждалось, что сингулярность в интегрировании по распределению частот фотонов для двухфотонного распада отсутствует и, таким образом, конечный интеграл представляет собой непосредственно вероятность "чистого" двухфотонного распада. Далее будет показано, что на самом деле, вычисленная в [253] величина имеет совершенно иную интерпретацию и должна иметь смысл радиационной поправки к полной

ширине возбужденного уровня [121].

Также, для убеждения в правильности вывода о неразделимости двухфотонного излучения при наличии каскадов, ниже будет представлен анализ вывода ширины двухфотонного распада через мнимую часть лэмбовского сдвига второго порядка. Будет использовано следствие "оптической теоремы" для адиабатической S-матрицы [89]. Результаты анализа показывают, что оценка ширины двухфотонного распада через мнимую часть лэмбовского сдвига дает те же выражения, что и стандартное описание КЭД путем суммирования вероятностей перехода (см. выше, и, например, [117]). Интегрирование по частоте испускаемых фотонов для двухфотонного распада с каскадами остается расходящимся и требует введения ширин уровней в сингулярных знаменателях энергии [85]. Будут представлены вычисления с использованием обоих методов (суммирование вероятностей перехода и оценка мнимой части лэмбовского сдвига), а численные расчеты будут проведены для атома водорода. Полученные результаты наглядно демонстрируют неоднозначность разделения "чистых" двухфотонных и каскадных вкладов с точностью, превышающей необходимую для современных астрофизических исследований (последняя ~ 1%).

8.4.1. Двухфотонный распад с наличием каскада: 3s - 2p - 1s

Выражение для двухфотонного E1E1 распада 2s состояния хорошо известно и может быть легко найдено в научной литературе, см., например, [101,244]. Поскольку вывод выражения в рамках формализма S-матрицы для ns (n > 2) полностью идентичен, для краткости изложения можно сразу же записать

$$dW_{ns,1s}(\omega) = \frac{8\omega^3(\omega_0 - \omega)^3}{27\pi} e^4 |S_{1s,ns}(\omega) + S_{1s,ns}(\omega_0 - \omega)|^2 d\omega, \quad (8.40)$$

$$S_{1s,ns}(\omega) = \sum_{n'p} \frac{\langle R_{1s}|r|R_{n'p}\rangle\langle R_{n'p}|r|R_{ns}\rangle}{E_{n'p} - E_{ns} + \omega}, \qquad (8.41)$$

$$\langle R_{n'l'} | r | R_{nl} \rangle = \int_{0}^{\infty} r^3 R_{n'l'}(r) R_{nl}(r) dr,$$
 (8.42)

где $\omega_0 = E_{ns} - E_{1s}$, $R_{nl}(r)$ - радиальная часть нерелятивистской волновой функции водорода, а E_{nl} - соответствующая энергия уровня nl. Выражение (8.40) записано в нерелятивистском пределе в калибровке "длины".

Полная вероятность двухфотонного перехода может быть получена путем интегрирования в частотном интервале

$$W_{ns,1s} = \frac{1}{2} \int_{0}^{\omega_0} dW_{ns,1s}(\omega).$$
(8.43)

Предел интегрирования по частоте обусловлен законом сохранения энергии. В случае n = 2 каскадные переходы отсутствуют, распределение частот (8.40) не является сингулярным, и интеграл (8.43) сходится.

В случае наличия каскадных переходов (n > 2) некоторые члены в (8.41) становятся сингулярными, и интеграл (8.43) расходится. Например, фиксируя n = 3 в (8.40) возникает расходимость при n' = 2. Для слагаемого выписанного как (8.41), расходимость соответствует переходу $3s \rightarrow 2p$, для второго слагаемого в (8.40) переходу $2p \rightarrow 1s$. Это расхождение имеет физическое происхождение: испускаемый фотон соответствует резонансу. Так что расходимости можно избежать, только вводя ширину этого резонанса. Эта ситуация изучалась в [249] для МЗИ. Тот же рецепт можно использовать и в случае атома водорода. Следуя предписаниям, данным в предыдущих разделах, следует выделить резонансные члены (соответствующие каскадам) в сумме по промежуточным состояниям выражения (8.40), а затем применить процедуру регуляризации [85]. Практически это приво-

дит к появлению ширин энергетических уровней в знаменателях энергии. Тогда возникают профили Лоренца для резонансных членов в выражении для вероятности. Однако профиль Лоренца справедлив только вблизи резонанса и не может быть продлен слишком далеко от значения резонансной частоты. Как и для любых многоканальных процессов, такое разделение является приближенной процедурой из-за существования интерференционных членов.

Согласно этому, интегрирование по частотному интервалу $[0, \omega_0]$ в (8.43) следует разбить на несколько подинтервалов. В случае частотного распределения для двухфотонного распада 3*s* уровня удобно ввести 5 подинтервалов, см. Рис. 8.1. Первый интервал (**I**) простирается от $\omega = 0$ до нижней



Рис. 8.1. Распределение частот $dW_{3s,1s}^{(2\gamma)}/d\omega$ для полного двухфотонного перехода $3s \rightarrow 1s + 2\gamma$, включая каскадный и "чистый" двухфотонный переходы как функции частоты (в атомных единицах). Значения $dW_{3s;1s}^{(2\gamma)}/d\omega$, разделенные на α^6 (α - постоянная тонкой структуры), представлены в зависимости от частоты в интервале $[0, \omega_0], \omega_0 = E_{3s} - E_{1s}$. Границы частотных интервалов **I-V** обозначены вертикальными линиями.

границы второго интервала (II). В последнем заключено значение резонансной частоты $\omega_1 = E_{3s} - E_{2p}$. В интервале (II) резонансный член n = 2в (8.41) следует вычесть из суммы по промежуточным состояниям и заменить членом с измененным энергетическим знаменателем. Этот модифицированный знаменатель равен $E_{2p} - E_{3s} + \omega - \frac{i}{2}\Gamma$, где $\Gamma = \Gamma_{2p} + \Gamma_{3s}$. Третий интервал (III) простирается от верхней границы интервала (II) до нижней границы интервала (IV), причем последний содержит еще одно значение резонансной частоты $\omega_2 = E_{2p} - E_{1s}$. Внутри интервала (IV) снова резонансный член n = 2 в (8.41) следует заменить членом с измененным знаменателем $E_{2p} - E_{1s} - \omega - \frac{i}{2}\Gamma_{2p}$. Наконец, пятый интервал (V) простирается от верхней границы интервала (IV) до максимального значения частоты ω_0 . Стоит отметить, что распределение частот $dW_{3s,1s}(\omega)$ симметрично относительно $\omega = \omega_0/2$ с точностью 1% (асимметрия обусловлена разницей между $\Gamma = \Gamma_{2p} + \Gamma_{2s}$ и Γ_{2p} соответственно). Обсуждение выбора размера интервалов (II) и (IV), определяющего и размеры остальных интервалов, а также дальнейших приближений, дано ниже.

Сохраняя в (8.41) только резонансный член во втором и четвертом частотных интервалах, можно вычислить каскадный вклад в полную скорость двухфотонного распада 3s уровня согласно выражению аналогичному (8.43). Взяв отношение к полной ширине 3s уровня Γ_{3s} , получим абсолютную вероятность или коэффициент ветвления $W_{3s,1s}^{(cas)}/\Gamma_{3s} \equiv b_{3s-2p-1s}^{(cas)}$ для каскадного перехода. Вклады в $b_{3s-2p-1s}^{(cas)}$ от интервалов (I), (III), (V) считаются равными нулю. Тогда

$$W_{3s,1s}^{(\cos 1\gamma)} = \frac{4}{27\pi} \int_{(\mathbf{II})} \omega^{3} \omega'^{3} \left| \frac{\langle R_{3s}(r) | r | R_{2p}(r) \rangle \langle R_{2p}(r') | r' | R_{1s}(r') \rangle}{E_{2p} - E_{3s} + \omega - \frac{i}{2}\Gamma} \right|^{2} d\omega \quad (8.44)$$
$$+ \frac{4}{27\pi} \int_{(\mathbf{IV})} \omega^{3} \omega'^{3} \left| \frac{\langle R_{3s}(r) | r | R_{2p}(r) \rangle \langle R_{2p}(r') | r' | R_{1s}(r') \rangle}{E_{2p} - E_{1s} - \omega - \frac{i}{2}\Gamma_{2p}} \right|^{2} d\omega,$$

 $\omega_0 - \omega \equiv \omega'.$

Соответственно, "чистые" вероятности двухфотонного распада внутри каждого интервала, Рис. 8.1, выглядят следующим образом:

$$dW_{3s,1s}^{(\text{pure}2\gamma)} = \frac{4}{27\pi} \omega^3 \omega'^3 \left| S_{1s;3s}^{(2p)}(\omega) + S_{1s;3s}(\omega') \right|^2 d\omega, \ \omega \in \mathbf{II}$$
(8.45)

$$dW_{3s,1s}^{(\text{pure}2\gamma)} = \frac{4}{27\pi} \omega^3 \omega'^3 \left| S_{1s;3s}(\omega) + S_{1s;3s}^{(2p)}(\omega') \right|^2 d\omega, \ \omega \in \mathbf{IV}$$
(8.46)

$$dW_{3s;1s}^{(\text{pure}2\gamma)} = \frac{4}{27\pi} \omega^3 \omega'^3 \left| S_{1s;3s}(\omega) + S_{1s;3s}(\omega') \right|^2 d\omega, \ \omega \in \mathbf{I}, \mathbf{III}, \mathbf{V}.(8.47)$$

Здесь $S_{1s,3s}^{(2p)}(\omega)$ - выражение (8.41) с исключенным членом n=2.

В отличие от каскада, все интервалы вносят вклад в "чистое" двухфотонное излучение. Коэффициент ветвления для перехода $3s \to 2\gamma + 1s$ определяется согласно

$$b_{3s-1s}^{(\text{pure}2\gamma)} = \frac{1}{2} \frac{1}{\Gamma_{3s}} \int_{0}^{\omega_0} dW_{3s;1s}^{(\text{pure}2\gamma)}(\omega).$$
(8.48)

Осталось ввести интерференционный вклад. Этот вклад возникает только для 2-го и 4-го интервалов. Соответствующие функции распределения имеют вид:

$$dW_{3s;1s}^{(\text{inter})1} = \frac{4\omega^{3}(\omega_{0}-\omega)^{3}}{27\pi} \Re \left[\frac{\langle R_{3s}(r)|r|R_{2p}(2r)\rangle\langle R_{2p}(r')|r'|R_{1s}(r')\rangle}{E_{2p}-E_{3s}+\omega-\frac{i}{2}\Gamma_{2p}} \right] (8.49)$$

$$\times \left[S_{1s;3s}^{(2p)}(\omega) + S_{1s;3s}(\omega_{0}-\omega) \right] d\omega,$$

$$dW_{3s;1s}^{(\text{inter})2} = \frac{4\omega^{3}(\omega_{0}-\omega)^{3}}{27\pi} \Re \left[\frac{\langle R_{3s}(r)|r|R_{2p}(2r)\rangle\langle R_{2p}(r')|r'|R_{1s}(r')\rangle}{E_{2p}-E_{1s}-\omega-\frac{i}{2}\Gamma_{2p}} \right] (8.50)$$

$$\times \left[S_{1s;3s}(\omega) + S_{1s;3s}^{(2p)}(\omega_{0}-\omega) \right] d\omega,$$

(Я означает вещественную часть от выражения в скобках), а коэффиент ветвления равен

$$b_{3s;1s}^{(\text{inter})} = \frac{1}{2\Gamma_{3s}} \int_{(\mathbf{II})} dW_{3s;1s}^{(\text{inter})1} + \frac{1}{2\Gamma_{3s}} \int_{(\mathbf{IV})} dW_{3s;1s}^{(\text{inter})2}.$$
(8.51)

Результаты расчетов представлены в Таблице 8.1. Размер $\Delta \omega$ второго интервала удобно определить как *l*-кратный суммарной ширине $\Gamma = \Gamma_{2p} + \Gamma_{3s}$, т.е. $\Delta \omega = 2l\Gamma$ и аналогично для четвертого интервала как $\Delta \omega = 2l\Gamma_{2p}$.

В Таблице 8.1 приведены результаты для различных значений l в пределах от $l \simeq 10^5$ до $l \simeq 10^7$. Верхняя граница интервала (II) равна $\omega_1 + l\Gamma = \frac{5}{72} + l\Gamma$ (в атомных единицах), а нижняя граница интервала (IV) равна $\omega_2 - l\Gamma_{2p} = \frac{3}{8} - l\Gamma_{2p}$. В разных строках Таблице 8.1 представлены коэффициенты ветвления и вероятности "чистого" двухфотонного и "интерференционного" каналов, соответственно. Для более детального анализа также суммированы вклады скорости "чистого" двухфотонного

Таблица 8.1. Коэффициенты ветвления и вероятности перехода (в с⁻¹) для разных каналов распада уровня 3s атома водорода с разным размером частотного интервала (l).

l	104	10^{5}	2.5×10^5	5×10^5	10^{6}	1.5×10^{6}	4.53×10^6	1.00256×10^7
$b^{(pure2\gamma)}$	3.2003×10^{-5}	3.5091×10^{-6}	1.6270×10^{-6}	1.0239×10^{-6}	$7.6765 imes 10^{-7}$	7.2201×10^{-7}	9.1487×10^{-6}	1.2567×10^{-6}
$W_{\mathbf{I}}^{(\text{pure}2\gamma)}$	53.054	7.0547	3.5743	2.1898	1.27737	0.85130	2.4979×10^{-6}	0
$W_{II}^{(pure2\gamma)}$	0.006247	0.06247	0.15614	0.31201	0.62183	0.92718	2.4666	3.9810
$W_{III}^{(pure2\gamma)}$	95.536	7.8778	2.7928	1.4517	1.0457	1.0031	0.86005	0
$W_{IV}^{(pure2\gamma)}$	0.006185	0.061847	0.15458	0.30890	0.61569	0.91813	2.4523	3.9575
$W_{\mathbf{V}}^{(\text{pure}2\gamma)}$	53.561	7.1101	3.5999	2.2056	1.2886	0.861254	3.1665×10^{-4}	0
$W^{(\text{pure}2\gamma)}$	202.16	22.167	10.278	6.4680	4.8492	4.5609	5.7792	7.9385
$b^{(inter)}$	-1.4342×10^{-9}	-1.4343×10^{-8}	-3.5852×10^{-8}	-7.1665×10^{-8}	-1.4302×10^{-7}	-2.1376×10^{-7}	-6.0829×10^{-7}	-1.0459×10^{-6}
$W^{(inter)}$	-0.0090599	-0.090602	-0.22647	-0.45270	-0.90346	-1.3503	-3.8426	-6.6067

перехода для каждого частотного интервала. Коэффициент ветвления и вероятность перехода каскадного вклада можно получить из соотношения $b_{3s-2p-1s}^{(cas)} + b_{2s,1s}^{(pure2\gamma)} + b_{3s,1s}^{(inter)} = 1$. Это соотношение удовлетворяется с высокой точностью, поскольку единственным пренебрегаемым каналом распада является очень слабый прямой однофотонный M1-переход $3s \rightarrow 1s + \gamma$. Из Таблицы 8.1 можно сделать следующие выводы: как и в случае с МЗИ [249], "чистый" двухфотонный и каскадный вклады в общую вероятность распада оказываются неразделимыми. Изменяя размер интервала $\Delta \omega$, получаются совершенно разные значения для $dW_{3s,1s}^{(pure2\gamma)}$ в пределах от 202.16 с⁻¹ (для $l = 10^4$) до 7.9385 с⁻¹ (для $l = 1.00256 \times 10^7$).

Более того, согласно расчетам - в зависимости от размера интервала - интерференционный вклад также может стать весьма большим, сравнимым по величине с "чистым" двухфотонным вкладом. Таким образом, даже порядок величины "чистой" вероятности двухфотонного распада 3*s*состояния в водороде не может быть надежно предсказан.

Для "нерезонансного" вклада, вычисленного в [164], было приведено значение 10.556 с⁻¹, которое играет роль "чистой" вероятности двухфотонного распада в астрофизических приложениях. Данное значение находится в пределах результатов, приведенных в Таблице 8.1. Однако, значение 2.08 с⁻¹, полученное для "чистой" вероятности двухфотонного распада в [253], находится в сильном противоречии с настоящим анализом.

Наконец, в работе [258], были представлены как стандартный КЭД подход, основанный на теории профиля линии [249–251], так и "альтернативный" подход, основанный на двухпетлевой теории [254–256]. Было обнаружено разумное согласие между двумя методами. Однако, из анализа следует, что использование мнимой части лэмбовского сдвига дает точно те же результаты, что и стандартный КЭД подход. Более подробное сравнение данного подхода и "альтернативного" представлено в одном из следующих разделах.

8.4.2. Двухфотонный распад 4s - 1s

Аналогичным образом были проведены расчеты двухфотонного 4s-1s перехода в [118]. Интегрирование по частоте на промежутке $[0, \omega_0]$ в этом случае должно быть разбито на 9 подинтервалов. Первый интервал начинается от 0 до нижней границы второго интервала. Последний охватывает окресность первого резонанса, соответствующий частоте $\omega_{4s-3p}^{res\,1} = 7/288$ (в атомных единицах). Внутри интервала (II) резонансное слагаемое n = 3 в (8.41) 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 $\omega_{4s-2p}^{res\,2} = 3/32$. Внутри интервала (**IV**) резонансный член в (8.41) вновь должен быть заменен на аналогичный с модифицированным знаменателем $E_{2p} - E_{4s} + \omega - \frac{\mathrm{i}}{2}\Gamma$, где $\Gamma = \Gamma_{2p} + \Gamma_{4s}$. Далее, интервал (V) распространяется от верхней границы интервала (IV) до нижней границы интервала (VI), который определяет окресность второго "колена" $\omega_{2p-1s}^{res 3} = 3/8$ второго каскада. Внутри этого интервала энергетический сингулярный знаменатель следует заменить 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 окресность второго "колена" первого каскада и соответствует частоте $\omega_{3p-1s}^{res\,4} = 4/9$. Внутри этого интервала сингулярный энергетический знаменатель равен $E_{3p} - E_{1s} - \omega - \frac{i}{2}\Gamma_{3p}$. Наконец последний интервал (**IX**) ограничен верхним пределом интервала (VIII) и максимальной частотой $\omega_0 = 15/32$ 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).

Вклад каскадного излучения, как и ранее при n = 3, возникает, оставляя лишь резонансные члены во втором, четвертом, шестом и восьмом частотных интервалах (см. Рис. 8.2).



Рис. 8.2. Функция распределения по частоте $dW_{4s,1s}^{(2\gamma)}/d\omega$ для полного двухфотонного $4s \rightarrow 1s + 2\gamma$ перехода, включая резонансный и нерезонансный переходы. $dW_{4s,1s}^{(2\gamma)}/d\omega$ построена в атомных единицах в зависимости от частоты в интервале $[0, \omega_0], \omega_0 = E_{4s} - E_{1s}$; значения вероятности для наглядности поделены на α^6 (α - постоянная тонкой структуры). Границы подинтервалов (**I**)-(**IX**) отмечены вертикальными линиями.

Опуская для краткости соответствующие выражения для каскадного, "чистого" и интерференционных вкладов, результаты численных расчетов представлены в Таблице 8.2.

Удобно определить размер $\Delta \omega$ второго интервала как произведение некоторого целого числа l и ширины $\Gamma = \Gamma_{3p} + \Gamma_{4s}$, 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 8.2 числа даны для различных значений l от $l = 10^4$ до $l \approx 10^7$. Верхняя граница интервала (II) равна $\omega^{res\,1} + l\Gamma = 7/288 + l\Gamma$ (в атомных единицах), а нижнияя граница интервала (IV) равна $\omega^{res\,1} - l\Gamma = 7/288 - l\Gamma$. Аналогично определены осталь-

Таблица 8.2. Вероятности перехода в с⁻¹, а также их относительные величины, для различных каналов двухфотонного распада 4*s* уровня в подинтервалах (**I**)-(**IX**) в зависимости от размеров интервалов (*l*-кратных соответствующей ширине, см. в тексте). Последняя колонка таблицы относится к предельному случаю, когда интервалы **II**,**IV**,**VI** и **VIII** замыкаются друг с другом с использованием двух параметров $l_1 = 3.48 \times 10^6$, $l_2 = 3.52 \times 10^6$. Этот случай соответствует методу расчета в [164, 252].

	v		1.0	1			
l	10^{4}	10^{5}	5×10^5	10^{6}	2×10^{6}	3.47×10^{6}	l_1, l_2
$b^{(pure2\gamma)}$	3.0233×10^{-5}	3.1750×10^{-6}	8.0662×10^{-7}	5.5264×10^{-7}	4.9533×10^{-7}	5.6681×10^{-7}	7.2829×10^{-7}
$W_{\mathbf{I}}^{(\text{pure}2\gamma)}$	13.35220	1.73703	0.52511	0.30539	0.14332	0.04029	0
$W_{II}^{(pure2\gamma)}$	0.00145	0.01449	0.07243	0.14468	0.28785	0.49154	0.52825
$W_{III}^{(pure 2\gamma)}$	33.47500	3.61406	0.82795	0.41625	0.14812	0.00036	0
$W_{IV}^{(pure 2\gamma)}$	0.00184	0.01842	0.09193	0.18293	0.35780	0.57374	1.08139
$W_{\mathbf{V}}^{(\text{pure}2\gamma)}$	39.08470	3.17576	0.51206	0.33606	0.31441	0.29873	0
$W_{VI}^{(pure2\gamma)}$	0.00183	0.01829	0.09129	0.18167	0.35545	0.57088	1.08164
$W_{VII}^{(pure2\gamma)}$	33.91020	3.65639	0.83566	0.42000	0.15043	0.00204	0
$W_{VIII}^{(pure2\gamma)}$	0.00142	0.01416	0.07078	0.14140	0.28140	0.48093	0.52414
$W_{IX}^{(pure 2\gamma)}$	13.64800	1.76918	0.53400	0.31152	0.14813	0.04396	0
$W^{(pure 2\gamma)}$	133.47664	14.01778	3.56123	2.43989	2.18690	2.50247	3.21542
$b^{(inter)}$	-1.08815×10^{-9}	-1.08822×10^{-8}	-5.43989×10^{-8}	-1.08722×10^{-7}	-2.16848×10^{-7}	-3.73758×10^{-7}	-5.87950×10^{-7}
$W^{(inter)}$	-0.00480	-0.04804	-0.24017	-0.48001	-0.95738	-1.65014	-2.59248

ные (четвертый, шестой и восьмой) интервалы. Строки в Таблице 8.2 соответствуют относительным (b) (коэффициент ветвления) и абсолютным (W)вероятностям переходов "чистого" и интерференционного каналов, соответственно. Для более детального анализа вклады вероятностей "чистого" двухфотонного перехода также приводятся для каждого частотного интервала. Коэффициент ветвления и вероятность перехода для каскада могут быть получены из соотношения: $b_{4s-3p-1s}^{(cas)} + b_{4s-2p-1s}^{(cas)} + b_{4s,1s}^{(pure2\gamma)} + b_{4s,1s}^{(inter)} = 1.$ Это соотношение выполняется с высокой точностью, так как пренебрегается лишь очень слабым однофотонным M1 переходом $4s \rightarrow 1s + \gamma$. Из Таблицы 8.2 можно сделать следующие выводы: как и в случае МЗИ [249] 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 $\Delta \omega$, получаются существенно различные значения $dW_{4s,1s}$, начиная с 133.47664 с⁻¹ (для $l = 10^4$) до 2.50247 с⁻¹ (для $l = 3.47 \times 10^6$). Более того, в расчетах, зависящих от размера интервала, интерференционный вклад также достаточно существенен по отношению к "чистому" двухфотонному распаду. Таким образом, величина "чистого" двухфотонного распада

для 4s состояния атома водорода не может быть строго определена. В [253] для нерезонансного вклада в переходе $4s \rightarrow 1s + 2\gamma$ было получено значение 11.951 с⁻¹. Это значение находится в рамках значений данных в Таблице 8.2, однако, как было показано выше, не может служить в качестве однозначного определения величины "чистого" двухфотонного распада.

8.4.3. Ширина распада в рамках формализма адиабатической *S*-матрицы

В этом разделе используются формализм адиабатической S-матрицы (\hat{S}_{η}) и формула для энергетического сдвига ΔE_A [89] возбужденного атомного состояния A:

$$\Delta E_A = \lim_{\eta \to 0} \frac{i\eta}{2} \frac{e \frac{\partial}{\partial e} \langle A | \hat{S}_{\eta} | A \rangle}{\langle A | \hat{S}_{\eta} | A \rangle}.$$
(8.52)

Адиабатическая \hat{S}_{η} -матрица отличается от "обычной" наличием адиабатического (экспоненциального) множителя $e^{-\eta|t|}$ в каждой вершине (для каждого взаимодействия). Это относится к концепции адиабатического включения и выключения взаимодействия, формально введенной заменой $\hat{H}_{int}(t) \rightarrow \hat{H}_{int}^{\eta}(t) = e^{-\eta|t|} \hat{H}_{int}(t)$. Симметризованная версия адиабатической формулы, содержащая $S_{\eta}(\infty, -\infty)$, более удобная для КЭД-расчетов, была предложена в [87]. Первое применение формулы (8.52) к расчетам в рамках КЭД теории для связанных состояний было сделано в [259]. В частности, было показано, как обращаться с адиабатическим экспоненциальным множителем при оценке вещественной части поправок к уровням энергии (8.52), см. также [3]. Мнимую часть (8.52) можно вычислить теми же методами. Стоит отметить, что первое применение теории адиабатической *S*-матрицы к оценке ширины уровней было дано в [88], хотя и несколько иным способом, чем в работе [82] (см. ниже).

Для свободного атома (или иона) в состоянии $|A\rangle$, взаимодействующего с фотонным вакуумом $|0_{\gamma}\rangle$ (т.е. $|A, 0_{\gamma}\rangle = |A\rangle|0_{\gamma}\rangle$ в отсутствие внешних полей) комплексная энергетическая поправка (8.52) содержит только диагональные элементы S-матрицы четного порядка, поскольку $\langle 0_{\gamma} | \hat{S}_{\eta}^{(1)} | 0_{\gamma} \rangle = \langle 0_{\gamma} | \hat{S}_{\eta}^{(3)} | 0_{\gamma} \rangle = 0$ и т.д. Для выделения мнимой части энергетического сдвига $\Delta E_A^{(2i)}$ заданного порядка 2i удобнее представить выражение (8.52) в виде ряда возмущений вида (с точностью до членов e^4) [3]:

$$\Delta E_A = \lim_{\eta \to 0} i\eta \left[\langle A | \hat{S}_{\eta}^{(2)} | A \rangle + \left(2 \langle A | \hat{S}_{\eta}^{(4)} | A \rangle - \langle A | \hat{S}_{\eta}^{(2)} | A \rangle^2 \right) + \dots \right]. \quad (8.53)$$

Для адиабатической матрицы \hat{S}_η использовано стандартное разложение по степеням константы взаимодействия *е*:

$$\hat{S}_{\eta}(\infty, -\infty) = 1 + \sum_{i=1}^{\infty} \hat{S}_{\eta}^{(i)}(\infty, -\infty),$$
(8.54)

что позволяет разделять вещественные и мнимые части матричных элементов в любом заданном порядке теории возмущений, т.е.

$$\langle A|\hat{S}_{\eta}^{(i)}|A\rangle = \Re\langle A|\hat{S}_{\eta}^{(i)}|A\rangle + i\Im\langle A|\hat{S}_{\eta}^{(i)}|A\rangle.$$
(8.55)

Здесь Я, Э означает вещественную и мнимую части соответствующего выражения.

Второе слагаемое в (8.55) дает ширину однофотонного распада:

$$\Im \Delta E_A^{(2)} = \lim_{\eta \to 0} \eta Re \langle A | \hat{S}_\eta^{(2)} | A \rangle.$$
(8.56)

Сопоставляя все члены четвертого порядка, которые описывают ширину двухфотонного распада, а также часть представляющую радиационные поправки (однопетлевые) к однофотонной ширине, можно получить

$$\Im \Delta E_{A}^{(4)} = \lim_{\eta \to 0} \eta \left[2 \Re \langle A | \hat{S}_{\eta}^{(4)} | A \rangle + \left| \langle A | \hat{S}_{\eta}^{(2)} | A \rangle \right|^{2} - 2 \left(\Re \langle A | \hat{S}_{\eta}^{(2)} | A \rangle \right)^{2} \right], (8.57)$$

где последние два слагаемых происходят от $\langle A | \hat{S}_{\eta}^{(2)} | A \rangle^2$.

Полная ширина Γ_A возбужденного состояния A (с указанием начального состояния как $|A, 0_{\gamma}\rangle \equiv |A\rangle$) должна следовать (по определению) из
мнимой части полного сдвига согласно

$$\Gamma_A = -2\Im \Delta E_A. \tag{8.58}$$

Соответственно, после разложения ΔE_A вплоть до e^4

$$\Gamma_{A} = \lim_{\eta \to 0} (-2\eta) \left[\Re \langle A | \hat{S}_{\eta}^{(2)} | A \rangle + 2 \Re \langle A | \hat{S}_{\eta}^{(4)} | A \rangle + \left| \langle A | \hat{S}_{\eta}^{(2)} | A \rangle \right|^{2} - 2 \left(\Re \langle A | \hat{S}_{\eta}^{(2)} | A \rangle \right)^{2} \right].$$

$$(8.59)$$

Формулы (8.56), (8.57) и (8.59) дают определения для однофотонной и двухфотонной ширин, $\Gamma_A^{(1\gamma)}$ и $\Gamma_A^{(2\gamma)}$, в рамках формализма адиабатической матрицы \hat{S}_{η} .

Дальнейшие результаты основаны на "оптической теореме". Опуская детали (см. [82]), ее можно сформулировать, используя соотношения $\hat{S} = 1 + i\hat{T}$ [260] и, как следствие, $\Re \langle I | \hat{S}^{(i)} | I \rangle = -\Im \langle I | \hat{T}^{(i)} | I \rangle$:

$$-2\Re\langle I|\hat{S}^{(2i)}|I\rangle = \sum_{F} \left|\langle F|\hat{S}^{(i)}|I\rangle\right|^{2} + \sum_{F,j$$

Тогда, собирая члены второго порядка, возникает соотношение

$$-2\Re\langle I|\hat{S}^{(2)}|I\rangle = \sum_{F\neq I} \left|\langle F|\hat{S}^{(1)}|I\rangle\right|^2,\tag{8.61}$$

где вклад вносят только недиагональные матричные элементы, такие как $\langle F|\hat{S}^{(1)}|I\rangle$. Для вклада четвертого порядка

$$-2\Re\langle I|\hat{S}^{(4)}|I\rangle = \left|\langle I|\hat{S}^{(2)}_{\eta}|I\rangle\right|^{2} + \sum_{F\neq I} \left|\langle F|\hat{S}^{(2)}|I\rangle\right|^{2} + \sum_{F\neq I} 2\Re\langle I|\hat{S}^{(1)}_{\eta}|F\rangle\langle F|\hat{S}^{(3)}|I\rangle.$$

$$(8.62)$$

Последнее слагаемое в (8.62), очевидно, представляет собой радиационные поправки к однофотонной ширине. Эти поправки были оценены путем прямого вычисления соответствующей мнимой части двухпетлевого диаграммы (лэмбовского сдвига) в [88]. Стоит отметить, что член F = I в сумме по F в этом вкладе отсутствует, поскольку $\langle I | \hat{S}^{(1)} | I \rangle = \langle I | \hat{S}^{(3)} | I \rangle = 0.$

Как указано выше, адиабатическая *S*-матрица, \hat{S}_{η} , возникает после введения адиабатического фактора $e^{-\eta|t|}$. Если предположить, что при включении и выключении взаимодействия динамических возбуждений системы не происходит, то адиабатическая *S*-матрица остается унитарной [1, 184]. При этом все наблюдаемые, рассчитанные на основе адиабатического подхода, не должны зависеть от конкретного вида адиабатического фактора в пределе $\eta \to 0$. Поэтому соотношения "оптической теоремы" (8.61) и (8.62) могут быть применены к адиабатическим формулам (8.56), (8.57) и (8.59). В дальнейшем будет также необходимо фиксировать не только состояние электрона в атоме, но и число фотонов.

Тогда из (8.56), (8.57) и (8.59) следует, что для начального состояния $I = A, 0_{\gamma}$ (фотоны отсутствуют) однофотонная ширина определена следующим выражением:

$$\Gamma_A^{(1\gamma)} = \lim_{\eta \to 0} \eta \sum_{F \neq A, 0_\gamma} \left| \langle F | \hat{S}_\eta^{(1)} | A, 0_\gamma \rangle \right|^2, \qquad (8.63)$$

а двухфотонная ширина

$$\Gamma_{A}^{(2\gamma)} = \lim_{\eta \to 0} \eta \left[2 \sum_{F \neq A, 0_{\gamma}} \left| \langle F | \hat{S}_{\eta}^{(2)} | A, 0_{\gamma} \rangle \right|^{2} + 4 \left(\Re \langle A, 0_{\gamma} | \hat{S}_{\eta}^{(2)} | A, 0_{\gamma} \rangle \right)^{2} \right].$$
(8.64)

Здесь и далее оставшееся слагаемое четвертого порядка ($\sim e^4$)

$$\Gamma_A^{\rm rad} = \lim_{\eta \to 0} \eta \sum_{F \neq A, 0_{\gamma}} 2\Re \langle A, 0_{\gamma} | \hat{S}_{\eta}^{(1)} | F \rangle \langle F | \hat{S}_{\eta}^{(3)} | A, 0_{\gamma} \rangle \tag{8.65}$$

отбрасывается, поскольку оно представляет поправки к однофотонной ширине. Используя (8.61), $\Gamma_A^{(2\gamma)}$ сводится к виду:

$$\Gamma_{A}^{(2\gamma)} = \lim_{\eta \to 0} \eta \left[2 \sum_{F \neq A, 0_{\gamma}} \left| \langle F | \hat{S}_{\eta}^{(2)} | A, 0_{\gamma} \rangle \right|^{2} + 2 \sum_{2_{\gamma}} \left| \langle A, 2_{\gamma} | \hat{S}_{\eta}^{(2)} | A, 0_{\gamma} \rangle \right|^{2} \right.$$

$$\left. + \left(\sum_{F' \neq A, 0_{\gamma}} \left| \langle F' | \hat{S}_{\eta}^{(1)} | A, 0_{\gamma} \rangle \right|^{2} \right)^{2} \right].$$
(8.66)

В выражении (8.66) необходимо различать конечные состояния (F) и (F') для двухфотонных и для однофотонных переходов. Важно, что вклад $|\langle A, 0_{\gamma} | \hat{S}_{\eta}^{(2)} | A, 0_{\gamma} \rangle|^2$ имеющийся в (8.64) сократился. Предпоследний член в (8.66), представляет явно нефизический переход $A \to A + 2\gamma$, но формально имеется в сумме по состояниям F. Он будет необходим для дальнейших вычислений и сократится в окончательном выражении (см. ниже). Обозначение $\sum_{2_{\gamma}}$ означает здесь интегрирование по частотам двух фотонов. Далее будут представляены основные выражения для ширин одно- и двухфотонного распадов, используя выражения (8.63) и (8.66).

8.4.4. Ширина однофотонного распада согласно оптической теореме

Однофотонная ширина $\Gamma_A^{(1\gamma)}$, (8.63), может быть получена из адиабатической S_{η} -матрицы:

$$\langle A', \mathbf{k}, \mathbf{e} | \hat{S}_{\eta}^{(1)} | A, 0_{\gamma} \rangle = e \int d^4 x \bar{\psi}_{A'}(x) \gamma_{\mu} A^*_{\mu}(x) \psi_A(x) e^{-\eta |t|}.$$
 (8.67)

Теперь интегрирование по временной переменной дает по существу представление δ-функции:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(E_A - E_{A'} - \omega)t - \eta|t|} = \frac{2\eta}{(\omega_{AA'} - \omega)^2 + \eta^2} \equiv 2\pi \,\delta_\eta(\omega_{AA'} - \omega), \qquad (8.68)$$

где $\lim_{\eta\to 0} \delta_{\eta}(x) = \delta(x)$. Следующим шагом следует выполнить интегрирование по частоте фотонов. Для квадрата модуля (8.68), умноженного на ω , результатом является

$$4\eta^{2} \int_{0}^{\infty} \frac{\omega d\omega}{\left[(\omega_{AA'} - \omega)^{2} + \eta^{2}\right]^{2}} = 4\eta^{2} \left[\frac{\pi\omega_{AA'}}{4\eta^{3}} + \frac{1}{2\eta^{2}} + \frac{\omega_{AA'}}{2\eta^{3}} \operatorname{arctg}\left(\frac{\omega_{AA'}}{\eta}\right)\right]. (8.69)$$

Тогда, в пределе $\eta \to 0$,

$$4\eta^{2} \int_{0}^{\infty} \frac{\omega d\omega}{\left[(\omega_{AA'} - \omega)^{2} + \eta^{2}\right]^{2}} = \frac{2\pi\omega_{AA'}}{\eta}.$$
 (8.70)

Учитывая нормировочный множитель волновой функции фотона, а также множитель от фазового объема и умножив на η (см. (8.63), окончательное выражение для ширины уровня A задается согласно

$$\Gamma_A^{(1)} = \frac{e^2}{2\pi} \sum_{A'(E_{A'} < E_A)} \omega_{AA'} \sum_{\boldsymbol{e}} \int d\boldsymbol{\nu} \left| \left((\boldsymbol{e}^* \boldsymbol{\alpha}) e^{-i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}} \right)_{A'A} \right|^2.$$
(8.71)

В приведенном выше выводе были исключены действия с δ -функциями. Умножение на адиабатический параметр η в (8.63) играет ту же роль, что и деление результата на время T (см., например, (4.10)): адиабатический фактор η имеет размерность с⁻¹. Стоит отметить, что в этом подходе не происходит автоматического исключения (см. [244]) переходов в состояния выше A при суммировании по F, и чтобы их избежать, приходится обращаться к закону сохранения энергии.

8.4.5. Ширина двухфотонного бескаскадного распада согласно оптической теореме

Опуская для краткости аналитические выкладки для случая двухфотонной амлитуды, см. детали в [82], можно получить следующее выражение:

$$\langle A', \mathbf{k}', \mathbf{e}'; \mathbf{k}, \mathbf{e} | \hat{S}_{\eta}^{(2)} | A, 0_{\gamma} \rangle = -\frac{4\eta}{\left[(\omega_0 - \omega - \omega')^2 + 4\eta^2 \right]} \times$$

$$\sum_{n} \frac{\langle A' | \vec{\alpha} \mathbf{A}^*_{\mathbf{k}', \mathbf{e}'} | n \rangle \langle n | \mathbf{\alpha} \mathbf{A}^*_{\mathbf{k}, \mathbf{e}} | A \rangle}{E_n - E_A + \omega},$$
(8.72)

и, учитывая перестановочную симметрию фотонов,

$$\langle A'|\hat{S}_{\eta}^{(2)}|A,0_{\gamma}\rangle = -\frac{4\eta}{\left[(\omega_{0}-\omega-\omega')^{2}+4\eta^{2}\right]}\times(8.73)$$
$$\left[\sum_{n}\frac{\langle A'|\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{e}'}^{*}|n\rangle\langle n|\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{e}}^{*}|A\rangle}{E_{n}-E_{A}+\omega}+\sum_{n}\frac{\langle A'|\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{e}}^{*}|n\rangle\langle n|\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{e}'}^{*}|A\rangle}{E_{n}-E_{A'}-\omega}\right].$$

В матричных элементах операторов излучения фотонов, в отличие от *S*-матричных элементов, введены сокращенные обозначения $|A\rangle$ вместо $|A, 0_{\gamma}\rangle$, так как в этом случае трудно ожидать недоразумений в обозначениях.

Подстановка (8.73) в первый член в правой части выражения (8.66) в нерелятивистском пределе приводит к

$$\Gamma_{A}^{(2\gamma),1} = \lim_{\eta \to 0} 2\eta \left(\sqrt{2\pi}\right)^{4} \frac{e^{4}}{(2\pi)^{6}} \sum_{\boldsymbol{e},\boldsymbol{e}'} \int \cdots \int \frac{d\boldsymbol{\nu} d\boldsymbol{\nu}' d\omega d\omega' \omega \omega' (4\eta)^{2}}{\left[(\omega_{0} - \omega - \omega')^{2} + 4\eta^{2}\right]^{2}} \times (8.74)$$

$$\left| \sum_{n} \frac{\langle A' | \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{e}'}^{*} | n \rangle \langle n | \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{e}}^{*} | A \rangle}{E_{n} - E_{A} + \omega} + \sum_{n} \frac{\langle A' | \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{e}}^{*} | n \rangle \langle n | \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{e}'}^{*} | A \rangle}{E_{n} - E_{A'} - \omega} \right|^{2}.$$

Интегрирование по ω , ω' в (8.74) может быть выполнено с использованием аналогично предыдущему разделу. Сначала можно интегрировать по ω' , т.е. на интервале (∞ , 0) или даже на ($-\infty$, ∞), что в данном случае фактически эквивалентно. Второе интегрирование по ω должно проводиться в интервале [0, ω_0] (согласно закону сохранения энергии). Так, для интеграла по ω' может быть использовано соотношение (в пределе $\eta \to 0$):

$$(4\eta)^2 \int_{0}^{\infty} \frac{\omega' d\omega'}{\left[(\omega_0 - \omega - \omega')^2 + 4\eta^2\right]^2} = \frac{\pi(\omega_0 - \omega)}{\eta}.$$
 (8.75)

Тогда интегрирование по направлениям испускаемых фотонов и суммирование по поляризациям дают в нерелятивистском пределе (в калибровке "скорости"):

$$\Gamma_A^{(2\gamma),1} = \frac{4e^4}{9\pi} \int_0^{\omega_0} \omega(\omega_0 - \omega) d\omega \sum_{i,k=1}^3 |(U_{ik}(\omega))_{A'A}|^2, \qquad (8.76)$$
$$(U_{ik})_{A'A} = \sum_n \frac{\langle A'|p_i|n\rangle\langle n|p_k|A\rangle}{E_n - E_A + \omega} + \sum_n \frac{\langle A'|p_k|n\rangle\langle n|p_i|A\rangle}{E_n - E_{A'} - \omega},$$

где $p_i \equiv (\mathbf{p})_i$. Для A = 2s, A' = 1s при переходе к калибровке "длины" (используя соотношение $\omega_{A'A}(\mathbf{r})_{A'A} = \frac{i}{m}(\mathbf{p})_{A'A}$) возникает выражение в точности совпадающее с (8.40).

8.4.6. Сокращение расходимостей

В отличие от выражения (8.63) для однофотонной ширины, в (8.66) имеется еще два слагаемых, расходящиеся в пределе $\eta \to 0$. Далее показано, они в точности сокращаются. Так для последнего слагаемого в (8.66) можно заметить, что в случае отсутствия каскадов (промежуточного состояния между A и A') единственным вкладом в сумму по F' является $F' = A', 1_{\gamma}$. Тогда, опуская все необходимые вычисления, можно прийти к

$$\lim_{\eta \to 0} \eta \left(\sum_{F' \neq A, 0} \left| \langle F' | \hat{S}^{(1)} | A, 0_{\gamma} \rangle \right|^2 \right)^2 = \lim_{\eta \to 0} \frac{1}{\eta} \left(\Gamma_A^{(1)} \right)^2.$$
(8.77)

Этот расходящийся вклад может быть устранен только "нефизическим" (вторым в (8.66)) слагаемым $2\sum_{2\gamma} \left| \langle A, 2_{\gamma} | \hat{S}_{\eta}^{(2)} | A, 0_{\gamma} \rangle \right|^2$. Последнее выглядит

точно так же, как (8.74), с заменой A' на A. Полагая n = A' в сумме по nв $2\langle A, 2_{\gamma} | \hat{S}_{\eta}^{(2)} | A, 0_{\gamma} \rangle$, можно получить тот же набор матричных элементов, что и в (8.77). Этот вклад также оказывается расходящимся, $\sim \eta^{-1}$, и устраняет расходимость (8.77).

Последнее можно продемонстрировать следующим образом.

$$\sum_{2\gamma} \left| \langle A, 2_{\gamma} | \hat{S}_{\eta}^{(2)} | A, 0_{\gamma} \rangle \right|^{2} = \frac{e^{4}}{(2\pi)^{4}} \sum_{\boldsymbol{e}, \boldsymbol{e}'} \int \cdots \int \frac{(4\eta)^{2} \omega \omega' d\boldsymbol{\nu} d\boldsymbol{\nu} d\omega d\omega'}{[(\omega_{0} - \omega - \omega')^{2} + 4\eta^{2}]^{2}} (8.78)$$
$$\times \left| \frac{\langle A | \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}', \boldsymbol{e}'}^{*} | A' \rangle \langle A' | \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}, \boldsymbol{e}}^{*} | A \rangle}{E_{A'} - E_{A} + \omega + \mathrm{i}\eta} + \frac{\langle A | \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}, \boldsymbol{e}}^{*} | A' \rangle \langle A' | \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}', \boldsymbol{e}'}^{*} | A \rangle}{E_{A'} - E_{A} - \omega + \mathrm{i}\eta} \right|^{2}.$$

В этом выражении следует сохранять і η в знаменателях энергии, чтобы отслеживать все расходимости. В итоге

$$2\eta \sum_{2\gamma} \left| \langle A, 2_{\gamma} | \hat{S}_{\eta}^{(2)} | A, 0_{\gamma} \rangle \right|^{2} = \frac{2\eta e^{4}}{(2\pi)^{4}} \sum_{\boldsymbol{e}, \boldsymbol{e}'} \int d\boldsymbol{\nu} d\boldsymbol{\nu}' \left| \langle A | \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}, \boldsymbol{e}}^{*} | A' \rangle \right|^{4} \times \left(-\frac{\pi}{\eta} \right) \int \omega^{2} d\omega \left| \frac{1}{E_{A'} - E_{A} + \omega + \mathrm{i}\eta} + \frac{1}{E_{A'} - E_{A} - \omega + \mathrm{i}\eta} \right|^{2}. (8.79)$$

Наконец, можно записать выражение (8.79) в виде:

$$\lim_{\eta \to 0} 2\eta \sum_{2\gamma} \left| \langle A, 2_{\gamma} | \hat{S}_{\eta}^{(2)} | A, 0_{\gamma} \rangle \right|^2 = -\lim_{\eta \to 0} \frac{1}{2\pi} \left(\Gamma_A^{(1)} \right)^2 F(\eta), \tag{8.80}$$

где

$$F(\eta) = 4\omega_0^2 \int \frac{d\omega}{(\omega_0^2 - \eta^2 - \omega^2)^2 + 4\eta^2 \omega_0^2}.$$
(8.81)

Проводя необходимые вычисления (см. подробнее в [82]), можно найти

$$F(\eta) = \frac{4\pi i}{2i\eta} = \frac{2\pi}{\eta}.$$
(8.82)

Подставляя полученный результат в (8.80), видно что вклад второго слагаемого в (8.66) в точности равен и противоположен по знаку выражению (8.77) (последнее слагаемое в (8.66)). Оставшиеся в сумме по *n* слагаемые с $n \neq A'$ в выражении для $2\langle A, 2_{\gamma} | \hat{S}_{\eta}^{(2)} | A, 0_{\gamma} \rangle$, могут быть проигнорированы, поскольку они не соответствуют закону сохранения энергии.

Таким образом, второе и третье слагаемые в (8.66) в отсутствие каскадов компенсируют друг друга, а двухфотонная ширина определяется исключительно первым членом, $\Gamma_A^{(2\gamma),1} = \Gamma_A^{(2\gamma)}$. Тогда, (8.76) в точности совпадает со стандартным КЭД выражением для ширины двухфотонного распада в отсутствие каскадов, см., например, (8.40) для случая 2s.

8.4.7. Ширина двухфотонного распада при наличии каскада

Вывод выражения для ширины двухфотонного распада при наличии каскадов в принципе не отличается от предыдущего. Выражение (8.74) справедливо и в этом случае. Считая, что существует только один каскадный канал (например, 3s - 2p - 1s в случае распада 3s уровня в водороде), единственное отличие состоит в существовании дополнительной расходимости при n = r в сумме по n в (8.74): $\omega = E_A - E_r$ (r - резонансное состояние). Ввиду сохранения энергии это означает также существование еще одного резонанса (нижней ветви каскада): $\omega' = E_r - E_{A'}$. Теперь (8.76) содержит два расходящихся как η^{-1} слагаемых: для $F' = A', 1_{\gamma}$ (эта расходимость аналогична случаю отсутствия каскадов) и $F' = r, 1_{\gamma}$ (дополнительная расходимость, связанная с существованием каскада). Первая расходимость компенсируется членом n = A' в "нефизическом вкладе" $\langle A, 2_{\gamma} | \hat{S}_{\eta}^{(2)} | A, 0_{\gamma} \rangle$, а последний таким же образом компенсируется слагаемым n = r в выражении для $\langle A, 2_{\gamma} | \hat{S}_{\eta}^{(2)} |, 0_{\gamma} \rangle$. Однако, при наличии каскада третья расходимость возникает непосредственно при суммировании по n (при n = r) в выражении (8.79). Эта расходимость не может быть устранена никаким контрчленом, поскольку она пропорциональна особому произведению элементов: $|\langle A'|p_i|r\rangle\langle r|p_k|A\rangle|^2$, в выражении (8.66) нет контр-члена, содержащего такое произведение. Устранить эту оставшуюся расходимость можно только за счет учета (при заданном порядке теории возмущений) радиационных поправок к ширине уровня. Эквивалентно, можно ввести ширину уровня, как это было сделано в [85]. Таким образом, оценивая ширину двухфотонного распада при наличии каскадов, обнаруживаются те же выражения с теми же проблемами, которые обсуждались выше (см. раздел 8.4.1).

8.4.8. Ширина двухфотонного распада как мнимая часть двухпетлевой радиационной поправки

Требуемое в астрофизических исследованиях выделение "чистого" излучения для двухфотонных распадов высоко возбужденных состояний (сn > 2), привело к появлению так называемого "альтернативного" подхода, см., например, [256]. Этот подход основан на вычислении мнимой части двухпетелевой диаграммы на собственную энергию электрона. Так в [256] было показано, что возникающая в этом случае расходимость может быть устранена с помощью интеграла

$$I_{1} = \int_{0}^{1} \left| \frac{1}{a - \omega + i\epsilon} \right|^{2} d\omega = \frac{\pi}{\epsilon} + \frac{1}{a(a - 1)} + O(\epsilon^{2})$$
(8.83)

где 0 < a < 1 и результат выписан в низшем порядке по $\epsilon \to 0$ (и, естественно, $\epsilon \ll a$). Сходящееся второе слагаемое в (8.83) было использовано для получения конечного числа, которое было интерпретировано как ширина "чистого" двухфотонного излучения. Опуская для краткости детали доказательства неправомочности такой интерпретации, представленные в [82], в данном разделе будет представлено другое основание для этого. Оно использует полностью теорию, изложенную в [253–256], однако, приводит к иным выводам по полученным результатам.

Следует указать, что определение ширины возбужденного уровня через мнимую часть однопетлевой поправки на собственную энергию связанного электрона может быть доказано полностью аналитически [244]. Вычисление сводится к так называемому разрезанию диаграммы. Результат получается в виде:

$$\Gamma_A = -2\Im \Delta E_A. \tag{8.84}$$

Вклад в эти ширины вносит сумма вероятностей однофотонных переходов на нижние уровни (однофотонная ширина $\Gamma_A^{(1\gamma)}$). Можно было бы ожидать, что мнимая часть двухпетлевых вкладов, см. Рис. 8.3, должна содержать двухфотонную ширину. Если бы Γ_A также совпадала с суммой вероятно-



Рис. 8.3. Набор двухпетлевых диаграмм Фейнмана, используемых для вычисления "двухфотонной ширины". В зависимости от того как "разрезана" диаграмма, возникают поправки к ширинам одно- и двухфотонного распадов (подробное изложение представлено в [121]). Здесь использованы стандартные обозначения: состояние, для которого ищется поправка, обозначено *A*, волнистая линия означает фотонный пропагатор, двойная сплошная линия - электронный пропагатор. Диаграммы a), b) - неприводимые, a c) - приводимая. Последняя требует использования адиабатической теории *S*-матрицы для устранения дополнительно возникающих расходимостей за счет "reference" состояний.

стей двухфотонного распада (включая каскады), см., например, (8.40), теория возмущений для мнимой части радиационного сдвига уровней энергии не существовала бы: каскадные вклады всегда одного порядка (параметрически) с однофотонными ширинами. Проведенный анализ показывает, что этого не происходит. В случае двух петель выражение (8.40) не возникает. Вместо квадрата модуля появляется вещественная часть, как и было получено в [256]. Детали вычислений можно найти в [84, 121].

Мнимая часть двухпетелевых радиационных поправок на собственную энергию электрона возникает при соответствующем "разрезании" диаграмм на Рис. 8.3. При этом не все возможные такие процедуры будут приводить к двухфотонным вкладам: будут также появляться поправки к однофотонным ширинам. Стоит отметить, что "резать" вакуумные петли не следует, так как поправки на поляризацию вакуума не дают вклада в мнимую часть энергии. Результатом для случая двухфотонного вклада является

$$\tilde{\Gamma}_{3s,1s}^{(2\gamma)} = e^{4} \lim_{\eta \to 0} \Re \sum_{\boldsymbol{e},\boldsymbol{e}'} \int d\boldsymbol{\nu} \int d\boldsymbol{\nu}' \int_{0}^{\omega_{0}} d\omega \frac{\omega(\omega_{0} - \omega)}{2^{4}\pi^{3}} \times \quad (8.85)$$

$$\left[\sum_{n_{1}} \frac{\langle A' | \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{e}'}^{*} | n_{1} \rangle \langle n_{1} | \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{e}}^{*} | A \rangle}{E_{n_{1}} - E_{A} + \omega} + \sum_{n_{2}} \frac{\langle A' | \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{e}}^{*} | n_{2} \rangle \langle n_{2} | \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{e}'}^{*} | A \rangle}{E_{n_{2}} - E_{A'} - \omega} \right] \times \\ \left[\sum_{n_{3}} \frac{\langle A' | \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{e}'}^{*} | n_{3} \rangle \langle n_{3} | \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{e}}^{*} | A \rangle}{E_{n_{3}} - E_{A} + \omega} + \sum_{n_{3}} \frac{\langle A' | \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{e}}^{*} | n_{3} \rangle \langle n_{3} | \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{e}'}^{*} | A \rangle}{E_{n_{3}} - E_{A'} - \omega} \right]^{*}.$$

Как было упомянуто выше, в выражении (8.85) стоит вещественная часть, что сразу показывает отличие со стандартным выражением (8.40), где стоит квадрат модуля амплитуды излучения. "Опасные" знаменатели не требуют регуляризации и сводятся к конечным членам, так что двухфотонная вклад $\tilde{\Gamma}_{AA'}^{(2\gamma)}$ не нарушает теорию возмущений. В свою очередь, вероятность двухфотонного перехода содержит сингулярность, соответствующую каскаду, и требует регуляризации. Таким образом, величина $\tilde{\Gamma}_{3s,1s}^{(2\gamma)}$ уже не является двухфотонной шириной уровня (суммой вероятностей переходов в нижние состояния). Численные результаты для $\tilde{\Gamma}_{3s,1s}^{(2\gamma)}$ представлены в Таблице 8.3.

Основным выводом из Таблицы 8.3 является то, что ширины $\tilde{\Gamma}_{AA'}^{(2\gamma)}$ не могут рассматриваться как "чистые" ширины двухфотонного излучения (или вероятности "чистых" двухфотонных переходов в конретное конечное остояние), а представляют собой двухфотонные поправки в полную величину ширины уровня. В пользу этого утверждения говорит тот факт, что некоторые значения $\tilde{\Gamma}_{AA'}^{(2\gamma)}$ оказываются отрицательными: 4d - 2s и 5s - 3d переходы, см. Таблицу 8.3. Это не позволяет рассматривать $\tilde{\Gamma}_{AA'}^{(2\gamma)}$ как вероятности перехода и, следовательно, использовать их в теории переноса излучения [76, 99].

В проведенном анализе стоит указать на весомый вклад Т. Залялютдинова.

Состояния		n'					
\overline{nl}	n'l	1	1, [256]	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}	

Таблица 8.3. Двухфотонные вклады $\tilde{\Gamma}_{AA'}^{(2\gamma)}$, (8.85), в полную ширину атомного уровня для атома водорода. Значения даны в с⁻¹.

8.5. Двухфотонное приближение в многофотонных процессах распада

В рамках изучения многофотонных процессов излучения вопрос о неразделимости каскадного и "чистого" излучения из полной вероятности привел к следующей задаче. Можно заметить, что в многофотонных процессах с участием каскадного излучения имеются переходы, относящиеся к "двухфотонному звену". Так, например, можно указать на распад состояния 3pв атоме водорода. По-мимо доминиурющего однофотонного распада непосредственно в основное состояние, имеется трехфотонный процесс. Такие переходы (E1E1E1) разрешены согласно правилам отбора, хотя и малы. Порядок величины вероятностей E1E1E1 переходов определяется оценкой $c_{3\gamma}\alpha(\alpha Z)^8$ (в атомных единицах). Расчеты (см., например, [114]) показывают, что численный коэффециент $c_{3\gamma}$ также оказывается малым, для $2p \rightarrow 1s + 3\gamma \ c_{3\gamma} \approx 0.263 \times 10^{-4}$ атомных единиц [114]. Более детальное исследование трехфотонных (бескаскадных) процессов излучения было представлено в [123], где были проведены расчеты в водородоподобных ионах для широкого набора значений заряда ядра Z. Бескаскадные процессы могут быть интересны в связи с тем, что они не могут быть эффективно перепоглощены, а значит должны приводить к непосредственному "отрыву" излучения от вещества. Вероятность каскадных же процессов (см. предыдущий раздел) имеет порядок такой же как и однофотонный распад непосредственно в основное состояние, ~ $\alpha^3 Z^4$ атомных единиц. Следовательно, можно задаться вопросом о том, какова вероятность обнаружить "чистый" двухфотонный процесс излучения в каскадном распаде с наличием в нем двухфотонного звена.

Стоит отметить, что в контексте изучения лишь процесса излучения можно задаться вопросом о зависимости начального состояния от процесса его образования (см. предыдущие разделы). В принципе, КЭД-трактовка любого процесса абсолютно определена только тогда, когда этот процесс начинается со стабильного состояния и заканчивается также стабильным (метастабильным) состоянием. Тогда вопрос о процессе приготовления возбужденного состояния не возникает. В этом контексте все атомные состояния можно рассматривать как метастабильные, поскольку ширины энергетических уровней всегда меньше интервалов между уровнями. Конечно, постановка задачи о вероятности перехода из некоторого исходного возбужденного состояния всегда является идеализацией. Такая формулировка возможна при условии, что в процессе создания исходного состояния нерезонансные поправки можно считать незначительными. НР поправки зависят от процесса возбуждения, однако, с выскокой точностью можно утверждать, что они сравнительно малы для всех типов процессов возбуждения. Следовательно, можно смело предположить, что история создания начального состояния никак не влияет на оценки каскадных переходов. Также необходимо отметить наличие интерференции. Согласно предыдущим обсуждениям (см. о неразделимости каскадного и "чистого" излучения), данное явление совершенно незначительно, поскольку интерференция должна рассматриваться для равного числа фотонов, т.е. с "чистым" трехфотонным излучением $\sim 10^{-4} \alpha (\alpha Z)^8$ при Z = 1. Указанные обстоятельства относятся к основным приближениям, применяемым для определения вероятности перехода с уровня А в основное состояние посредством

каскадного распада. Регистрируя частоту с энергией относящейся к двухфотонному звену (например 3p - 2p или 2s - 1s для распада 3p состояния), скорость распада может не совпадать с естественной шириной уровня A.

В качестве первого примера рассмотрим трехфотонный переход из 3p состояния в основной уровень 1s атома водорода. В нем имеется несколько каскадных каналов: $3p \rightarrow 2p + 2\gamma \rightarrow 1s + \gamma$ и $3p \rightarrow 2s + \gamma \rightarrow 1s + 2\gamma$. Оба включают в себя "чистое" двухфотонное излучение ("двухфотонное звено"), связанное с $3p \rightarrow 2p + 2\gamma$ и $2s \rightarrow 1s + 2\gamma$ переходами. Схематически процесс распада 3p состояния, включая трехфотонное каскадное излучение, изображен на Рис. 8.4.



Рис. 8.4. Схематическое изображение перехода $3p \rightarrow 1s + 3\gamma(E1)$. Тройная вертикальная линия со стрелкой (a)) обозначает общий трехфотонный вклад, состоящий из "чистого" трехфотонного распада в 1s состояние b), однофотонного перехода в 2s состояние с последующим двухфотонным звеном c) и двухфотонного звена 3p - 2p с последующим однофотонным распадом d).

Используя стандартный формализм *S*-матрицы для описания трехфотонного процесса излучения (детали см. в [115]), в рамках резонансного приближения (см. выше) в амплитуде излучения следует выделить вклад относящийся к 2*s* и 2*p* состояниям, Рис. 8.4 с), d), соответственно. Используя регуляризацию резонансных вкладов согласно процедуре описанной в [8,85], а также проводя все необходимые промежуточные выкладки, можно прийти к следующему выражению:

$$W_{3p,1s}^{(\text{total})} = W_{3p,1s}^{(1\gamma)} + W_{3p,1s}^{(3\gamma)} = W_{3p,1s}^{(1\gamma)} + \frac{W_{2p,1s}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{2p}} W_{3p,2p}^{(2\gamma)} + \frac{W_{3p,2s}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{3p}} W_{2s,1s}^{(2\gamma)}, \quad (8.86)$$

где также было проведено интегрирование по частоте однофотонного звена в каскадном излучении. Результатом интегрирования соответствующего контура Лоренца явлется появление коэффициента ветвления (branching ratio) перед вероятностями двухфотонного излучения в (8.86). Коэффициент во втором слагаемом в высшей степени равен единице, однако сохранен для демонстрации его возникновения из трехфотонного процесса. Стоит отметить, что коэффициент 3/4, полученный в [115] неверен и должен быть заменен на единицу как в (8.86). Последнее было отмечено в [121]. Численные значения для последних двух слагаемых в (8.86) дают

$$\frac{W_{2p,1s}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{2p}}W_{3p,2p}^{(2\gamma)} = 0.0475 \text{ c}^{-1},$$

$$\frac{W_{3p,2s}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{3p}}W_{2s,1s}^{(2\gamma)} = 0.9738 \text{ c}^{-1},$$
(8.87)

(1)

что оказывается немаловажным по сравнению с порядком величины двухфотонного вклада 10 с⁻¹ в вероятность 2γ -распада 3s уровня [164, 252].

Аналогичным образом были проведены вычисления для четырехфотонной вероятности излучения $4s \rightarrow 1s + 4\gamma$. Процесс распада с наличием двухфотонных звеньев схематически изображен на Рис. 8.5. В рамках тех же приближений с учетом правильного коэффициента окончательный результат может быть представлен в виде:

$$W_{4s,1s}^{(\text{total})} = W_{4s,1s}^{(2\gamma)} + W_{4s,1s}^{(4\gamma)} = W_{4s,1s}^{(2\gamma)} +$$

$$\frac{W_{3s,2p}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{3s}} \frac{W_{2p,1s}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{2p}} W_{4s,3s}^{(2\gamma)} + \frac{W_{4s,3p}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{4s}} \frac{W_{2p,1s}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{2p}} W_{3p,2p}^{(2\gamma)} + \frac{W_{4s,3p}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{4s}} \frac{W_{4s,2s}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{3p}} W_{2s,1s}^{(2\gamma)}.$$
(8.88)



Рис. 8.5. Схематическое изображение перехода $4s \to 1s + 4\gamma(E1)$ с наличием двухфотонных звеньев. Обозначения аналогичны Рис. 8.4.

Соответствующий численный результат:

$$\frac{W_{2p,1s}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{2p}} \frac{W_{3s,2p}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{3s}} W_{4s,3s}^{(2\gamma)} = 0.0029 \text{ c}^{-1},$$

$$\frac{W_{4s,3p}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{4s}} \frac{W_{2p,1s}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{2p}} W_{3p,2p}^{(2\gamma)} = 0.0199 \text{ c}^{-1},$$

$$\frac{W_{4s,3p}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{4s}} \frac{W_{3p,2s}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{3p}} W_{2s,1s}^{(2\gamma)} = 0.4076 \text{ c}^{-1}.$$
(8.89)

Наконец, в работе [116] был рассмотрен случай четырехфотонного распада распада 4d состояния с результатом

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

$$(8.90)$$

196

$$\frac{W_{3s,2p}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{3s}} \frac{W_{2p,1s}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{2p}} W_{4d,3s}^{(2\gamma)} = 6.045 \times 10^{-6} \text{ c}^{-1}, \ \frac{W_{3d,2p}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{3d}} \frac{W_{2p,1s}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{2p}} W_{4d,3d}^{(2\gamma)} = 0.0017 \text{ c}^{-1}, \\ \frac{W_{4d,3p}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{4d}} \frac{W_{2p,1s}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{2p}} W_{3p,2p}^{(2\gamma)} = 0.0121 \text{ c}^{-1}, \ \frac{W_{4d,3p}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{4d}} \frac{W_{3p,2s}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{3p}} W_{2s,1s}^{(2\gamma)} = 0.2477 \text{ c}^{-1}.$$

Необходимо отметить работу [120], где было выполнено детальное вычисление процесса рассеяния $1s + \gamma \rightarrow 3p \rightarrow 1s + 3\gamma$ (от стабильного до стабильного состояния). Как и прежде в процессе излучения рассматривался каскад с наличием в нем двухфотонных звеньев. Целью исследования являлось, во-первых, изучение вопроса о влиянии приготовления состояния на процесс излучения (в рамках резонансного приближения, как и ожидалось, такого влияния не обнаружено), а, во-вторых, детальное сравнение KM и KЭД подходов для регуляризации резонансных вкладов. Было показано, что в рамках KM подхода также возникает сумма ширин для каскадного (резонансного) состояния. Результат для процесса рассеяния был получен в виде:

$$b_{3p-1s}^{(3\gamma)}(3p-2s-1s) = \frac{W_{3p-2s}^{(1\gamma)}W_{2s-1s}^{(2\gamma)}}{\Gamma_{3p}\Gamma_{2s}},$$
(8.91)

где $b_{3p-1s}^{3\gamma}(3p-2s-1s)$ представляет коэффициент ветвления.

Сразу следует сделать несколько замечаний. Первое относится к тому, что в случае описания процесса рассеяния вместо просто излучения возникает безразмерный коэффициент ветвления b. Это является результатом интегрирования по частоте поглощенного фотона и соответствующего резонансного профиля (последний появляется в виде дополнительных амплитуды поглощения и энергетического знаменателя), подробнее см. в [120]. Второе замечание относится к тому, что ширина Γ_{2s} в высшей степени определяется вероятностью $W_{2s-1s}^{(2\gamma)}$ в атоме водорода, и, следовательно, в выражении (8.91) их отношение можно было бы положить равным единице. Исключение этого коэффициента приводит, казалось бы к противоречию с предыдущими результатами. Однако, необходимо указать, что безразмерный коэффициент b позволяет определить вероятность двухфотонного перехода в каскадном процессе излучения следующим образом. Величина *b* должна определять вероятность перехода $3p \to 1s+3\gamma$ через канал $3p \to 2s+\gamma \to 1s+2\gamma$, которая значительно меньше основного канала распада 3p состояния, т.е. $W_{3p-1s}^{(1\gamma)}$. Считая, что величина $b_{3p-1s}^{3\gamma}(3p-2s-1s)$ является коэффициентом ветвления для вероятности трехфотонного перехода $W_{3p,1s}^{(3\gamma)}(3p-2s-1s)$ к ширине двухфотонного перехода Γ_{2s} , из (8.91) следует

$$W_{3p,1s}^{(3\gamma)}(3p - 2s - 1s) = \frac{W_{3p-2s}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{3p}}W_{2s-1s}^{(2\gamma)}.$$
(8.92)

Аналогично для каскада $3p \rightarrow 2p + 2\gamma \rightarrow 1s + 3\gamma$:

$$b_{3p-1s}^{(3\gamma)}(3p-2p-1s) = \frac{W_{2p,1s}^{(1\gamma)}W_{3p,2p}^{(2\gamma)}}{\Gamma_{2p}\Gamma_{3p}}.$$
(8.93)

В отличие от $b_{3p,1s}^{3\gamma}(3p-2s-1s)$, величину (8.93) следует рассматривать как коэффициент ветвления для вероятности перехода по каналу $3p \rightarrow 2p + 2\gamma \rightarrow 1s + \gamma$ к общей ширине 3p уровня, т.е. Γ_{3p} . Тогда

$$W_{3p,1s}^{(3\gamma)}(3p - 2p - 1s) = \frac{W_{2p,1s}^{(1\gamma)}}{\Gamma_{2p}}W_{3p,2p}^{(2\gamma)},$$
(8.94)

приводя к прежнему результату (8.86).

Таким образом, можно сформулировать двухфотонное приближение, позволяющее выделить каскадное излучение с двухфотонными звеньями. Этот тип каскада вносит вклад в двухфотонные переходы (т.е. в "отрыв" излучения), сравнимый с вкладом "прямых" двухфотонных переходов. Расчеты двухфотонных вероятностей переходов были выполнены в рамках этих исследований в нерелятивистском приближении методом кулоновской функции Грина и находятся в хорошом согласии с соответствующими полностью релятивистскими значениями (на уровне ≤ 0.01%). Основные формулы для такого рода вычислений были представлены в [111,117], где также представлен способ вычисления вероятностей многофотонного излучения для подуровней соответствующих тонкой структуре атомного состояния.

Глава 9.

Вероятности излучения во внешнем электрическом поле

9.1. Вероятность распада уровня 2*s* в атоме водорода во внешнем электрическом поле

Согласно теории, изложенной в разделе 8.2, достаточно простым образом можно вычислить вероятность однофотонного распада состояния 2s в атоме водорода, помещенного во внешнее электрическое поле. Соответствующая вероятность была детально изучена в работе [103] с целью выявления эффектов иммитирующих несохранение пространственной четности (см. также другое приложение данного явления в [104, 105]).

Для решения данного вопроса, в рамках аналитических расчетов, см., например, [106], волновая функция может быть представлена в виде:

$$|\overline{2s}, m_s\rangle = |2s, m_s\rangle + \eta \sum_{m'_s} \langle 2p_{1/2}, m'_s | e(\mathcal{E}r) | 2s_{1/2}, m_s\rangle | 2p_{1/2}, m'_s\rangle.$$
 (9.1)

Матричный элемент от дипольного взаимодействия с внешним электрическим полем \mathcal{E} , как и прежде, относится к коэффициенту Штарка (см. предыдущие разделы диссертации). Однако, в последующих расчетах используется более аккуратная запись для коэффициента η : $\eta = (\Delta E_L + i\Gamma_{2p}/2)^{-1}$. Результатом вычислений является [106, 112–114]

$$dW_{\overline{2s},1s} = W_0 \left[1 \mp \beta(\mathcal{E})(\boldsymbol{\nu}\mathcal{E})/\mathcal{E} \right] d\boldsymbol{\nu}, \qquad (9.2)$$

где введены обозначения (см. [103]):

$$W_{0} = dW_{2s,1s}^{(1\gamma)} + \frac{e^{2}\mathcal{E}^{2}}{(\Delta E_{L})^{2} + \frac{1}{4}\Gamma_{2p}^{2}} dW_{2p_{1/2},1s}^{(1\gamma)}, \qquad (9.3)$$
$$\beta(\mathcal{E}) = |e|\mathcal{E} \frac{\Gamma_{2p}\sqrt{W_{2s,1s}^{(1\gamma)}W_{2p_{1/2},1s}^{(1\gamma)}}}{W_{2s,1s}^{(1\gamma)}\left(\Delta E_{L}^{2} + \frac{1}{4}\Gamma_{2p}^{2}\right) + e^{2}\mathcal{E}^{2}W_{2p_{1/2},1s}^{(1\gamma)}.$$

Знак \mp в формуле (9.2) соответствуют атомам водорода (-) и антиводорода (+). Следовательно, функция $\beta(\mathcal{E})$ определяет разницу между Н и \overline{H} в вероятности 2s - 1s перехода во внешнем электрическом поле. Максимальное значение $\beta(\mathcal{E})$, см. [103], достигается в поле с напряженностью

$$\mathcal{E}_{\max} = \frac{1}{|e|} \sqrt{\frac{W_{2s,1s}^{(1\gamma)}}{W_{2p_{1/2},1s}^{(1\gamma)}}} \left(\Delta E_L^2 + \frac{1}{4}\Gamma_{2p}^2\right)} \approx 0.3 \times 10^{-4} \text{ B/cm}$$
(9.4)

и, тогда, $\beta_{\max} \equiv \beta(\mathcal{E}_{\max}) = \Gamma_{2p} \sqrt{\Delta E_L^2 + \Gamma_{2p}^2/4} \approx 1/20$. Относительная разность вероятностей однофотонного 2s - 1s перехода атомов H и $\overline{\mathrm{H}}$ во внешнем электрическом поле \mathcal{E}_{\max} равна

$$\frac{\Delta \left(dW_{\overline{2s},1s} \right)}{dW_{2s,1s}} = \frac{2W_0 \beta_{\max}}{dW_{2s,1s}} = \frac{1}{5} \cos \phi, \tag{9.5}$$

где ϕ - угол между векторами \mathcal{E} и ν . Таким образом, только в очень слабых полях (9.4) эта разница близка к 20% и ее можно обнаружить в экспериментах типа [134, 182].

9.2. Двухфотонный распад 2s и 2p водородных состояний во внешнем электрическом поле

В этой части диссертации рассматриваются вероятности двухфотонных 2s - 1s и 2p - 1s переходов для атома водорода в присутствии внешнего электрического поля. Как и в предыдущей главе 7 и разделе 9.1, здесь учитывается только смешивание 2s и 2p состояний. Такое смешивание уровней приводит к дополнительным двухфотонным распадам E1E2 и E1M1 помимо доминирующего двухфотонного *E*1*E*1 перехода. Как было показано в предыдущих разделах, вероятности двухфотонного E1E2 или E1M1 перехода примерно в $(\alpha Z)^2$ раз меньше вероятности E1E1 перехода. Однако, с учетом быстро растущей точности спектроскопических экспериментов, вероятности двухфотонных E1E2 или E1M1 переходов можно рассматривать как поправку к E1E1 распаду. Более того, как было показано в [112, 114], в присутствии внешнего электрического поля к вероятности E1E1 перехода за счет интерференции добавляются вклады линейные по полю. Описание двухфотонных распадов во внешнем электрическом поле может быть адресовано к экспериментам типа [182], которые используют влияние внешнего электрического поля для регистрации процесса поглощения.

Опуская для краткости аналитические вычисления, представленные в работах [112, 114] и основанные на теории изложенной выше, конечный результат может быть представлен в виде:

$$\frac{dW_{\overline{2s},1s}^{(2\gamma)}}{d\boldsymbol{\nu}d\boldsymbol{\nu}'} = W_0 \left[1 \pm \beta_1(\mathcal{E}) \left[\boldsymbol{\nu}_{\mathcal{E}} \boldsymbol{\nu} + \boldsymbol{\nu}_{\mathcal{E}} \boldsymbol{\nu}' \right] (1 + (\boldsymbol{\nu}\boldsymbol{\nu}')^2) \\
\pm \beta_2(\mathcal{E}) \left[\boldsymbol{\nu}_{\mathcal{E}} \boldsymbol{\nu} + \boldsymbol{\nu}_{\mathcal{E}} \boldsymbol{\nu}' \right] (1 + \boldsymbol{\nu}\boldsymbol{\nu}_{\mathbf{k}'}) \right],$$
(9.6)

где $W_0 = W_{2s}^{(2\gamma)} + \widetilde{W}_{2p}^{(2\gamma)} e^2 \mathcal{E}^2 / \Delta^2$, $\widetilde{W}_{2p}^{(2\gamma)}$ - сумма E1E2 и E1M1 вероятностей, $\boldsymbol{\nu_{\mathcal{E}}} = \mathcal{E}/\mathcal{E}$ и $\Delta = \sqrt{\Delta E_L^2 + \Gamma_{2p}^2/4}$. Функции $\beta_1(\mathcal{E})$ и $\beta_2(\mathcal{E})$ определены согласно

$$\beta_1(\mathcal{E}) = \frac{0.000230135(\alpha Z)^7}{W_0 \pi^3} \frac{|e|\mathcal{E}\Gamma_{2p}}{\Delta^2},$$

$$\beta_2(\mathcal{E}) = \frac{0.0000340919(\alpha Z)^7}{W_0 \pi^3} \frac{|e|\mathcal{E}\Gamma_{2p}}{\Delta^2}.$$
(9.7)

Максимальные значения β_1 (или β_2) достигаются при значении напряженности поля

$$\mathcal{E}_{\max} = \frac{w^{2\gamma}\Delta}{|e|} \approx \pm 0.000018 \text{ a.u.} \approx \pm 57 \frac{\kappa B}{c_{M}}.$$
(9.8)

Здесь $w^{2\gamma} = W_{2p}^{(2\gamma)}/W_{2s}^{(2\gamma)}$, а знаки (-) и (+) относятся к атомам H и \overline{H} , соответственно.

Тогда максимальное значение $dW^{(2\gamma)}_{\overline{2s}\,1s}$ выражается как

$$\frac{dW_{\overline{2s},1s}^{(2\gamma)}}{d\boldsymbol{\nu}d\boldsymbol{\nu}'} = W_0(\mathcal{E}_{\max}) \left[1 \pm 0.00024397 \left[\boldsymbol{\nu}_{\boldsymbol{\mathcal{E}}} \boldsymbol{\nu} + \boldsymbol{\nu}_{\boldsymbol{\mathcal{E}}} \boldsymbol{\nu}' \right] \left(1 + (\boldsymbol{\nu}\boldsymbol{\nu}')^2 \right) \right.$$
(9.9)
$$\pm 0.00003614 \left[\boldsymbol{\nu}_{\boldsymbol{\mathcal{E}}} \boldsymbol{\nu} + \boldsymbol{\nu}_{\boldsymbol{\mathcal{E}}} \boldsymbol{\nu}' \right] \left(1 + \boldsymbol{\nu}\boldsymbol{\nu}' \right) \right].$$

Интегрирование по направлениям испускаемых фотонов $\boldsymbol{\nu}$ и $\boldsymbol{\nu}'$ приводит к значению для вероятности двухфотонного E1E1 распада 2s состояния, поскольку интерференционные члены дают нулевой результат. Но для дифференциальной вероятности перехода интерференционные члены ясно демонстрируют линейную зависимость от внешнего электрического поля $\boldsymbol{\mathcal{E}}$. Таким образом, полная вероятность двухфотонного перехода $W_{2s,1s}^{(2\gamma)}$, проинтегрированная по направлениям фотонов, равна

$$W_{2s\,1s}^{(2\gamma)}(\mathcal{E}_{\max}) = W_0(\mathcal{E}_{\max}) = W_{2s}^{(2\gamma)} + \frac{\widetilde{W}_{2p}^{(2\gamma)} e^2 \mathcal{E}_{\max}^2}{\Delta^2}$$
(9.10)
\$\approx 3.98116 \times 10^{-16} a.u. \approx 16.4585 c^{-1},\$

т.е. в два раза больше, чем в отсутствие поля.

В принципе, зависимость от внешнего электрического поля в вероятности перехода $W^{(2\gamma)}_{\overline{2s}\,1s}$ может рассматривается как поправка, которая не

исчезает после интегрирования по направлениям испускания фотонов. Если обратиться к радиационной поправке, рассмотренной в [246], то легко увидеть, что радиационная поправка (выражение (36) в [246]) $\delta\Gamma_{2s}/\Gamma_{2s} = -2.020536 \frac{\alpha}{\pi} (\alpha Z)^2 \ln \left[(\alpha Z)^{-2} \right] = -2.4594 \times 10^{-6}$ соответствует величине поля $|\mathcal{E}_{\rm r}| \approx \mathcal{E}_{\rm max} \sqrt{\delta\Gamma_{2s}/\Gamma_{2s}} \approx 2.8 \times 10^{-8}$ а.u. ≈ 90 В/см. Такие поля часто используются в спектроскопических экспериментах, поэтому этот эффект также следует учитывать.

Относительная разница вероятностей двухфотонного распада атомов водорода и анти-водорода при максимальном значении \mathcal{E}_{max} равна

$$\frac{dW_{\overline{2s},1s}^{(2\gamma)}(\mathbf{H})}{W_0(\mathcal{E}_{\max})d\boldsymbol{\nu}d\boldsymbol{\nu}'} - \frac{dW_{\overline{2s},1s}^{(2\gamma)}(\bar{\mathbf{H}})}{W_0(\mathcal{E}_{\max})d\boldsymbol{\nu}d\boldsymbol{\nu}'} = (9.11)$$

$$2\beta_1(\mathcal{E}_{\max})(\boldsymbol{\nu}_{\mathcal{E}}\boldsymbol{\nu} + \boldsymbol{\nu}_{\mathcal{E}}\boldsymbol{\nu}')(1 + (\boldsymbol{\nu}\boldsymbol{\nu}')^2) + 2\beta_2(\mathcal{E}_{\max})(\boldsymbol{\nu}_{\mathcal{E}}\boldsymbol{\nu} + \boldsymbol{\nu}_{\mathcal{E}}\boldsymbol{\nu}')(1 + \boldsymbol{\nu}\boldsymbol{\nu}) = (\boldsymbol{\nu}_{\mathcal{E}}\boldsymbol{\nu} + \boldsymbol{\nu}_{\mathcal{E}}\boldsymbol{\nu}')(0.000280111 + 0.00024397(\boldsymbol{\nu}\boldsymbol{\nu}') + 0.0000361414(\boldsymbol{\nu}\boldsymbol{\nu}')).$$

Это соотношение близко к 0.028% и представляет собой крошечный эффект, отражающий разницу между материей и антиматерией даже при максимальной напряженности поля \mathcal{E}_{max} .

Наконец, можно провести аналогичные вычисления для случая $\overline{2p} \rightarrow 1s + 2\gamma$. Смешивание состояний выражется следующим образом:

$$|\overline{2p},\mu''\rangle = |2p,\mu''\rangle - \eta \sum_{\mu} \langle 2s,\mu''|e\boldsymbol{\mathcal{E}}\mathbf{r}|2p,\mu\rangle|2s,\mu''\rangle.$$
(9.12)

В этом случае двухфотонный переход без внешнего электрического поля будет обеспечиваться суммой распадов *E1E2* и *E1M1*, а интерференционные члены будут такими же. Результат сводится к

$$dW_{\overline{2p},1s}^{(2\gamma)} = \left[dW_{2p,1s}^{(E1E2)} + dW_{2p,1s}^{(E1M1)} + \frac{9e^{2}\mathcal{E}^{2}}{\Delta^{2}} dW_{2s,1s}^{(E1E1)} + \right.$$

$$\left. \frac{0.000230135}{\pi^{3}} \frac{\Gamma_{2p}}{\Delta^{2}} [e\mathcal{E}\boldsymbol{\nu} + e\mathcal{E}\boldsymbol{\nu}'] \left(1 + (\boldsymbol{\nu}\boldsymbol{\nu}')^{2} \right) (\alpha Z)^{7} + \right.$$

$$\left. \frac{0.0000340919}{\pi^{3}} \frac{\Gamma_{2p}}{\Delta^{2}} [e\mathcal{E}\boldsymbol{\nu} + e\mathcal{E}\boldsymbol{\nu}'] \left(1 + \boldsymbol{\nu}\boldsymbol{\nu}' \right) (\alpha Z)^{7} \right] d\boldsymbol{\nu} d\boldsymbol{\nu}',$$
(9.13)

$$\frac{dW_{\overline{2p},1s}^{(2\gamma)}}{d\boldsymbol{\nu}d\boldsymbol{\nu}'} = W_0 \left[1 \mp \beta_1(\mathcal{E}) \left[\boldsymbol{\nu}_{\mathcal{E}} \boldsymbol{\nu} + \boldsymbol{\nu}_{\mathcal{E}} \boldsymbol{\nu}' \right] (1 + (\boldsymbol{\nu}\boldsymbol{\nu}')^2) \mp \beta_2(\mathcal{E}) \left[\boldsymbol{\nu}_{\mathcal{E}} \boldsymbol{\nu} + \boldsymbol{\nu}_{\mathcal{E}} \boldsymbol{\nu}' \right] (1 + \boldsymbol{\nu}\boldsymbol{\nu}') \right],$$
(9.14)

где $W_0 = W_{2p,1s}^{(E1E2)} + W_{2p,1s}^{(E1M1)} + 9e^2 D^2 W_{2s1s}^{(E1E1)} / \Delta^2$, а функции $\beta_1(D)$, $\beta_2(D)$ определены как и прежде (9.10). Знаки (+) и (-) относятся к атомам водорода и анти-водорода, соответственно.

Максимальные значения β_1 (или β_2) достигаются для

$$\mathcal{E}_{\max} = \frac{\Delta}{3|e|w^{2\gamma}} \approx 7.1 \times 10^{-11} \text{ a.u.} \approx 0.23 \text{ B/cm.}$$
(9.15)

Соответствующее максимальное значение $dW^{(2\gamma)}_{\overline{2p},1s}$ равно

$$\frac{dW_{\overline{2p},1s}^{(2\gamma)}}{d\boldsymbol{\nu}d\boldsymbol{\nu}'} = W_0(\mathcal{E}_{\max}) \left[1 \mp 0.00048613 \left[\boldsymbol{\nu}_{\boldsymbol{\mathcal{E}}} \boldsymbol{\nu} + \boldsymbol{\nu}_{\boldsymbol{\mathcal{E}}} \boldsymbol{\nu}' \right] (1 + (\boldsymbol{\nu}\boldsymbol{\nu}')^2) \qquad (9.16)$$
$$\mp 0.000720147 \left[\boldsymbol{\nu}_{\boldsymbol{\mathcal{E}}} \boldsymbol{\nu} + \boldsymbol{\nu}_{\boldsymbol{\mathcal{E}}} \boldsymbol{\nu}' \right] (1 + \boldsymbol{\nu}\boldsymbol{\nu}') \right].$$

После интегрирования по направлениям вылета фотонов квадратичный по полю вклад равен

$$W_{\overline{2p},1s}^{(2\gamma)}(\mathcal{E}_{\max}) = W_{2p,1s}^{(E1E2)} + W_{2p,1s}^{(E1M1)} + \frac{9e^2 \mathcal{E}_{\max}^2 W_{2s,1s}^{(E1E1)}}{\Delta^2}$$

$$\approx 4.09 \times 10^{-22} \text{ a.u.} \approx 1.69 \times 10^{-5} \text{ c}^{-1}.$$
(9.17)

Максимальная относительная разность вероятностей (в поле \mathcal{E}_{\max}) равна

$$\frac{dW_{\overline{2p},1s}^{(2\gamma)}}{W_0(\mathcal{E}_{\max})d\boldsymbol{\nu}d\boldsymbol{\nu}'}(\mathbf{H}) - \frac{dW_{\overline{2p},1s}^{(2\gamma)}}{W_0(\mathcal{E}_{\max})d\boldsymbol{\nu}d\boldsymbol{\nu}'}(\bar{\mathbf{H}}) = (9.18)$$

$$2\beta_1(\mathcal{E}_{\max})(\boldsymbol{\nu}_{\mathcal{E}}\boldsymbol{\nu} + \boldsymbol{\nu}_{\mathcal{E}}\boldsymbol{\nu}')(1 + (\boldsymbol{\nu}\boldsymbol{\nu}')^2) + 2\beta_2(\mathcal{E}_{\max})(\boldsymbol{\nu}_{\mathcal{E}}\boldsymbol{\nu} + \boldsymbol{\nu}_{\mathcal{E}}\boldsymbol{\nu}')(1 + \boldsymbol{\nu}\boldsymbol{\nu}')$$

$$= (\boldsymbol{\nu}_{\mathcal{E}}\boldsymbol{\nu}) + \boldsymbol{\nu}_{\mathcal{E}}\boldsymbol{\nu}')(0.0111629 + 0.0097226(\boldsymbol{\nu}\boldsymbol{\nu}')^2 + 0.00144029(\boldsymbol{\nu}\boldsymbol{\nu}').$$

Это соотношение оказывается близким к 1%. Однако, любое прямое наблюдение этой разницы должно быть затруднено из-за превалирующего фона от однофотонного перехода $2p \rightarrow 1s + \gamma$.

9.3. Распад высоковозбужденных состояний во внешнем электрическом поле

В предыдущих разделах диссертации, см. 9.1, 9.2, было показано, что линейный по полю вклад, возникающий в дифференциальной вероятности перехода, приводит к существенному различию спектров Н и Ĥ. Это отклонение исчезает после интегрирования по направлениям излучения фотонов, т.е. в полной вероятности перехода. Тем не менее разницу, возникающую в электрическом поле, можно наблюдать в экспериментах, когда излучение фотонов регистрируется в заданном направлении. Согласно [66], образование атомов анти-водорода в низколежащих состояниях весьма затруднительно, и, следовательно, теоретический анализ распадов высоковозбужденных состояний может быть использован для выявления возможных различий в атомах H и Ĥ.

Используя технику [106, 112–114], в данном разделе приведены оценки вероятностей распадов высоковозбужденных состояний. В частности, сравнение дифференциальных вероятностей перехода атомов водорода и антиводорода проиллюстрировано на примере смешивания состояний *ns*, *np*. Затем рассчитаны полные вероятности распада (одинаковые для атомов H и Ĥ) смешанных состояний *ns* для произвольных главных квантовых чисел начального и конечного состояний. Выбор состояний *ns* и *np* обусловлен главным образом тем, что перемешивание сильнее для близких состояний противоположной четности. В данном случае лэмбовский сдвиг выступает в качестве параметра, позволяющего полностью перемешать состояния *ns* и *np* в очень слабых полях, которые можно ассоциировать с "остаточными" полями. Основная цель - продемонстрировать различие в спектрах атомов водорода и анти-водорода для ридберговских состояний, которые могут имитировать эффекты нарушения CPT-симметрии.

Согласно теории возмущений волновая функция атомного уровня, находящегося под действием внешнего электрического поля [103, 104], может быть записана как

$$|\overline{ns}m_{j_s}\rangle = |nsm_{j_s}\rangle + \eta_n \sum_{m_{j_p}} \langle npm_{j_p} | e \mathcal{E} \boldsymbol{r} | nsm_{j_s} \rangle | npm_{j_p} \rangle,$$

$$\eta_n = \frac{1}{\Delta E_{L(f)}^{(n)} + i\Gamma_{np}/2},$$
(9.19)

где $m_{j_{s(p)}}$ соответствует проекции полного углового момента электрона $(j_{s(p)})$ состояния ns(p), n - главное квантовое число водородного состояния, $\Delta E_{L(f)}^{(n)}$ - лэмбовский сдвиг (*L*-индекс) или расщепление тонкой структуры (*f*) n-го атомного состояния, Γ_{np} - ширина уровня np, e — заряд электрона. Матричный элемент $\langle npm_{j_p} | e \mathcal{E} r | nsm_{j_s} \rangle$ представляет дипольное взаимодействие атомного электрона с внешним электрическим полем с напряженностью \mathcal{E} , r - радиус-вектор атомного электрона.

Проводя соответствующие аналитические вычисления, можно найти

$$\langle npm_{j_p} | e \boldsymbol{\mathcal{E}} \boldsymbol{r} | nsm_{j_s} \rangle = \frac{\sqrt{3}}{2} n \sqrt{n^2 - 1} \sum_q (-1)^{q + j_s + j_p} e \boldsymbol{\mathcal{E}}_q C_{j_s \, m_{j_s} \, 1 - q}^{j_p \, m_{j_p}}, \quad (9.20)$$

где $C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j m}$ -коэффициент Клебша-Гордана с суммарным угловым моментом j и его проекцией m, определяемых правилом суммирования угловых моментов j_1 , j_2 и их проекций m_1 , m_2 [179], \mathcal{E}_q - сферическая компонента q вектора напряженности электрического поля \mathcal{E} .

Ограничиваясь рассмотрением однофотонных переходов во внешнем электрическом поле (см. раздел 9.1), необходимо учитывать также перемешивание низколежащих состояний. Полная амплитуда процесса однофотонного излучения должна включать $\overline{ns} \to \overline{ks} + 1\gamma$ и $\overline{ns} \to \overline{kp} + 1\gamma(E1)$ каналы распада:

$$U_{\overline{nsm},\overline{ksm'}}^{P} = U_{nsm,\,ksm'}^{P} + \qquad (9.21)$$

$$\eta_{n} \sum_{m_{j_{p}}} \langle nsm| e\boldsymbol{\mathcal{E}}\boldsymbol{r} | npm_{j_{p}} \rangle U_{npm_{j_{p}},\,ksm'}^{P} + \eta_{k} \sum_{m_{j_{p}}} \langle kpm_{j_{p}} | e\boldsymbol{\mathcal{E}}\boldsymbol{r} | ksm' \rangle U_{nsm,\,kpm_{j_{p}}}^{P},$$

где примесь ks состояния к kp уровню отброшена ввиду ее незначительности (соответствующий магнитный переход приводит к существенной малости, см. (8.20)), а индекс P, как и ранее, означает приближение Паули. Проекции m и m' относятся к угловым моментам начального ns и конечного ks состояний, соответственно. Проводя необходимые вычисления, вероятность перехода приводится к виду:

$$\frac{dW_{\overline{ns,ks}}^{(1\gamma)}}{d\boldsymbol{\nu}} = \frac{3}{8\pi} \frac{dW_{ns,ks}^{(1\gamma)}}{d\boldsymbol{\nu}} \left[1 - (-1)^{j_s + j_p} e \mathcal{E}(\boldsymbol{\nu_{\mathcal{E}}\nu}) \frac{n\sqrt{n^2 - 1}}{2\sqrt{3}} \frac{\Gamma_{np}}{w_1 \Delta_1^2} - (9.22) \right]$$
$$(-1)^{j_s + j_p} e \mathcal{E}(\boldsymbol{\nu_{\mathcal{E}}\nu}) \frac{k\sqrt{k^2 - 1}}{6} \frac{\Gamma_{kp}}{w_2 \Delta_2^2} + \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{w_1^2 \Delta_1^2} \frac{n^2(n^2 - 1)}{12} + \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{w_2^2 \Delta_2^2} \frac{k^2(k^2 - 1)}{36} \right].$$

Здесь $\nu_{\mathcal{E}}$ - единичный вектор направления поля ($\nu_{\mathcal{E}} \equiv \mathcal{E}/\mathcal{E}, \mathcal{E}$ - амплитуда поля), а параметры Δ_i и w_i (i = 1, 2) определены следующим образом:

$$\Delta_{1} = \sqrt{\left(\Delta E_{L(f)}^{(n)}\right)^{2} + \frac{1}{4}\Gamma_{np}^{2}}, \quad \Delta_{2} = \sqrt{\left(\Delta E_{L(f)}^{(k)}\right)^{2} + \frac{1}{4}\Gamma_{kp}^{2}}, \quad (9.23)$$
$$w_{1} = \sqrt{\frac{W_{ns,ks}^{(1\gamma)}}{W_{np,ks}^{(1\gamma)}}} \quad \mathbf{u} \quad w_{2} = \sqrt{\frac{W_{ns,ks}^{(1\gamma)}}{W_{ns,kp}^{(1\gamma)}}}.$$

Здесь учтено, что ширина состояния $np \ \Gamma_{np} = \Gamma_{np_{1/2}} = \Gamma_{np_{3/2}}$ [117]. Обозначения $W_{ns,ks}^{(1\gamma)}$, $W_{np,ks}^{(1\gamma)}$ и $W_{ns,kp}^{(1\gamma)}$ представляют собой вероятности однофотонного перехода для соответствующих уровней *ns* и *np*. Знак $(-1)^{j_s+j_p}$ в выражении (9.22) показывает противоположный вклад состояний $np_{1/2}$ и $np_{3/2}$. Эта разница возникает по той причине, что состояние *ns* находится между $np_{3/2}$ и $np_{1/2}$ для атома водорода.

В выражении (9.22) последние два члена не зависят от направления излученного фотона или направления электрического поля. В отличие от линейных по полю вкладов, квадратичные по полю слагаемые сохраняется после усреднения по направлениям вылета фотонов. Следует отметить, что формальная Т-неинвариантность множителя ($\nu_{\mathcal{E}}\nu$) в (9.22) ($\nu_{\mathcal{E}}$ - Т-четный и ν - Т-нечетный векторы) компенсируется зависимостью от $\Gamma_{n(k)p}$ [229].

Согласно выражению (9.22) дифференциальная вероятность перехода $dW^{(1\gamma)}_{\overline{ns},\overline{ks}}(\boldsymbol{\nu})$ выстроена так: первый член соответствует невозмущенному распаду $ns \to ks + 1\gamma(M1)$, дополнительные члены (линейные и квадратичные по электрическому полю \mathcal{E}) представляют собой интерференцию M1, E1 фотонов и вероятность испускания для распадов $ns \to ks + 1\gamma(M1)$ и $ns \to kp + 1\gamma(E1), np \to ks + 1\gamma(E1)$. Линейные члены пропорциональны заряду электрона, поэтому для атомов водорода и анти-водорода они имеют противоположный знак. Все остальные слагаемые в (9.22) идентичны для водорода и анти-водорода. Наблюдение контраста в спектрах водорода и антиводорода становится более резким, когда излучение фотонов регистрируется под углом в (против) направлении поля. Соответственно, в перпендекулярном направлении эффект обнуляется.

Сравнение дифференциальных вероятностей переходов удобнее проводить переписав выражение (9.22) в виде:

$$dW_{\overline{ns},\overline{ks}}^{(1\gamma)} = \frac{3}{8\pi} dW_{ns,ks}^{(1\gamma)} \left(1 + e^2 \mathcal{E}_0^2 a^2\right) \left[1 \pm (-1)^{1+j_s+j_p} \frac{e\mathcal{E}(\boldsymbol{\nu_{\mathcal{E}}\nu})b}{1 + e^2 \mathcal{E}_0^2 a^2}\right] d\boldsymbol{\nu}, \quad (9.24)$$

где знак \pm в (9.24) соответствует водороду (+) и анти-водороду (-), а заряд электрона *е* входит по модулю. Коэффициенты *а* и *b* определены соотношениями:

$$a = \sqrt{\frac{n^2(n^2 - 1)}{12w_1^2 \Delta_1^2} + \frac{k^2(k^2 - 1)}{36w_2^2 \Delta_2^2}},$$

$$b = \frac{n\sqrt{n^2 - 1}}{2\sqrt{3}} \frac{\Gamma_{np}}{w_1 \Delta_1^2} + \frac{k\sqrt{k^2 - 1}}{6} \frac{\Gamma_{kp}}{w_2 \Delta_2^2}.$$
(9.25)

Второе слагаемое в квадратных скобках выражения (9.24) представляет собой ожидаемую разницу в спектрах атомов Н и П во внешнем поле (при регистрации сигнала под определенным углом). Действуя аналогично с предыдущими разделами, можно определить значение поля при котором будет достигнуто максимальное отличие:

$$e\mathcal{E}^{\max} = \frac{1}{a}.\tag{9.26}$$

Относительная разница $dW^{(1\gamma)}_{\overline{ns},\overline{ks}}(\mathbf{H})$ и $dW^{(1\gamma)}_{\overline{ns},\overline{ks}}(\mathbf{\bar{H}})$ для **H** и **H** атомов в поле

(9.26) равна

$$\delta(\mathcal{E}^{\max}) = \frac{dW_{\overline{ns},\overline{ks}}^{(1\gamma)}(\mathbf{H}) - dW_{\overline{ns},\overline{ks}}^{(1\gamma)}(\overline{\mathbf{H}})}{\frac{3}{8\pi}W_{ns,ks}^{(1\gamma)}(1 + e^{2}\mathcal{E}^{2}a)}$$
(9.27)
$$= (-1)^{1+j_{s}+j_{p}}(\boldsymbol{\nu_{\mathcal{E}}\nu})\frac{b}{a} = (-1)^{1+j_{s}+j_{p}}(\boldsymbol{\nu_{\mathcal{E}}\nu})\frac{\frac{n\sqrt{n^{2}-1}\Gamma_{np}}{2\sqrt{3}w_{1}\Delta_{1}^{2}} + \frac{k\sqrt{k^{2}-1}\Gamma_{kp}}{6w_{2}\Delta_{2}^{2}}}{\sqrt{\frac{n^{2}(n^{2}-1)}{12w_{1}^{2}\Delta_{1}^{2}} + \frac{k^{2}(k^{2}-1)}{36w_{2}^{2}\Delta_{2}^{2}}}}.$$

Случай n = 2 и k = 1 (случай смешивания 2s и 2p состояний) приводит к результату [114], см. предыдущий раздел. Следует отметить, что примесь состояний $np_{1/2}$ и $np_{3/2}$ дает вклад в $\delta(\mathcal{E}^{\max})$ с противоположным знаком. Однако примесь состояния $np_{3/2}$ меньше, поскольку $\Delta E_L^{(n)} \ll \Delta E_f^{(n)}$. Таким образом, расщеплением тонкой структуры по отношению к лэмбовскому сдвигу можно пренебречь. Более того, выражение (9.27) можно существенно упростить, разложив в ряд по степеням 1/n. Доминирующий вклад в обоих случаях $k \ll n$ и $k \sim n$ равен

$$\delta(\mathcal{E}^{\max}) \approx (\boldsymbol{\nu_{\mathcal{E}}}\boldsymbol{\nu}) \frac{\Gamma_{np}}{\Delta_1} \approx (\boldsymbol{\nu_{\mathcal{E}}}\boldsymbol{\nu}) \frac{\Gamma_{np}}{\Delta E_L^{(n)}}$$
(9.28)

при условии $\Gamma_{np} \ll E_L^{(n)}$.

Результаты (9.27), (9.28) позволяют определить спектральную разницу между атомами H и $\overline{\text{H}}$ в зависимости от главных квантовых чисел n, k начального и конечного состояний, соответственно. В Таблице 9.1 приведены значения безразмерной функции $\delta(\mathcal{E})$, определенной согласно (9.27), в зависимости от значений главных квантовых чисел n и k для величины электрического поля \mathcal{E}^{max} (9.26) и 500 В/м. В последнем столбце Таблицы 9.1 напряженность электрического поля связана с экспериментальным значением. Следует отметить, что значения \mathcal{E}^{max} в Таблице 9.1 представляют собой скорее величины, которые можно отнести к "паразитным" полям.

Таким образом, показано, что существенное различие (~ 0.1%) возникает для дифференциальных вероятностей перехода в очень слабых электрических полях. Эта разница исчезает после интегрирования по направ-

Таблица 9.1. Представлены численные значения $\delta(\mathcal{E})$ для различных значений главных квантовых чисел начального, n, и конечного, k, состояний. В третьем столбце представлена величина \mathcal{E}^{\max} в В/м в зависимости от главных квантовых чисел n и k. В четвертом и пятом столбцах приведены значения $\delta(\mathcal{E}^{\max})$ и $\delta(\mathcal{E})$ при $\mathcal{E} = 500$ В/м в случае ($\nu_{\mathcal{E}}\nu$) = 1, т.е. когда детектирование фотона происходит в направлении поля.

n	k	$\mathcal{E}^{\max}, \ \mathrm{B/M}$	$\delta(\mathcal{E}^{\max})$	$\delta(\mathcal{E})$ при $D_0=500~\mathrm{B/M}$
2	1	0.005	0.094	$1.97 \cdot 10^{-6}$
3	1	0.0009	0.087	$3.14 \cdot 10^{-7}$
3	2	0.0001	0.094	$3.77 \cdot 10^{-8}$
4	1	0.0002	0.097	$7.94 \cdot 10^{-8}$
4	2	0.00003	0.098	$1.18 \cdot 10^{-7}$
4	3	$5.9\cdot10^{-6}$	0.11	$2.60 \cdot 10^{-9}$
100	1	$1.6 \cdot 10^{-11}$	0.099	$6.33 \cdot 10^{-15}$
100	2	$4.2 \cdot 10^{-11}$	0.099	$1.65 \cdot 10^{-14}$
100	3	$7.2 \cdot 10^{-11}$	0.099	$2.85 \cdot 10^{-14}$

лениям испускания фотонов, т.е. в полной вероятности распада. Имеются также квадратичные по полю слагаемые, которые вносят вклад в общую скорость распада. Это приводит к сильной модификации ширины соответствующего уровня. Согласно правилам отбора однофотонный распад $ns \rightarrow 1s$ определяется испусканием магнитного дипольного фотона изолированного атома. Однако примесь состояния np позволяет излучать электрический дипольный (E1) фотон непосредственно в основное состояние. В случае, когда состояния 2s, 2p смешаны, этот канал дает основной вклад в ширину уровня [103–105]. При критической напряженности поля $\mathcal{E}_c = 475$ В/см ширина состояния $\overline{2s}$ равна ширине уровня 2p. Для высоковозбужденных состояний напряженность поля должна быть существенно меньше \mathcal{E}_c , поскольку лэмбовский сдвиг уменьшается с ростом главного квантового числа. Таким образом, можно ожидать существенного сокращения времен жизни ридберговских состояний в слабом электрическом поле.

Существует два способа определения ширины уровней: а) вычисление

мнимой части поправки на собственную энергию [8,121], и б) суммирование всех парциальных вероятностей переходов в нижележащие уровни. Далее используется второе. А именно, из выражения (9.22) следует, что дополнительная скорость затухания из-за электрического дипольного излучения задается следующим образом:

$$\frac{W_{\overline{ns},\overline{ks}}^{(E1)}}{e^2 \mathcal{E}^2} = \frac{n^2 (n^2 - 1)}{12\Delta_1^2} W_{np,ks}^{(E1)} + \frac{k^2 (k^2 - 1)}{36\Delta_2^2} W_{ns,kp}^{(E1)}.$$
(9.29)

Определение ширины уровней высоковозбужденных состояний требует рассмотрения каскадных переходов, которые приближенно можно описать однофотонными распадами в промежуточные атомные уровни [82, 120]. В этом случае для изолированного атома возникает сумма по всем парциальным вероятностям перехода $W_{ns,kp}^{(1\gamma)}$. Поэтому при наличии электрического поля следует написать

$$\Gamma_{\text{tot}} = \Gamma_{ns} + \Gamma_{\overline{ns}} = \sum_{k=1}^{n-1} W_{ns\,kp}^{(1\gamma)} + \sum_{k=1}^{n-1} W_{ns\,ks}^{(1\gamma)} + \sum_{k=1}^{n-1} W_{\overline{ns}\,\overline{ks}}^{(E1)}, \qquad (9.30)$$

где Γ_{ns} - естественная ширина уровня ns, т.е. сумма парциальных вероятностей перехода из исходного состояния ns на все нижележащие атомные уровни kp, а $\Gamma_{\overline{ns}}$ в (9.30) представляет собой вклад дополнительных каналов распада, возникающих в электрическом поле. Вероятность перехода $W_{ns,ks}^{(1\gamma)}$ соответствует M1 переходу и приводит к незначительному вкладу в ширину уровня Γ_{tot} (см., например, Таблицу 9.2).

В принципе, суммирование по k в выражении (9.30) можно выполнить с использованием формулы Гордона для вероятностей переходов $W_{ns,kp}^{1\gamma}$, $W_{np,ks}^{(1\gamma)}$ [5]. Однако зависимость от главного квантового числа k следует учитывать и в множителе Δ_2 . Кроме того, применимость формулы (9.19) для расчета вероятностей перехода требует анализа величины напряженности поля \mathcal{E} . Теория возмущений справедлива, когда

$$\left|\frac{\langle np|e\boldsymbol{\mathcal{E}r}|ns\rangle}{\Delta E_L^{(n)} + i\Gamma_{np}/2}\right| < 1 \tag{9.31}$$

и, следовательно, $|\langle np|e {\cal E} {\it r}|ns \rangle| < \Delta E_L^{(n)}$. Учитывая, что $\Delta E_L^{(n)} \sim 1/n^3$ [5], можно обнаружить

$$\mathcal{E}_c^{(n)} \sim \frac{1}{n^5} \mathcal{E}_c,\tag{9.32}$$

где \mathcal{E}_c определяет напряженность поля, когда происходит 100%-ое смешивание состояний 2s и 2p в атоме водорода, т.е. $\mathcal{E}_c = 475$ B/см. Масштабирование напряженности поля согласно (9.32) известно как предел Инглиса-Теллера [261]. Таким образом, полное смешивание состояний ns и np должно возникать в очень слабом электрическом поле.

Оценивая напряженность электрического поля по формуле (9.32) для каждого *n*-го начального состояния, численные результаты для парциальных вероятностей, естественных ширин, а также величин индуцированных внешним электрическим полем приведены в Таблицах 9.2, 9.3. В Таблице 9.2 представлен вклад слагаемых, квадратичных по полю, (9.29), как функции главных квантовых чисел *n* и *k*. Вероятности однофотонного перехода $W_{ns,ks}^{(1\gamma)}, W_{ns,kp}^{(1\gamma)}, W_{np,ks}^{(1\gamma)}$ и $W_1 \equiv \frac{n^2}{12}(n^2 - 1)e^2D_c^{(n)^2}W_{np,ks}^{(1\gamma)}/\Delta_1^2$, $W_2 \equiv \frac{k^2}{36}(k^2 - 1)e^2D_c^{(n)^2}W_{ns,kp}^{(1\gamma)}/\Delta_2^2$ указаны в обратных секундах. Расчеты вероятностей спонтанного однофотонного распада проведены в рамках стандартной квантовой электродинамики и их значения можно найти, например, в [262–264].

В частности, из Таблицы 9.2 следует, что возникающие в поле вероятности переходов W_1 и W_2 дают вклад на уровне парциальных вероятностей однофотонного распада состояний np. Таким образом, ширина смешанного состояния \overline{ns} становится сравнимой с естественной шириной Γ_{np} в очень слабом поле $\mathcal{E}_c^{(n)}$ и превышает естественную ширину ns состояния n = 100 оценивается как $4 \cdot 10^{-7}$ B/см, а соответствующая ширина уровня $\Gamma_{\overline{100s}}$ составляет примерно 8.5×10^3 с⁻¹. Следовательно, ширина смешанного атомного уровня $\overline{100s}$ на порядок больше естественной ширины Γ_{100s} , а время жизни короче в присутствии очень слабого поля, которое может быть связано с "остаточными" ("паразитными") полями.

Более подробно рассмотрен вклад квадратичных по полю слагаемых,

Таблица 9.2. Численные значения $W_1 \equiv \frac{n^2(n^2-1)}{12} e^2 \mathcal{E}^2 W_{np,ks}^{(1\gamma)} / \Delta^2$ и $W_2 \equiv \frac{k^2(k^2-1)}{36} \frac{e^2 \mathcal{E}^2 W_{ns,kp}^{(1\gamma)}}{\Delta_2^2}$ для различных значений главных квантовых чисел начального *n* и конечного *k* состояний (в обратных секундах). В первом и втором столбцах указаны значения главных квантовых чисел *n* и *k*. Третий столбец соответствует значениям вероятностей перехода $W_{ns,ks}^{(1\gamma)}$, а значения $W_{np,ks}^{(1\gamma)}$ в s^{-1} приведены в четвёртом столбце [262–264]. В пятом столбце представлены значения $W_{np,ks}^{(1\gamma)}$ вероятности перехода. Используемые значения лэмбовского сдвига ΔE_L в приведены в шестом столбце. В седьмом и восьмом столбцах указаны значения естественной ширины уровней Γ_{np} и Γ_{ns} , соответственно. Γ_{np} и Γ_{ns} получены как сумма всех парциальных вероятностей *E*1 переходов в нижележащие состояния. Девятый и десятый столбцы представляют вклады квадратичных членов в (9.29). Использовалась напряженность поля $\mathcal{E}_c^{(n)}$, которая приблизительно обеспечивает полное смешивание *ns* и *np* состояний. Все значения приводятся в обратных секундах (кроме лэмбовского сдвига).

n	k	$W^{(1\gamma)}_{nsks}$	$W_{nskp}^{(1\gamma)}$	$W^{(1\gamma)}_{npks}$	$\Delta E_L^{(n)}$	Γ_{np}	Γ_{ns}	W_1	W_2
2	1	$2.495 \cdot 10^{-6}$	_	$6.265\cdot 10^8$	1057.911	$6.265\cdot 10^8$	8.229	$2.063\cdot 10^8$	0
3	1	$1.109 \cdot 10^{-6}$	-	$1.672\cdot 10^8$	344.896	$1.897\cdot 10^8$	$6.314 \cdot 10^{6}$	$5.394\cdot 10^6$	0
3	2	$1.877 \cdot 10^{-9}$	$6.314\cdot 10^6$	$2.245\cdot 10^7$	344.896	—	—	$7.2398\cdot 10^6$	$1.2021\cdot 10^5$
4	1	$5.303 \cdot 10^{-7}$	—	$6.819\cdot 10^7$	133.084	$8.092\cdot 10^7$	$4.414 \cdot 10^{6}$	$2.771 \cdot 10^7$	0
4	2	$1.617\cdot10^{-9}$	$2.578\cdot 10^6$	$9.668 \cdot 10^6$	133.084	_	_	$3.929\cdot 10^6$	276.37
4	3	$2.047 \cdot 10^{-11}$	$1.836\cdot 10^6$	$3.065\cdot 10^6$	133.084	—	—	$1.246\cdot 10^6$	$1.111 \cdot 10^4$
100	1	$3.949 \cdot 10^{-11}$	_	$4.185\cdot 10^3$	$1.058 \cdot 10^{-3}$	$\approx 5.25\cdot 10^3$	$\approx 0.476 \cdot 10^3$	$6.371 \cdot 10^3$	0
100	2	$2.033 \cdot 10^{-13}$	153.31	613.19	$1.058\cdot10^{-3}$	_	_	933.7	$1.077 \cdot 10^{-17}$
100	3	$9.195 \cdot 10^{-15}$	101.105	206.37	$1.058\cdot10^{-3}$	_	_	314.2	$4.011 \cdot 10^{-16}$
100	4	_	66.866	96.728	$1.058\cdot10^{-3}$	_	_	147.	$5.937 \cdot 10^{-15}$
100	5	_	46.506	54.171	$1.058\cdot10^{-3}$	_	_	82.48	$3.989 \cdot 10^{-14}$
100	6	_	33.856	33.896	$1.058\cdot10^{-3}$	_	_	51.61	$1.821 \cdot 10^{-13}$
100	7	_	25.580	22.877	$1.058\cdot10^{-3}$	_	_	34.84	$6.474 \cdot 10^{-13}$
100	8	_	19.916	16.311	$1.058\cdot10^{-3}$	_	_	24.84	$1.925 \cdot 10^{-12}$
100	9	_	15.890	12.123	$1.058\cdot 10^{-3}$	_		18.46	$5.005 \cdot 10^{-12}$
100	10	_	12.938	9.3092	$1.058 \cdot 10^{-3}$	—	_	14.17	$6.225 \cdot 10^{-12}$

n	k	$W^{(1\gamma)}_{nsks}$	$W^{(1\gamma)}_{nskp}$	$W_{npks}^{(1\gamma)}$	W_1	W_2
55	1	$2.372 \cdot 10^{-10}$		$2.516 \cdot 10^4$	$1.104 \cdot 10^4$	
55	2	$1.219 \cdot 10^{-12}$	921.77	$3.686 \cdot 10^3$	$1.617 \cdot 10^{3}$	$4.09 \cdot 10^{-13}$
55	3	$5.499 \cdot 10^{-14}$	608.11	$1.241 \cdot 10^{3}$	544.3	$1.52 \cdot 10^{-11}$
55	4		402.39	581.47	255.2	$2.26 \cdot 10^{-10}$
55	5		280.06	325.7	142.9	$1.52 \cdot 10^{-9}$
55	6		204.06	203.86	89.46	$6.93 \cdot 10^{-9}$
55	7		154.33	137.64	60.41	$2.47 \cdot 10^{-8}$
55	8		120.3	98.19	43.09	$7.35 \cdot 10^{-8}$
55	9		96.111	73.028	32.05	$1.91 \cdot 10^{-7}$
55	10		78.372	56.12	24.63	$4.48 \cdot 10^{-7}$
55	15		35.0001	20.657	9.066	$1.16 \cdot 10^{-5}$
55	30		8.7556	4.05	1.777	$2.98 \cdot 10^{-3}$
55	40		5.2734	2.2317	0.979	0.032
55	45		4.5069	1.8316	0.804	0.089
$\overline{55}$	$\overline{50}$		4.2245	1.6413	0.721	0.238
55	54		4.4807	1.6496	0.724	0.546

Таблица 9.3. Обозначения те же, что и в Таблице 9.2, используется значение $D_c^{(55)} \approx 3 \cdot 10^{-5}$ В/см.

как функции главного квантового числа k, для начального состояния $\overline{55s}$ при напряженности поля $\mathcal{E}_c^{(55)} \approx 3 \times 10^{-5}$ В/см. Результаты, приведенные в Таблице 9.3, показывают, что смешивание нижних состояний становится значимым для переходов между ближайшими атомными уровнями, тогда как основной вклад следует от первого слагаемого в правой части выражения (9.29). Суммируя все вероятности парциальных переходов в Таблице 9.3, можно найти, что $\Gamma_{55s} \approx 6.5 \times 10^3 \text{ c}^{-1}$, $\Gamma_{55p} \approx 3.2 \times 10^4 \text{ c}^{-1}$, и ширина, индуцированная электрическим полем, $\Gamma_{\overline{55s}} \approx 1.4 \times 10^4 \text{ c}^{-1}$.

Значения в Таблицах 9.2, 9.3 следует сравнить с шириной уровней, оцененной в [265–267]. Основной результат расчетов [265–267] заключается в том, что значение соответствующих ширин может превышать величину наибольшей вероятности перехода Лаймана- $\alpha \sim 6 \cdot 10^8 \ s^{-1}$ в полях, нарушающих соотношение (9.32), см., например, [268]. Однако рассматриваемые в нашей статье напряженности поля соответствуют скорее очень слабым полям. Используя электрическое поле в виде (9.32) в полуэмпирическом выражении для вероятности ионизации $\Gamma_{nn_1n_2m}$ [269], можно получить совершенно незначительные значения.

9.4. Заключение по распадам во внешнем электрическом поле

Таким образом, в этом разделе показана разница в излучении ридберговских атомов H и H. Линейные по полю члены исчезают в полной вероятности перехода после интегрирования по направлениям испускания фотонов, что соответствует обнаружению фотонов во всех направлениях одновременно. Однако спектральные измерения касаются главным образом обнаружения излучения фотонов под заданным углом или в заданный телесный угол. Последнее может быть учтено интегрированием косинуса, соответствующего произведению ($\nu_{\mathcal{E}}\nu$) в выражении (9.22), и приведет к отличному от нуля результату.

Обсуждение экспериментов по обнаружению асимметрии излучения в электрическом поле метастабильных атомов водорода и дейтерия можно найти, например, в [270]. Основной целью таких экспериментов является определение лэмбовского сдвига. Позже автор [104] распространил эти идеи на эксперименты по измерению лэмбовского сдвига для ионов с большим Z. Линейные (асимметричные) члены дают зависящие от напряженности поля вклады противоположного знака в интенсивность в направлениях, параллельных и антипараллельных электрическому полю. В отличие от этого, при фиксированном направлении поля, вклады линейные по полю имеют противоположный знак для H и H атомов, т.е. увеличение относительной интенсивности излучения атома водорода должно сопровождаться пропорциональным уменьшением относительной интенсивности излучения анти-H. Недавнее развитие эксперимента по "пролетной" спектроскопии атомов антиводорода [271] дает возможность соответствующего сравнения спектров H и H в электрическом поле.

Следует подчеркнуть, что эксперименты [66] не измеряют спектр ато-

мов антиводорода, а определяют гашение люминесценции, оценивая таким образом времена жизни ридберговских состояний. Как сообщалось в [66], время удержания анти-водорода составляет около 1000 секунд, что является важным шагом на пути к прецизионной спектроскопии антиатомов [271]. Сравнение обеих систем с высоким разрешением обеспечивает чувствительные тесты СРТ-симметрии. Любая измеренная разница будет указывать на нарушение СРТ [271]. Таким образом, теоретическое исследование эффектов, которые могут имитировать такое нарушение, является чрезвычайно важным. Разница, возникающая в спектрах атомов Н и Н при наличии внешнего электрического поля может имитировать эффекты нарушения СРТ-симметрии. Разница в спектрах зависит от направления регистрации эмиссии фотонов: а) максимальная разница возникает при регистрации эмиссии фотонов в по (против) направления поля ($\nu_{\mathcal{E}}\nu$) = ± 1 и б) разница исчезает при регистрации излучения фотона в направлении, перпендикулярном полю ($\nu_{\mathcal{E}}\nu$) = 0. Величину напряженности электрического поля \mathcal{E}^{\max} , когда этот эффект имеет максимум для ридберговских состояний, можно связать с "остаточными" полями.

Значения максимальной разности вероятностей распада $\delta(\mathcal{E}^{\max})$ приводит к расхождению до 10% в спектрах ридберговских атомов H и H. K одному и тому же эффекту приводят два конкурирующих вклада: 1) смешивание начальных состояний *ns*, *np* и 2) смешивание конечных состояний ks, kp. Смешивание нижних атомных уровней должно приводить к более существенным отклонениям в спектрах атомов водорода и анти-водорода в случае более сильных полей. С учетом экспериментов [271] был более детально рассмотрен пример распада 55s состояния. Расчет полных вероятностей перехода для различных каналов распада высоковозбужденных состояний позволяет определить соответствующие ширины уровней как сумму по всем парциальным каналам. Самый интересный вывод, следующий из приведенных выше оценок, заключается в том, что даже в присутствии очень слабого однородного электрического поля состояния ns и np в спектроскопических экспериментах становятся неразличимыми. Прежде всего это происходит потому, что $ns \to 1s + 1\gamma(E1)$ распад сильно подавлен правилами отбора, но испускание электрического дипольного фотона разре-
шено при наличии внешнего электрического поля. "Дополнительные" E1 каналы распада в основной и промежуточные атомные уровни описываются слагаемыми, квадратичными по полю. Они сравнимы с парциальными вероятностями распада переходов $np \rightarrow ks + 1\gamma(E1)$ или $ns \rightarrow kp + 1\gamma(E1)$ для изолированного атома. Например, 100% смешивание состояний 100s и 100p происходит в поле порядка 4×10^{-7} B/cm, делая распады этих состояний идентичными по скорости. Наличие внешнего электрического поля необходимо учитывать как для начального, так и для конечного (промежуточного) состояния, приводя к существенному изменению ширины уровней.

В заключение следует отметить, что даже очень слабые поля могут привести к существенным изменениям спектров излучения атомов водорода и анти-водорода в ридберговских состояниях. Во-первых, максимальная асимметрия (одинаковая для любых *ns*-состояний) в спектрах водорода и анти-водорода возникает в полях порядка \mathcal{E}^{\max} , см. Таблицу 9.1. Во-вторых, результаты в Таблицах 9.2, 9.3 показывают, что 100%-смешивание ns и np состояний, происходящее в поле порядка \mathcal{E}_c , существенно увеличивает скорость распада ридберговских ns-состояний. Для оценки максимального вклада обоих эффектов для каждого состояния ns были рассчитаны величины напряженности поля \mathcal{E}^{\max} и \mathcal{E}_c , которые могут значительно отличаться. Таким образом, результаты накладывают существенные ограничения на условия эксперимента. Требуется эффективное управление внешними электрическими полями или углами испускания фотонов. Регистрация излучения фотонов в перпендикулярном к полю направлении сведет к нулю асимметрию спектров Н и Н. Результаты этих исследований были опубликованы в работе автора диссертации [119].

Глава 10.

Искажение профиля линии в многофотонных процессах: астрофизические приложения

Ввиду значительных достижения в экспериментальных наблюдениях космического микроволнового фона (МКИ), пристальное внимание было уделено теоретическому описанию процессов, происходящих в эпоху космологической рекомбинации ранней Вселенной. Для аккуратного описания реликтового излучения в астрофизических исследованиях необходимо учитывать различные процессы эмиссии и поглощения фотонов, фотонэлектронного рассеяния и т.д. Отдельное внимание уделяется спектральным характеристикам атомного излучения. Обусловленные различными явлениями, поляризумость и сечения процессов представляют особый интерес с астрофизической точки зрения. Как правило, в стандартных расчетах такого рода задач применяется квантовомеханический подход для изолированного атома. Однако учет взаимодействия "атом-поле" может оказаться важным в случае астрофизических экспериментов, в которых, в частности, точность наблюдений составляет около 1% [247, 248] и ожидается на уровне ~ 0.1%. Взаимодействие атома с внешними полями может привести к таким эффектам, как инверсия населенностей атома, нарушению "устойчивости" стационарных решений, изменению силы линий, сечений, восприимчивости, поляризуемости и т.д. [272, 273].

В данной главе диссертации для изучения системы "атом-поле" используется теория статистического оператора (матрицы плотности) [96]. Применение формализма матрицы плотности в трехуровневом приближении представляется в данном случае более простым и целесообразным. Описание теории матрицы плотности и ее приложений, таких как спонтанное излучение, уширение линий (степенное уширение и насыщение, уширение линии за счет столкновений, доплеровское уширение и мн.др., можно найти, например, в [274].

Теория переноса излучения, которая обычно применяется при исследовании космического микроволнового фона, была предложена в работах [77, 79]. В частности, в рамках трехуровневой модели установлено, что переход $2s \leftrightarrow 1s$ способен существенно контролировать динамику космологической рекомбинации водорода. Более того, были предсказаны искажения МКИ порядка 10⁻⁶ [79]. Недавно теория переноса излучения в эпоху рекомбинации ранней Вселенной была интенсивно пересмотрена [76, 99] и многими другими авторами в последующих работах (обзор соответствующей литературы опущен для краткости). Важным следствием теории переноса излучения является определение коэффициента поглощения, рассчитанного на один атом. Влияние электромагнитного излучения на коэффициент поглощения широко исследуется в настоящее время. В качестве примера можно привести работу [275], где рассмотрено влияние мощного высокочастотного электромагнитного излучения на коэффициент поглощения в низкочастотной линии в трехуровневом Л-атоме. В этой главе рассматривается другой вид многофотонного процесса, а именно явление электромагнитной индуцированной прозрачности (ЭИП). Природа явления ЭИП может быть исследована, оценивая реакцию многоуровневой системы на наличие внешнего поля излучения. Электромагнитная индуцированная прозрачность приводит к существенной модификации профиля поглощения атома. Описание эффекта ЭИП для трехуровневой "лестничной" (Ξ) схемы уровней атомной системы, взаимодействующей с двумя околорезонансными монохроматическими полями, можно найти, например, в [93,95]. Подробное исследование трехуровневого лестничного атома, спектров поглощения и излучения, а также отклика Ξ -атома было представлено в [276]. В данной главе представлено исследование отклика атома водорода в трехуровневом приближении на внешнее поля, созданное фотонами в эпоху рекомбинации ранней Вселенной. Приводятся оценки искажения профиля линии, приводящие к поправкам к коэффициенту поглощения, определенному в рамках теории переноса излучения. Физику атома, взаимодействующего с фотонными полями, можно понять на основе описания "интерферирующих путей", которое соответствует многофотонному процессу, определяемому через разложение в степенной ряд по амплитудам полей (см., например, [93,95,276]). Обсуждается также вопрос о влиянии излучения от мощных источников излучения на на профиль линии CTC атома водорода.

10.1. Эффект ЭИП: Е-схема уровней

В этом разделе рассматривается трехуровневая лестничная Ξ-схема уровней для описания атома водорода, подверженного воздействию внешних электромагнитных полей. Предполагается, что атомы водорода, образовавшиеся в эпоху рекомбинации в ранней Вселенной, достигают своих основных состояний посредством испускания фотонов во всех спектральных линиях, соответствующих атомным свободно-связанным и связанносвязанным переходам. Все испускаемые фотоны генерируют внешнее поле среды, которое действует обратно на атом водорода. Исследование этого "самосогласованного" сценария в условиях космического расширения и является основной целью. Ограничие задачи относится также к рассмотрению лишь спонтанных вероятностей излучения. Столкновительное возбуждение и ионизацию можно исключить, поскольку при соответствующих температурах и плотностях они пренебрежимо малы для трехуровневого атома водорода [99].

Чтобы выявить возможный эффект, рассматривается атом, подвер-

женный воздействию двух внешних полей, относящимся к двум соседним спектральным линиям, а именно линий Ly_{α} и H_{α} , с начальным условием, соответствующим полному заселению основного состояния атома. Далее воспользуемся стандартным формализмом матрицы плотности, который можно найти, например, в [95]. Детали изложения данного раздела были представлены в работе [128] (статья [128] была выбрана редакцией Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics в состав сборника "Highlights of 2012").

Типичная трехуровневая лестничная система изображена на Рис. 10.1.



Рис. 10.1. Рассматриваемая схема трехуровневого атома - лестничная Ξ -схема. Три уровня соответствуют водородным состояниям: $|1\rangle \rightarrow |1s\rangle$, $|2\rangle \rightarrow |2p\rangle$ и $|3\rangle \rightarrow |3s\rangle$, соответственно. Частоты ω_{α} , ω_{β} - это частоты внешних полей, соответствующие "пробному" (probe) и "управляющему" (controlled) лазерным полям [95]. Поля E_{α} , E_{β} стимулируют переходы 1s - 2p и 2p - 3s (α -линии Лаймана и Бальмера). Также указаны возможные отстройки Δ_{α} и Δ_{β} для частот полей.

Решение уравнений матрицы плотности с использованием приближений установившегося (steady-state approximation) состояния и вращающейся волны (rotaiting-wave approximation), когда пренебрегается быстро осцилирующими вкладами в гамильтониан и временной зависимостью в уравнениях на статистический оператор, дает следующий набор уравнений для соответствующих элементов матрицы плотности [95]:

$$\rho_{21} = \frac{i}{2} \frac{\Omega_{\alpha}(\rho_{22} - \rho_{11}) - \Omega_{\beta}^{*} \rho_{31}}{\gamma_{21} - i\Delta_{\alpha}},$$

$$\rho_{32} = \frac{i}{2} \frac{\Omega_{\beta}(\rho_{33} - \rho_{22}) + \Omega_{\alpha}^{*} \rho_{31}}{\gamma_{32} - i\Delta_{\beta}},$$

$$\rho_{31} = \frac{i}{2} \frac{\Omega_{\alpha} \rho_{32} - \Omega_{\beta} \rho_{21}}{\gamma_{31} - i(\Delta_{\alpha} + \Delta_{\beta})},$$

$$\rho_{22} = \frac{i}{2\Gamma_{2}} (\Omega_{\alpha}^{*} \rho_{21} - \Omega_{\alpha} \rho_{12}),$$

$$\rho_{33} = \frac{i}{2\Gamma_{3}} (\Omega_{\beta}^{*} \rho_{32} - \Omega_{\beta} \rho_{23}).$$
(10.1)

Уровни системы задаются следующими водородными состояниями $|1\rangle = |1s\rangle, |2\rangle = |2p\rangle$ и $|3\rangle = |3s\rangle$. Частоты ω_{21} и ω_{32} относятся к переходам $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$ и $|2\rangle \rightarrow |3\rangle$, соответственно. Система приводится в действие "пробным" (probe) полем с амплитудой E_{α} на частоте ω_{α} и "управляющим" (controlled) полем с амплитудой E_{β} и частотой ω_{β} . $\Delta_{\alpha} = \omega_{\alpha} - \omega_{21}, \Delta_{\beta} = \omega_{\beta} - \omega_{32}$ определяют соответствующие отстройки (detuning) частоты, $\Omega_{\beta} = 2d_{32}E_{\beta}$ и $\Omega_{\alpha} = 2d_{21}E_{\alpha}$ - частоты Раби, которые определяются атомным дипольным матричным элементом d_{ij} . Все эти выражения даны в атомных единицах. В пренебрежении эффектами столкновительной дефазировки, вероятность распада определяется выражением $\gamma_{ij} = (\Gamma_i + \Gamma_j)/2$, где Γ_i - естественная ширина уровня |i >.

В пределе слабого пробного поля и $\rho_{11} \approx 1$, $\rho_{22} \approx \rho_{33} \approx 0$ (полное заселение основного состояния атома), решение уравнений на ρ_{21} в первом порядке по пробному полю и во всех порядках по управляющиму полю было найдено в [93,95]. Однако, полное решение для ρ_{21} может быть получено в виде:

$$\rho_{21} = \frac{-\mathrm{i}\frac{\Omega_{\alpha}}{2} \left(\frac{\Omega_{\alpha}^{2}}{4} + A\right)}{\frac{\Omega_{\beta}^{2}}{4} \left(\frac{\Omega_{\alpha}^{2}}{4\Gamma_{2}} - B\right) - \left(-\frac{\Omega_{\alpha}^{2}}{4\Gamma_{2}} + \gamma_{21} - \mathrm{i}\Delta_{1}\right) \left(\frac{\Omega_{\alpha}^{2}}{4} + A\right)}, \qquad (10.2)$$
$$A = B\left(\gamma_{31} - \mathrm{i}(\Delta_{1} + \Delta_{2})\right), \qquad B = \frac{\Omega_{\beta}^{2}}{4\Gamma_{3}} + \gamma_{32} - \mathrm{i}\Delta_{2},$$

Физику реакции системы на внешние поля можно понять, разложив решение (10.2) в степенной ряд по переменным Ω_{α} и Ω_{β} . Авторы [95] вывели ряд, содержащий члены до третьего порядка по Ω_{α} и Ω_{β} при нулевой отстройке. Для дальнейших целей, однако, важно сохранить ненулевую отстройку и, как и раньше, в приближении слабого поля выражение (10.2) представить в виде степенного ряда по Ω_{α} и Ω_{β} .

Полученное выражение для ρ_{21} существенно упрощается в случае точного двухфотонного резонанса, т.е. когда частоты двух внешних полей точно совпадают с частотой перехода $\omega_{31} = E_3 - E_1$. В этом случае выполняется равенство $\Delta_{\alpha} + \Delta_{\beta} = 0$ и разложение в ряд имеет вид:

$$\rho_{21} = \frac{i\Omega_{\alpha}/2}{\gamma_{21} - i\Delta_{\alpha}} \left[1 - \frac{\Omega_{\beta}^2/4}{\gamma_{31}(\gamma_{21} - i\Delta_{\alpha})} + \frac{\Omega_{\alpha}^2/4}{\Gamma_2(\gamma_{21} - i\Delta_{\alpha})}$$

где ... означают члены высшего порядка по Ω_{α} , Ω_{β} и произведению $\Omega_{\alpha} \cdot \Omega_{\beta}$. Разложение в ряд производится при условиях $\Omega_{\beta}/\gamma_{ij} \ll 1$ и $\Omega_{\alpha}/\gamma_{ij} \ll 1$.

Как было показано в [95], общий фактор в (10.3) соответствует процессу однофотонного поглощения, а квадратичные члены связаны с двухфотонным поглощением и последующими процессами излучения. Произведения $\Omega_{\alpha}^2 \cdot \Omega_{\beta}^2$ представляют собой члены "интерферирующих путей", см. Рис. 10.2. Таким образом, матричный элемент ρ_{21} описывает многофотонные процессы взаимодействия "атом-поле". Детальный анализ выражения (10.3) представлен в [95].

Из (10.3) следует, что с помощью матрицы плотности может быть определен профиль линии (в данному случае для линии поглощения 1 - 2). Мнимая часть, $\Im\{\rho_{21}\}$ от первого слагаемого приводит к контуру Лоренца. Сразу же можно отметить, что это сугубо квантовомеханическое описание и его КЭД расширение было представлено в разделе 2.3 выражением (2.40). Оставшиеся слагаемые в (10.3) представляют эффект электромаг-



Рис. 10.2. Схема переходов, происходящих в трехуровневой лестничной системе, соответствующие выражению (10.3): часть а) рисунка соответствует процессам однофотонного поглощения (общий множитель в (10.3)); части b) и c) представляют второй и третий слагаемые, а часть d) описывает "интерферирующиt пути" (четвертое слагаемое в 10.3)).

нитной индуцированной прозрачности (ЭИП). С точки зрения наблюдений добавочные вклады могут приводить к значительному искажению контура линии. Поскольку исследования эффекта ЭИП широко представлены в научной литературе, суть эффекта может быть упрощена до следующего. Фотон, соответствующий "пробному" полю эффективно поглащается в переходе 1 – 2. Если "управляющее" поле переводит систему в состояние 3, см. Рис. 10.2 b), то следующий фотон на переходе 1 – 2 "ускользнет" - система является прозрачной для пробного поля и возникает дополнительный "выход" ("отрыв") излучения. Аналогичным образом могут быть объяснены и другие случаи. Далее будет показано, как этот эффект можно учесть в астрофизических исследованиях MKИ.

10.2. Коэффициент поглощения и вероятность выхода фотона в приближении Соболева

Теория переноса излучения для многоуровневых атомов представлена в [99] в качестве непосредственного приложения к формированию МКИ. Эта теория использует концепцию вероятности выхода фотона в приближении Соболева (локальные изменения градиента скорости незначительны по сравнению с изменениями на больших длинах) [100]. С помощью метода вероятности выхода можно найти простое решение проблемы переноса излучения для связанных переходов. Вероятность выхода Соболева p_{ij} (j относится к верхнему уровню, а i к нижнему уровню многоуровневого атома) - это вероятность того, что фотоны, связанные с этим переходом, "ускользнут" без дальнейшего рассеяния или поглощения. Если $p_{ij} = 1$, то фотоны, рождающиеся при переходе, могут уходить на бесконечность - они не вызывают искажений поля излучения. Если $p_{ij} = 0$, фотоны не могут уйти на бесконечность; все они повторно поглощаются, и линия становится оптически толстой. В общем случае, полагая атом водорода в основном состоянии, $p_{ij} \ll 1$ для линий Лаймана и $p_{ij} \approx 1$ для всех остальных переходов. Вероятность выхода Соболева включена в прямые астрофизические уравнения переноса излучения, см., например, выражение (25) в [99].

В соответствии с разделом 2.3.3 в работе [99], вероятность выхода фотона можно представить в виде:

$$p_{ij} = \frac{1 - exp(-\tau_S)}{\tau_S},$$
 (10.4)

где τ_S - соболевская оптическая толщина. Оптическая толщина является мерой коэффициента затухания или поглощательной способности до определенной "глубины". Другими словами, оптическая толщина выражает количество света, удаленного из луча в результате рассеяния или поглощения во время его прохождения через среду. Она определена согласно выражению:

$$\tau_S = \frac{\lambda_{ij}\tilde{k}}{|v'|}.\tag{10.5}$$

Здесь \tilde{k} - интегральный коэффициент поглощения линии, а λ_{ij} - длина волны центра линии. Коэффициент монохроматического поглощения (коэффициент затухания или opacity) равен $k = \tilde{k}\phi(\nu_{ij})$ (ν_{ij} - частота данного перехода, а $\phi(\nu_{ij})$ - нормированный профиль линии), v' - градиент скорости, определяемый скоростью хаббловского расширения H(z).

Коэффициент поглощения сильно зависит от внешних условий и требует особого рассмотрения в каждом случае. При наличии внешнего поля

$$k = \frac{N d_{ij}^2 \omega_{ij}}{2\varepsilon_0 \Omega_{ij}} \Im\{\rho_{ij}\},\tag{10.6}$$

где ε_0 - диэлектрическая проницаемость вакуума, а N - число атомов.

Используя выражение (10.3) для определения мнимой части ρ_{21} , можно найти

$$\Im\{\rho_{21}\} = \frac{\gamma_{21}\Omega_{\alpha}/2}{\Delta_{\alpha}^2 + \gamma_{21}^2} \left[1 + f(\Omega_{\alpha}^2, \Omega_{\beta}^2, \Delta_{\alpha}, \Delta_{\beta})\right]$$
(10.7)

вместе с безразмерной функцией

$$f(\Omega_{\alpha}^{2}, \Omega_{\beta}^{2}, \Delta_{\alpha}, \Delta_{\beta}) = \frac{\Delta_{\alpha}^{2} - \gamma_{21}^{2}}{\Delta_{\alpha}^{2} + \gamma_{21}^{2}} \left[\frac{\Omega_{\beta}^{2}}{4\gamma_{21}\gamma_{31}} - \frac{\Omega_{\alpha}^{2}}{4\Gamma_{2}\gamma_{21}} \right] + \frac{\left(\gamma_{21}^{4}\gamma_{32} - \gamma_{32}\Delta_{\alpha}^{4} - 2\gamma_{21}^{3}\gamma_{32}^{2} + 2\gamma_{21}\Delta_{\alpha}^{2}(3\gamma_{32}^{2} + \Delta_{\beta}(3\Delta_{\beta} - \Delta_{\alpha}))\right)\Omega_{\alpha}^{2}\Omega_{\beta}^{2}}{16\Gamma_{2}\gamma_{21}\gamma_{31}(\Delta_{\alpha}^{2} + \gamma_{21}^{2})^{2}(\Delta_{\beta}^{2} + \gamma_{32}^{2})} + (10.8)$$
$$\frac{\left(\gamma_{21}^{2}\gamma_{32} - \gamma_{32}\Delta_{\alpha}^{2} - 2\gamma_{21}\Delta_{\alpha}\Delta_{\beta}\right)\Omega_{\alpha}^{2}\Omega_{\beta}^{2}}{16\gamma_{21}\gamma_{31}^{2}(\Delta_{\alpha}^{2} + \gamma_{21}^{2})(\Delta_{\beta}^{2} + \gamma_{32}^{2})} + \dots$$

Для определения интегрального коэффициента поглощения линии в (10.7) профиль линии выделен общим множителем, который соответствует коэффициенту монохроматического поглощения, см. выражение (31) в [99], а функция f зависит от фиксированных параметров Δ_{α} и Δ_{β} , $\Delta_{\alpha} = \omega_{\alpha} - \omega_{21}$.

Таким образом, интегральный коэффициент поглощения линии можно представить в виде:

$$\tilde{k}_{21} = \frac{\pi d_{21}^2 N \omega_{21}}{4\varepsilon_0} \left[1 + f(\Omega_\alpha^2, \Omega_\beta^2, \Delta_\alpha, \Delta_\beta) \right]$$
(10.9)

с профилем линии $\phi(\nu_{21}) = \gamma_{21} / \left[(\omega_{\alpha} - \omega_{21})^2 + \gamma_{21}^2 \right]$. В соответствии с теорией, изложенной в [99], профиль линии должен быть нормирован в интервале $[0, \infty]$, это учитывает коэффициент π . Таким образом, вероятность выхода фотона в линии 2 – 1 задается выражением:

$$p_{12} = \frac{1 - exp\left(-\tau_S \left[1 + f(\Omega_\alpha^2, \Omega_\beta^2, \Delta_\alpha, \Delta_\beta)\right]\right)}{\tau_S \left[1 + f(\Omega_\alpha^2, \Omega_\beta^2, \Delta_\alpha, \Delta_\beta)\right]},$$
(10.10)

где τ_S можно взять в виде (10.5). Для проведения грубых оценок достаточно ограничиться рассмотрением функции $f(\Omega_{\alpha}^2, \Omega_{\beta}^2, \Delta_{\alpha}, \Delta_{\beta})$. Разлагая выражение (10.10) в ряд по малой добавке f, можно получить приблизительное равенство $p_{12} \approx p_{12}^{(0)}(1 - f(\Omega_{\alpha}^2, \Omega_{\beta}^2, \Delta_{\alpha}, \Delta_{\beta}))$, где $p_{12}^{(0)}$ соответствует "стандартно" используемому подходу [99]. Функция f сильно зависит от параметров $\Omega_{\alpha}^2, \Omega_{\beta}^2, \Delta_{\alpha}, \Delta_{\beta}$. Оценки амплитуд поля можно вывести из распределения реликтового излучения, соответствующего эпохе рекомбинации водорода в ранней Вселенной.

10.3. Численные результаты: Ξ-схема уровней

Пока Вселенная продолжала расширяться и охлаждаться, электроны и протоны стремились к образованию атомов водорода. Температура в эту эпоху очень хорошо известна из лабораторной физики: $T \approx 3000 - 4500$ К. После рекомбинации высвободившиеся фотоны могли путешествовать по Вселенной относительно спокойно и образовали первичное фоновое излучение. Однако такое фотонное окружение (фон) должно было оказывать влияние на атом водорода. Амплитуды поля для волны с круговой поляризацией можно получить из спектральной плотности энергии

$$\frac{c\varepsilon_0|E|^2}{4\pi} = \frac{2h\nu_{ij}^3 \Delta\nu_{ij}}{c^2} \frac{1}{e^{\frac{h\nu_{ij}}{k_B T_e}} - 1},$$
(10.11)

где c - скорость света, k_B - постоянная Больцмана, h - постоянная Планка и для дальнейших оценок используется значение температуры $T_e = 3000$ К. Правая часть приведенного выше уравнения соответствует чернотельному распределению МКИ, а левая часть определяет плотность (электрической) энергии.

Чтобы избежать проблемы расфазировки, следует выбрать $\Delta \nu_{ij} \sim \Gamma_i$.

Следовательно, для спектральных линий $\nu_{21} = \nu_{\alpha}$ (линия Ly_{α}) и $\nu_{32} = \nu_{\beta}$ (Н_{α} линия) можно найти

$$E_{\alpha} \approx 0.000068802 \text{ B/M} = 1.33799 \times 10^{-16} \text{ a.u.},$$
$$E_{\beta} \approx 52.8636 \text{ B/M} = 1.02803 \times 10^{-10} \text{ a.u.}$$
(10.12)

Величины поля (10.12) малы; следует сравнить частоты Раби с соответствующими ширинами уровней. Вероятности однофотонных переходов, которые дают основной вклад в ширину уровней, хорошо известны. Для атома водорода доминирующим является вероятность перехода Ly_{α} , $\Gamma_{2p} \sim 10^{-8}$ в атомных единицах и, следовательно, можно использовать степенной ряд (10.3). Более того, оценки, приведенные в выражении (10.12), показывают, что можно пренебречь всеми членами порядка Ω_{α}^2 и выше.

Далее функцию $f(\Omega_{\alpha}^2, \Omega_{\beta}^2, \Delta_{\alpha}, \Delta_{\beta})$ можно оценить численно. В случае, если отстройка определяется $\Delta_{\alpha} \equiv \Gamma_{2p}$ и $\Delta_{\beta} \equiv \Gamma_{2p} + \Gamma_{3s}$ функция f задается в виде:

$$f(\Omega_{\alpha}^{2}, \Omega_{\beta}^{2}, \Delta_{\alpha}, \Delta_{\beta}) \approx -1.30494 \cdot 10^{15} \Omega_{\alpha}^{2} - 2.08127 \cdot 10^{30} \Omega_{\alpha}^{4} +8.67218 \cdot 10^{14} \Omega_{\beta}^{2} + 5.15573 \cdot 10^{29} \Omega_{\beta}^{4} + 2.42665 \cdot 10^{44} \Omega_{\beta}^{6} (10.13) +3.22916 \cdot 10^{29} \Omega_{\alpha}^{2} - 1.08979 \cdot 10^{47} \Omega_{\alpha}^{2} \Omega_{\beta}^{4} - 6.18661 \cdot 10^{44} \Omega_{\alpha}^{4} \Omega_{\beta}^{2} -1.63588 \cdot 10^{62} \Omega_{\alpha}^{4} \Omega_{\beta}^{4} + 2.92629 \cdot 10^{63} \Omega_{\alpha}^{2} \Omega_{\beta}^{6} - 4.88545 \cdot 10^{78} \Omega_{\alpha}^{4} \Omega_{\beta}^{6}.$$

С учетом оценок (10.12)

$$\Omega_{\alpha} \approx 1.99343 \cdot 10^{-16} \text{ a.u.},$$

$$\Omega_{\beta} \approx 1.92942 \cdot 10^{-10} \text{ a.u.},$$

$$f \approx 0.0000322844.$$
(10.14)

Для случая точных резонансов ($\Delta_{\alpha} = 0$ и $\Delta_{\beta} = 0$)

$$f \approx -0.015814.$$
 (10.15)

Наконец, в случае точного двухфотонного резонанса, когда $\Delta_{\alpha} + \Delta_{\beta} = 0$

в сочетании с $\Delta_{\alpha} = \Gamma_{2p}$, функция f принимает значение:

$$\Delta_{\alpha} = \Gamma_{2p} = -\Delta_{\beta} \sim 10^{-8} \text{ a.u.},$$

$$f \approx 0.00952743. \tag{10.16}$$

Таким образом, величина функции $f(\Omega_{\alpha}^2, \Omega_{\beta}^2, \Delta_{\alpha}, \Delta_{\beta})$ составляет около 1%; в случае точных однофотонных резонансов около 1.5%, соответственно около 0.95%, если отстройки ненулевые, но противоположного знака. В квантовой оптике этот эффект хорошо известен при исследовании электромагнитной индуцированной прозрачности для различных видов систем (двух-, трех- или четырехуровневых систем с Λ -, V- или Ξ -схемой уровней). Результаты расчетов для различных значений отстроек сведены в Таблицу 10.1 и графически представлены на Рис. 10.3 и 10.4.



Рис. 10.3. Зависимость функции $f(\Omega_{\alpha}^2, \Omega_{\beta}^2, \Delta_{\alpha}, \Delta_{\beta})$ от отстроек Δ_{α} и Δ_{β} при фиксированных значениях внешних полей (10.12), $\Omega_{\beta}/\gamma_{ij} \ll 1$ и $\Omega_{\alpha}/\gamma_{ij} \ll 1$. Отстройки Δ_{α} и Δ_{β} изменяются в пределах $[-\Gamma_{2p}, \Gamma_{2p}]$.

В астрофизических исследованиях процессов формирования реликтового излучения профиль линии Лоренца используется для определения коэффициента поглощения. Этот профиль линии представляет собой доминирующий вклад в $\Im\{\rho_{21}\}$, он выделен общим множителем в (10.7). Из Таблицы 10.1 и результатов (10.15), (10.6) следует, что функция $f(\Omega_{\alpha}^2, \Omega_{\beta}^2, \Delta_{\alpha}, \Delta_{\beta})$

Таблица 10.1. Численные значения функции $f(\Omega_{\alpha}, \Omega_{\beta}, \Delta_{\alpha}, \Delta_{\beta})$ для различных величин отстроек. В первом столбце указаны различные значения $f(\Omega_{\alpha}, \Omega_{\beta}, \Delta_{\alpha}, \Delta_{\beta})$, во втором и третьем столбце - отстройки и соответствующие магнитуды полей.

	Δ_{α}, c^{-1}	$ E_{lpha} ,~\mathrm{B/m}$
$\int f\left(\Omega_{\alpha},\Omega_{\beta},\Delta_{\alpha},\Delta_{\beta}\right)$	Δ_{β}, c^{-1}	$ E_{eta} ,~\mathrm{B/m}$
	$\Delta u_{ij} = \Delta_{lpha} , \ \Delta_{eta} ext{ b} (10.11)$	
$6.48635 \cdot 10^{-7}$	$W_{21} = 6.26826 \cdot 10^8$	$6.8802 \cdot 10^{-5}$
0.40030 10	$W_{32} = 6.31696 \cdot 10^6$	5.30686
0.0000326007	$W_{21} = 6.26826 \cdot 10^8$	$6.8802 \cdot 10^{-5}$
0.0000320097	$W_{21} + W_{32} = 6.33143 \cdot 10^8$	53.1293
0.00052743	$W_{21} = 6.26826 \cdot 10^8$	$6.8802 \cdot 10^{-5}$
0.00352745	$-W_{21} = -6.26826 \cdot 10^8$	52.8636
0.00052743	$-W_{21} = -6.26826 \cdot 10^8$	$6.8802 \cdot 10^{-5}$
0.00952745	$W_{21} = 6.26826 \cdot 10^8$	52.8636
0.0000394474	$-W_{21} = -6.26826 \cdot 10^8$	$6.8802 \cdot 10^{-5}$
0.0000324474	$-W_{21} = -6.26826 \cdot 10^8$	52.8636
0.0000326007	$-W_{21} = -6.26826 \cdot 10^8$	$6.8802 \cdot 10^{-5}$
0.0000320097	$-W_{21} - W_{32} = 6.33143 \cdot 10^8$	53.1293
$4.06852 \cdot 10^{-6}$	$10W_{21} = -6.26826 \cdot 10^9$	$2.1757 \cdot 10^{-4}$
4.00002 * 10	$10(W_{21} + W_{32}) = 6.33143 \cdot 10^9$	168.01

необходимо включить в астрофизические расчеты согласно выражению (10.10). В действительности, зависимость вероятности выхода $p_{ij}(\tau_S)$ для фотона в крыле линии из-за расширяющейся Вселенной может иметь более сложный вид. Приближение Соболева работает на определенной фазе, которая хорошо известна. В более сложных случаях приходится применять диффузионное приближение [277]. Однако, описание эффекта ЭИП, представленное выше, может служить в качестве оценок влияния ЭИП на перенос излучения.



Рис. 10.4. Двумерное сечение графика функции $f(\Omega_{\alpha}^2, \Omega_{\beta}^2, \Delta_{\alpha}, \Delta_{\beta})$ (см. 10.3) при $\Delta_{\beta} = 0$. Оставшийся параметр отстройки Δ_{α} изменяется в пределах $[-3\Gamma_{2p}, 3\Gamma_{2p}]$.

10.4. Численные результаты: Ξ-схема уровней с учетом тонкой структуры

В этом разделе функция $f(\Omega_{\alpha}, \Omega_{\beta}, \Delta_{\alpha}, \Delta_{\beta})$ расчитана численно. Физический смысл f можно найти с помощью Рис. 10.2. Процессы, соответствующие функции f, иллюстрируются на Рис. 10.2 b), c) и d). А именно, график a) соответствует "стандартной" вероятности выхода Соболева. Однако "управляющее" поле приводит к задержке электрона на возбужденных состояниях и препятствует окончательной рекомбинации ввиду дополнительных процессов, см. графики b)-d). Функция f безразмерная, она представляет вклад многофотонных процессов b)-d) по отношению к процессу однофотонного поглощения a). Каскадная схема 1s - 2p - 3s для атома водорода была рассмотрена в [128]. Показано, что в случае точных резонансов (когда обе отстройки Δ_{α} и Δ_{β} равны нулю) максимальное значение f составляет около 1.5% и достигает 0.95% для точного двухфотонного резонанса.

Аналогично [128] здесь рассматривается каскадная схема, но с учетом

тонкой структуры атома водорода. С учетом лэмбовского сдвига трехуровневую лестничную схему можно определить следующим образом: $|1 > \equiv |1s >$, $|2 > \equiv |2p_{1/2} > \mu |3 > \equiv |2s >$. Подставив соответствующие ширины и частоты $\Gamma_{2s} = 8.229 \text{ c}^{-1}$, $\Gamma_{2p} = 6.26826 \times 10^8 \text{ c}^{-1}$ и $\nu_{31} = 2.4674 \times 10^{15}$ Γ ц, $\nu_{23} = 1.057911 \times 10^9$ Γ ц, при $\Delta \nu_{ij} = \Gamma_{2p}$, см. [129], можно получить следующие оценки:

$$\begin{split} E_{\alpha} &\approx 0.000068802 \text{ B/M} = 1.33799 \times 10^{-16} \text{ a.u.}, \end{split} \tag{10.17} \\ E_{\beta} &\approx 0.0017496 \text{ B/M} = 3.40242 \times 10^{-15} \text{ a.u.}, \\ \Omega_{\alpha} &\approx 9.96713 \times 10^{-17} \text{ a.u.}, \\ \Omega_{\beta} &\approx 1.02073 \times 10^{-14} \text{ a.u.}. \end{split}$$

Численные результаты функции *f* для различных величин отстроек собраны в Таблице 10.2.

Таблица 10.2. Численные значения функции $f(\Omega_{\alpha}, \Omega_{\beta}, \Delta_{\alpha}, \Delta_{\beta})$ для различных величин отстроек. В первом столбце указаны значения $f(\Omega_{\alpha}, \Omega_{\beta}, \Delta_{\alpha}, \Delta_{\beta})$, во втором и третьем столбцах указаны отстройки.

$f(\Omega_{lpha},\Omega_{eta},\Delta_{lpha},\Delta_{eta})$	Δ_{α}, c^{-1}	Δ_{β}, c^{-1}
-1.38066×10^{-4}	0	0
-1.38066×10^{-4}	$\Gamma_{2s} = 8.229$	$-\Gamma_{2s} = -8.229$
8.28426×10^{-5}	$\Gamma_{2p} = 6.26826 \times 10^8$	$-\Gamma_{2p} = -6.26826 \times 10^8$
-8.12364×10^{-6}	$\Gamma_{2s} = 8.229$	$\Gamma_{2s} = 8.229$
$7.25115 imes 10^{-13}$	$\Gamma_{2p} = 6.26826 \times 10^8$	$\Gamma_{2s} = 8.229$
3.62557×10^{-13}	$\Gamma_{2p} = 6.26826 \times 10^8$	$\Gamma_{2p} = 6.26826 \times 10^8$

В частности, в случае точных резонансов максимальное значение f составляет -1.38066×10^{-4} , т.е. 0.01%. В случае точного двухфотонного резонанса $\Delta_{\alpha} + \Delta_{\beta} = 0$, когда частоты полей близки, но незначительно отличаются от соответствующих резонансов, $f \approx 0.0083\%$. Таким образом, в отличие от результатов [128], максимальное значение функции f выходит за рамки требуемой точности расчетов МКИ. Следует также отметить, что если $\Delta \nu_{ij} = \Gamma_{2s}$, то максимальное значение f имеет порядок 10^{-12} . Такимоб разом, можно заключить, что явление ЭИП не требует рассмотрения тонкой структуры для Ξ -схемы.

10.5. Л-схема уровней

Для описания Λ -схемы уровней следует произвести замену $\Delta_{\beta} \to -\Delta_{\beta}$ и положить $|1\rangle \equiv |1s\rangle$, $|3\rangle \equiv |2s\rangle$, $|2\rangle \equiv |3p\rangle$ в сочетании с $\nu_{21} = 2.4674 \times 10^{15}$ Гц, $\nu_{31} = 2.9243 \times 10^{15}$ Гц, $\Gamma_3 \equiv \Gamma_{2s} = 8.229$ с⁻¹ и $\Gamma_2 \equiv \Gamma_{3p} = 1.89802 \times 10^8$ с⁻¹, полагая также $\Delta \nu_{31} \approx \Gamma_{2s}$ и $\Delta \nu_{32} \approx \Gamma_{3p}$. Тогда

$$E_{\alpha} \approx 2.45765 \times 10^{-18} \text{ a.u.}, \qquad (10.18)$$
$$E_{\beta} \approx 1.17805 \times 10^{-14} \text{ a.u.},$$
$$\Omega_{\alpha} \approx 7.33142 \times 10^{-19} \text{ a.u.},$$
$$\Omega_{\beta} \approx 2.08452 \times 10^{-14} \text{ a.u.}$$

Численные значения $f(\Omega_p, \Omega_c, \Delta_p, \Delta_c)$ приведены в Таблице 10.3 для различных отстроек частот переходов (подробнее см. [129]).

Таблица 10.3. Численные значения функции $f(\Omega_{\alpha}, \Omega_{\beta}, \Delta_{\alpha}, \Delta_{\beta})$ для различных величин отстроек. В первом столбце указаны значения $f(\Omega_{\alpha}, \Omega_{\beta}, \Delta_{\alpha}, \Delta_{\beta})$, во втором и третьем столбцах указаны отстройки.

$f\left(\Omega_{\alpha},\Omega_{\beta},\Delta_{\alpha},\Delta_{\beta}\right)$	Δ_{α}, c^{-1}	Δ_{β}, c^{-1}
-0.00189829	0	0
-0.00189829	$\Gamma_{2s} = 8.229$	$\Gamma_{2s} = 8.229$
0.00113955	$\Gamma_{3p} = 1.89802 \times 10^8$	$\Gamma_{3p} = 1.89802 \times 10^8$
-0.000112064	$\Gamma_{2s} = 8.229$	$-\Gamma_{2s} = -8.229$
3.29832×10^{-11}	$\Gamma_{3p} = 1.89802 \times 10^8$	$\Gamma_{2s} = 8.229$
1.64916×10^{-11}	$\Gamma_{3p} = 1.89802 \times 10^8$	$-\Gamma_{3p} = -1.89802 \times 10^8$

Согласно оценкам в [129], если предположить, что $\Delta \nu_{31} \approx \Gamma_{2s}$ и $\Delta \nu_{32} \approx \Gamma_{2s}$, то можно получить $\Omega_{\alpha} \approx 1.52655 \times 10^{-22}$ и $\Omega_{\beta} \approx 2.08452 \times 10^{-14}$

(в атомных единицах). Итоговые численные значения аналогичны Таблице 10.3, поскольку Ω_{α} попрежнему можно пренебречь.

В случае $\Delta \nu_{31} \approx \Gamma_{3p}$ и $\Delta \nu_{32} \approx \Gamma_{3p}$, можно получить

$$\Omega_{\alpha} \approx 7.33142 \times 10^{-19} \,\text{a.u.},$$
(10.19)

 $\Omega_{\beta} \approx 1.00111 \times 10^{-10} \,\text{a.u.}$

Эти оценки показывают, что можно пренебречь членами более высокого порядка по Ω_{α} . Однако приближение удовлетворяется при условии $\Omega_i/\gamma_{ij} \ll 1$, которое нарушается для $\Omega_{\beta}/\gamma_{13}$. Тогда решение уравнений на матрицу плотности следует использовать без разложения в ряд. Для матричного элемента ρ_{21} можно написать

$$\rho_{21} \approx -\frac{i\Omega_{\alpha}}{\gamma_{23} + i\Delta_{\alpha} + \frac{\Omega_{\beta}^2}{\gamma_{13} + i\delta}}.$$
(10.20)

Соответствующие значения f даны в Таблице 10.4.

Таблица 10.4. Обозначения аналогичны Таблице 10.2.

$f\left(\Omega_{lpha},\Omega_{eta},\Delta_{lpha},\Delta_{eta} ight)$	Δ_{α}, c^{-1}	Δ_{β}, c^{-1}
0.000761156	$\Gamma_{3p} = 1.89802 \times 10^8$	$\Gamma_{2s} = 8.229$
0.000380479	$\Gamma_{3p} = 1.89802 \times 10^8$	$-\Gamma_{3p} = -1.89802 \times 10^8$
-9.04486×10^{-7}	$\Gamma_{2s} = 8.229$	$\Gamma_{3p} = 1.89802 \times 10^8$

Согласно результатам Таблиц 10.3, 10.4, максимальное значение *f* можно найти близким к 0.2%. Вклад этого порядка сравним с современной точностью наблюдений реликтового излучения.

Учитывая тонкую структуру уровней для Λ -схемы, можно положить $|1 \rangle \equiv |1s \rangle, |2 \rangle \equiv |2p_{3/2} \rangle, |3 \rangle \equiv |2s \rangle$ и, следовательно, $\nu_{31} \approx 2.46741 \times 10^{15}$ Гц, $\nu_{32} \approx 9.96903 \times 10^9$ Гц, $\Gamma_2 \equiv \Gamma_{2p} = 6.26826 \times 10^8$ с⁻¹ и $\Gamma_3 \equiv \Gamma_{2s} = 8.229$ с⁻¹. Для оценки амплитуд поля использованы $\Delta \nu_{21} \sim \Gamma_{2p}, \Delta \nu_{31} \sim \Gamma_{2s}$. Тогда,

$$\Omega_{\alpha} \approx 9.96632 \times 10^{-17} \,\text{a.u.},$$
(10.21)

 $\Omega_{\beta} \approx 1.10204 \times 10^{-10} \,\text{a.u.}$

Численные значения f малы и для краткости изложения не приводятся (аналогично и для $\Delta \nu_{21} \sim \Gamma_{2s}$ и $\Delta \nu_{31} \sim \Gamma_{2s}$ [129]).

Однако, для $\Delta \nu_{21} \sim \Gamma_{2p}$ и $\Delta \nu_{31} \sim \Gamma_{2p}$ можно найти

$$\Omega_{\alpha} \approx 9.96632 \times 10^{-17} \,\text{a.u.},$$
(10.22)

 $\Omega_{\beta} \approx 9.61828 \times 10^{-14} \,\text{a.u.}$

Численные значения для функции f собраны в Таблице 10.5.

$f\left(\Omega_{lpha},\Omega_{eta},\Delta_{lpha},\Delta_{eta} ight)$	Δ_{α}, c^{-1}	Δ_{β}, c^{-1}
-0.0121124	0	0
-0.0121124	$\Gamma_{2s} = 8.229$	$\Gamma_{2s} = 8.229$
0.00729051	$\Gamma_{2p} = 6.26826 \times 10^8$	$\Gamma_{2p} = 6.26826 \times 10^8$
-0.000729015	$\Gamma_{2s} = 8.229$	$-\Gamma_{2s} = -8.229$
6.43847×10^{-11}	$\Gamma_{2p} = 6.26826 \times 10^8$	$\Gamma_{2s} = 8.229$
3.21924×10^{-11}	$\Gamma_{2p} = 6.26826 \times 10^8$	$-\Gamma_{2p} = -6.26826 \times 10^8$

Таблица 10.5. Обозначения аналогичны Таблице 10.2.

Как следует из Таблицы 10.5, максимальное значение функции *f* достигает уровня 1%. Вклад этого порядка достаточно велик и поэтому его следует учитывать при теоретическом описании космического микроволнового фона.

10.6. V-схема уровней водорода

Для V-схемы уровней, см. [129], состояния определены следующим образом: $|1 \rangle \equiv |3p \rangle$, $|2 \rangle \equiv |2p \rangle$ и $|3 \rangle \equiv |1s \rangle$. Тогда, $\nu_{23} = 2.4674 \times 10^{15}$ Гц, $\nu_{13} = 2.9243 \times 10^{15}$ Гц, $\Gamma_2 \equiv \Gamma_{2p} = 6.26826 \times 10^8 \text{ c}^{-1}$ и $\Gamma_1 \equiv \Gamma_{3p} = 1.89802 \times 10^8 \text{ c}^{-1}$. Полагая $\Delta \nu_{23} \approx \Gamma_{2p}$ и $\Delta \nu_{13} \approx \Gamma_{3p}$, получается

$$\Omega_{\alpha} \approx 7.33142 \times 10^{-19} \text{ a.u.},$$
(10.23)

 $\Omega_{\beta} \approx 9.96713 \times 10^{-17} \text{ a.u.}$

Соответствующие численные значения для функции f представлены в Таблице 10.6.

$f\left(\Omega_{lpha},\Omega_{eta},\Delta_{lpha},\Delta_{eta} ight)$	Δ_{α}, c^{-1}	Δ_{β}, c^{-1}
-5.70837×10^{-16}	0	0
4.8248×10^{-16}	$\Gamma_{3p} = 1.89802 \times 10^8$	$\Gamma_{3p} = 1.89802 \times 10^8$
4.52944×10^{-16}	$\Gamma_{3p} = 1.89802 \times 10^8$	$-\Gamma_{3p} = -1.89802 \times 10^8$
4.14603×10^{-16}	$\Gamma_{2p} = 6.26826 \times 10^8$	$\Gamma_{2p} = 6.26826 \times 10^8$
-1.14167×10^{-16}	$\Gamma_{3p} = 1.89802 \times 10^8$	$\Gamma_{2p} = 6.26826 \times 10^8$
1.76641×10^{-17}	$\Gamma_{2p} = 6.26826 \times 10^8$	$-\Gamma_{2p} = -6.26826 \times 10^8$

Таблица 10.6. Обозначения аналогичны Таблице 10.2.

Наконец, принимая во внимание тонкую структуру, предполагая $|1\rangle \equiv |2p_{3/2}\rangle$, $|2\rangle \equiv |2p_{1/2}\rangle = |3\rangle \equiv |1s\rangle$, имеем $\nu_{23} = 2.4674 \times 10^{15}$ Гц, $\nu_{13} = 2.46741 \times 10^{15}$ Гц, $\Gamma_2 \equiv \Gamma_{2p_{1/2}} = 6.26826 \times 10^8 \text{ c}^{-1}$ и $\Gamma_1 \equiv \Gamma_{2p_{3/2}} = 6.26826 \times 10^8 \text{ c}^{-1}$. В [129] было найдено, что соответствующие численные значения f пренебрежимо малы. В случае $\Delta \nu_{13} \approx \Gamma_{2p}$ и $\Delta \nu_{23} \approx \Gamma_{2p}$, $f \sim 10^{-16}$. Таким образом, в контексте процессов формирования реликтового излучения явление электромагнитной индуцированной прозрачности не имеет значения для V-схемы уровней.

10.7. Полное заселение 2s состояния

Процесс двухфотонного распада 2s → 1s способен существенно контролировать динамику космологической рекомбинации водорода, позволяя примерно 57% всех атомов водорода во Вселенной рекомбинировать через этот канал [77,79]. Принимая во внимание полное заселение состояния 2s в водороде, стоит рассмотреть влияние явления ЭИП на процессы формирования реликтового излучения. Тогда условия (см. раздел 10.1) следует заменить на $\rho_{2s}(0) = 1$, а остальные равны нулю. Для каскадной схемы было получено, что для полной заселенности 2s состояния максимальное значение f составляет около 0.03%, см. Таблицу 10.7.

$f\left(\Omega_{\alpha},\Omega_{\beta},\Delta_{\alpha},\Delta_{\beta}\right)$	Δ_{α}, c^{-1}	Δ_{β}, c^{-1}
-0.000276132	0	0
-0.000276132	$\Gamma_{2s} = 8.229$	$\Gamma_{2s} = -8.229$
-0.0000552386	$\Gamma_{2p} = 6.26826 \times 10^8$	$-\Gamma_{2p} = -6.26826 \times 10^8$
0.00003314	$-\Gamma_{2p} = -6.26826 \times 10^8$	$\Gamma_{2p} - \Gamma_{2s} = 6.26826 \times 10^8$
-0.0000162473	$\Gamma_{2s} = 8.229$	$\Gamma_{2s} = 8.229$
7.25115×10^{-13}	$\Gamma_{2p} = 6.26826 \times 10^8$	$\Gamma_{2p} = 6.26826 \times 10^8$

Таблица 10.7. Обозначения аналогичны Таблице 10.2.

Для Λ -схемы максимальное значение $f(\Omega_{\alpha}, \Omega_{\beta}, \Delta_{\alpha}, \Delta_{\beta})$ имеет порядок 10^{-12} [129]. Принимая во внимание тонкую структуру уровней можно получить максимальное значение функции f на уровне 10^{-8} . Следует подчеркнуть, что в случае полного заселения состояния 2s матричный элемент ρ_{31} подавлен множителем $\Omega_{\alpha}\Omega_{\beta}^2$ и, следовательно, для Ly_{α} линии эффект остается незначительным.

В заключение данного раздела стоит отметить, что не смотря на довольно детальные и аккуратные расчеты, учитывающие различные "тонкие" эффекты (см., например, [164,252]), в рамках теории переноса излучения влияние внешнего поля на характеристики окружающей среды пока не учитывается. В качестве демонстрации важности соответствующих эффектов, были представлены оценки явления электромагнитной индуцированной прозрачности. Показано, что ЭИП проявляется в условиях формирования МКИ и может достигать уровня 1%. Пусть и грубые оценки эффекта ЭИП сильно зависят от "параметров поля" и температуры в частности. Все представленные выше оценки соответствуют равновесной температуре 3000 К, когда рекомбинация уже фактически заканчилась. Таким образом, можно ожидать усиления эффекта для более высоких температур.

10.8. Анализ профиля линии поглощения на длине волны 21 см атома водорода в межзвездной среде

Согласно теории, изложенной в разделе 10.1, учет смежных переходов при определении какой-либо частоты перехода может оказаться решающим. Опираясь на результаты предыдущих разделов, можно указать, что наиболее значимая модификация профиля линии в астрофизических условиях обнаруживается для Ξ-схемы уровней. В данном разделе анализируется профиль линии поглощения на длине волны 21 см атома водорода в межзвездной среде (M3C). Атом водорода рассматривается как трехуровневая система, освещаемая мощным источником света на соседних резонансах, соответствующих сверхтонкому расщеплению основного состояния и переходу Ly_a. Поле, действующее на резонансы, вызывает физические процессы, которые можно объяснить как интерферирующие пути между различными переходами. В разделе рассмотрены частные случаи, когда профиль линии 21 см существенно модифицируется Ly_a переходом. Представлена поправка на оптическую толщину. Показано, что поправка может быть значительной и ее следует учитывать при определении столбцовой плотности атомов водорода в МЗС. В разделе также рассматриваются эффекты недоплеровского уширения и сдвига частоты.

 Ξ -схема уровней атома водорода (трехуровневая лестничная (каскадная) система), где состояния $|1\rangle$ и $|2\rangle$ - два сверхтонких подуровня основного состояния, а $|3\rangle$ - возбужденное состояние 2p, представлена на Рис. 10.5.



Рис. 10.5. Схематическое изображение энергетических уровней в атоме водорода. Нижние состояния соответствуют основному состоянию со сверхтонкими подуровнями для полных угловых моментов атома F = 1 и F = 0. Длина волны резонансного перехода между сверхтонкими подуровнями составляет 21 см. Верхнее состояние представлено возбужденным 2*p* состоянием, соответствующее переходу Лайман- α . Ω_p и Ω_c обозначают соответствующие частоты Раби для пробного и управляющего полей (Ω_{α} и Ω_{β} в предыдущих обозначениях) от внешнего источника.

10.8.1. Поправка к оптической толщине для трехуровневой Ξ-схемы

Как и пржде предполагается, что на атом водорода действуют "зондирующие" (probe) и "управляющее" (controlled) поля с соответствующими частотами $\omega_p \rightarrow \omega_{21} = |1\rangle \leftrightarrow |2\rangle$ для линии 21 см и Ly_{\alpha} перехода $\omega_c \rightarrow \omega_{32} = |2\rangle \leftrightarrow |3\rangle$. Система уравнений лестничной схемы имеет вид:

$$\rho_{21} = \frac{i}{2} \frac{(\Omega_p(\rho_{22} - \rho_{11}) - \Omega_c^* \rho_{31})}{\gamma_{21} - i\delta_p}, \qquad (10.24)$$

$$\rho_{32} = \frac{i}{2} \frac{(\Omega_c(\rho_{33} - \rho_{22}) + \Omega_p^* \rho_{31})}{\gamma_{32} - i\delta_c}, \qquad \rho_{31} = \frac{i}{2} \frac{(\Omega_p \rho_{32} - \Omega_c \rho_{21})}{\gamma_{31} - i(\delta_p + \delta_c)}, \qquad \rho_{22} = \frac{i}{2\Gamma_2} (\Omega_p^* \rho_{21} - \Omega_p \rho_{12}), \qquad \rho_{33} = \frac{i}{2\Gamma_3} (\Omega_c^* \rho_{32} - \Omega_c \rho_{23}),$$

где отстройки для зондирующего и контролирующего полей равны: $\delta_p = \omega_p - \omega_{21}$, $\delta_c = \omega_c - \omega_{32}$, соответственно, а ω_{21} , ω_{32} представляют резонанс-

ные значения частот переходов. Частоты Раби обозначаются $\Omega_c = 2d_{32}E_c/\hbar$ и $\Omega_p = 2\mu_{21}B_p/\hbar$. Поскольку переход между сверхтонкими подуровнями соответствует излучению (поглощению) магнитного диполя M1, частота Раби Ω_p записана через напряженность магнитного поля B_p и магнитный момент μ_{ij} . E_c представляет собой напряженность электрического поля для перехода Ly_{α} , а d_{ij} - дипольный матричный элемент. Волновые функции для состояний $|3\rangle$, $|2\rangle$ и $|1\rangle$ можно принять как решение уравнения Шрёдингера. В отсутствие столкновений $\gamma_{ij} = (\Gamma_i + \Gamma_j)/2$, где Γ_i - естественная ширина *i*-го уровня. Система уравнений (10.24) записана в тех же приближениях, что и ранее.

Используя определение для коэффициента поглощения (10.6), профиль линии может быть найден в виде (10.7). Учитывая соотношение $k = \tilde{k}\phi(\omega)$, монохроматическая оптическая толщина определена согласно

$$d\tau(\omega_{ij}) = -\tilde{k}\phi(\omega_{ij})dl = -\tau\phi(\omega_{ij})\frac{dl}{L},$$
(10.25)

где l - расстояние вдоль луча ($L = v_{\rm th}/v'$, $v_{\rm th}$ - тепловая скорость, а v' - градиент $v_{\rm th}$) [99,100].

В обычном случае монохроматическая оптическая толщина соответствует однофотонному резонансному процессу, сводящемуся к оценке двухуровневой атомной системы. Тогда процесс однофотонного поглощения описывается профилем линии Лоренца:

$$\Im\{\rho_{21}^{(0)}\} = -\frac{\gamma_{21}\Omega_p/2}{\delta_p^2 + \gamma_{21}^2},\tag{10.26}$$

где δ_p можно рассматривать как переменную. Более точное решение уравнений (10.24) соответствует учету второго поля, действующего на соседний резонанс. Тогда, в пределе слабого "зондирующего" поля [93], матричный элемент ρ_{21} в первом порядке по нему и во всех порядках по "управляющему" полю равен

$$\rho_{21} = \frac{\mathrm{i}\Omega_p/2}{\mathrm{i}\delta_p - \gamma_{21} + \frac{\Omega_c^2/4}{i(\delta_p + \delta_c) - \gamma_{31}}}.$$
(10.27)

Выражение (10.27) зависит от параметров полей Ω_c и δ_c и сводится к (10.26) в пределе $\Omega_c \to 0$, т.е. когда влияние поля на соседний резонанс незначительно. В этом случае поправки к "обычному" определению (10.27) можно найти путем разложения в ряд по $\Omega_{p(c)}$ при нулевых отстройках $\delta_{p(c)}$. Тогда амплитуды переходов, связанные с путями $|1\rangle \to |2\rangle$ и $|2\rangle \to |3\rangle$, приводят к деструктивной интерференции и уменьшению общей вероятности того, что пробный (зондирующий) фотон окажется поглощен [95].

Однако, разложение в ряд по частотам Раби в данном случае использовать нельзя из-за малости ширины уровня $\Gamma_2 \approx 2.85 \times 10^{-15} \text{ c}^{-1}$. Тем не менее, см. [130], мнимую часть ρ_{21} можно выделить

$$-\Im\{\rho_{21}\} \equiv -\Im\{\rho_{21}^{(1)}\} - \Im\{\rho_{21}^{(2)}\} = (10.28)$$

$$\frac{\gamma_{21}\Omega_p/2}{\left(\delta_p - \frac{(\delta_p + \delta_c)\Omega_c^2/4}{(\delta_p + \delta_c)^2 + \gamma_{31}^2}\right)^2 + \left(\gamma_{21} + \frac{\gamma_{31}\Omega_c^2/4}{(\delta_p + \delta_c)^2 + \gamma_{31}^2}\right)^2 + \frac{\gamma_{31}\Omega_p\Omega_c^2/8}{\left[\left(\delta_p - \frac{(\delta_p + \delta_c)\Omega_c^2/4}{(\delta_p + \delta_c)^2 + \gamma_{31}^2}\right)^2 + \left(\gamma_{21} + \frac{\gamma_{31}\Omega_c^2/4}{(\delta_p + \delta_c)^2 + \gamma_{31}^2}\right)^2\right] ((\delta_p + \delta_c)^2 + \gamma_{31}^2)}.$$

Первое слагаемое здесь представляет собой однофотонный процесс $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$ (21 см), второе слагаемое можно связать с дополнительным процессом $|1\rangle \rightarrow |2\rangle \rightarrow |3\rangle \rightarrow |2\rangle$. В отсутствие второго поля $\Omega_c = 0$ второе слагаемое в (10.28) исчезает, и можно найти обычное определение (10.26). Эффект (10.28) может быть представлен как Рис. 10.3.

Таким образом, коэффициент поглощения и оптическая толщина, соответственно, не могут быть описаны одним контуром Лоренца (10.26) с последующим преобразованием в профиль Фойта. Можно также отметить, что первый член, соответствующий поглощению в линии 21 см, имеет уширение и смещение профиля линии *anpuopu*.

Безразмерную поправку к оптической толщине (10.25), возникающую в контексте выражения (10.28), можно определить следующим образом:

$$\tau = \tau_0 (1 + \delta \tau), \tag{10.29}$$

где au_0 относится к профилю $\Im\{
ho_{21}^{(1)}\}$, а поправка δau равна

$$\delta\tau = \frac{\Im\{\rho_{21}\} - \Im\{\rho_{21}^{(1)}\}}{\Im\{\rho_{21}^{(1)}\}} \equiv \frac{\Im\{\rho_{21}^{(2)}\}}{\Im\{\rho_{21}^{(1)}\}}.$$
(10.30)

Выражение (10.30) сводится к

$$\delta \tau = \frac{\gamma_{31}}{\gamma_{21}} \frac{\Omega_c^2}{4((\delta_p + \delta_c)^2 + \gamma_{31}^2)}.$$
(10.31)

Выражение (10.31) имеет резонансный характер, но не зависит от пробного поля Ω_p , действующего на линию 21 см.

10.8.2. Недоплеровское уширение и сдвиг частоты

Согласно (10.28) можно определить уширение и сдвиг частоты, обусловленные наличием многофотонных процессов на соседних резонансах, т.е. имеющим сугубо недоплеровское происхождение. Недоплеровское уширение линии для перехода $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$ следует из знаменателя в первом слагаемом и пропорционально Ω_c . Это уширение можно выразить как дополнительный член к естественной ширине γ_{21} :

$$\gamma = \gamma_{21} + \frac{\gamma_{31}\Omega_c^2/4}{(\delta_p + \delta_c)^2 + \gamma_{31}^2} = \gamma_{21} + \gamma_{\text{broad}}.$$
 (10.32)

Максимальное значение γ_{broad} достигается для точного двухфотонного резонанса $\delta_p + \delta_c = 0$:

$$\gamma_{\text{broad}} = \frac{\Omega_c^2}{4\gamma_{31}}.$$
(10.33)

Для очень мощного источника света и малых расстояний между поглотителем и источником можно ожидать, что значение γ_{broad} будет превышать естественную ширину уровня γ_{21} .

Принимая во внимание движение межзвездного газового облака, можно обнаружить, что резонансная частота должна сместиться. Этот доплеров-

ский сдвиг приводит к $\delta_c \to \delta_c + \frac{v}{c}\omega_c$, где c - скорость света. Скорость водородных облаков может составлять порядка нескольких сотен км/с, а в некоторых случаях достигать тысяч километров в секунду. Тогда сумму отстроек $\delta_p + \delta_c$ можно оценить как $(10^{-3} - 10^{-2})\omega_c \sim (10^4 - 10^5)\gamma_{31}$, где $\gamma_{31} = \frac{1}{2}\Gamma_{2p} = \frac{1}{2}6.265 \times 10^8 \text{ c}^{-1}$ и частота Ly_{α} перехода равна $\omega_c = 2.466 \times 10^{15} \text{ c}^{-1}$. Таким образом, доплеровский сдвиг приводит к подавлению γ_{broad} . Тем не менее, поскольку спектр излучения источника имеет континуальный характер, всегда можно выделить случай точного двухфотонного резонанса. Следует подчеркнуть, что данное обсуждение соответствует γ_{broad} и не отменяет доплеровского уширения [130].

Выражение (10.28) позволяет также найти сдвиг частоты для перехода $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$. Для этого отстройку δ_p можно рассматривать как параметр "сканирования" (переменную). Тогда условие резонанса будет иметь вид

$$\delta_p - \frac{(\delta_p + \delta_c)\Omega_c^2/4}{(\delta_p + \delta_c)^2 + \gamma_{31}^2} = 0.$$
(10.34)

Теперь сдвиг частоты равен нулю для точного двухфотонного резонанса, $\delta_p + \delta_c = 0$. В случае, когда происходит отстройка двухфотонного резонанса $\delta_p + \delta_c = \gamma_{31}/2$, сдвиг частоты можно найти как

$$\delta_{\text{shift}} = \frac{\Omega_c^2}{4\gamma_{31}}.$$
(10.35)

Здесь ширина уровня γ_{31} выступает естественным параметром резонансного возбуждения атома.

Другой результат возникает в предположении, что $\delta_p \sim \gamma_{21} \ll \delta_c \sim \gamma_{31}$ (однофотонные резонансы). Тогда, пренебрегая δ_p во втором члене выражения (10.34), сдвиг частоты равен

$$\delta_{\text{shift}} = \frac{\delta_c \Omega_c^2}{4\delta_c^2 + 4\gamma_{31}^2}.$$
(10.36)

Учесть движение водородного облака можно используя параметр β : δ_c =

 $v/c \cdot \omega_c \equiv \beta \gamma_{31}$. Поэтому,

$$\delta_{\rm shift}^{\beta} = \frac{\Omega_c^2}{4\gamma_{31}} \frac{\beta}{1+\beta^2} \approx \frac{\Omega_c^2}{4\gamma_{31}} \frac{1}{\beta}.$$
 (10.37)

Сдвиг пренебрежимо мал, и максимальный сдвиг может быть достигнут для двухфотонного резонанса с отстройкой $\delta_p + \delta_c = \gamma_{31}/2$, (10.35).

10.8.3. Численные результаты

Чтобы оценить вклад недоплеровского уширения, частотного сдвига и поправки к оптической толщине, нужно найти частоту Раби Ω_c . Это можно сделать с помощью плотности потока или яркости источников света и расстояния между источником и поглотителем. Для этого были использованы данные наблюдений затухающих систем Лаймана- α на 1216 Å линия в водороде [237, 278] и мн.др. (см. ссылки в [130]). Для нахождения используемого расстояния и интенсивности излучения на поглотителе были использованы следующие выражения:

$$r = \frac{c}{H_0} (z_{\rm em} - z_{\rm abs}), \qquad (10.38)$$
$$I_{\rm abs} = \frac{L_*}{4\pi (1 + z_{\rm em} - z_{\rm abs})^4 r^2},$$

где L_* - светимость звезды (измеряется в единицах Вт/Гц), не зависящая от расстояния, $H_0 = 2.3 \times 10^{-18} \text{ c}^{-1}$ - постоянная Хаббла, $z_{\rm em}$, $z_{\rm abs}$ - красные смещения источника и поглотителя соответственно. Для наблюдаемой плотности потока S на частоте ν интенсивность на поглотителе равна

$$S_{\rm abs} = S_0 \,\nu_0 \frac{z_{\rm em}^2 (1 + z_{\rm em})^4}{(z_{\rm em} - z_{\rm abs})^2 (1 + z_{\rm em} - z_{\rm abs})^4},\tag{10.39}$$

где S_0 - измеренная плотность потока, а ν_0 - частота соответствующего перехода.

Плотность потока линии Ly_{\alpha} можно выразить через напряженность

Таблица 10.8. В первом столбце указаны названия источников. Во втором и третьем столбцах представлены красные смещения звезды и поглотителя, соответственно, где наблюдалось поглощение 21 см в сочетании с поглощением Ly_{α} . В следующем столбце показан поток плотности на частоте 1.4 ГГц (сверхтонкое расщепление основного состояния атома водорода, переход $|1\rangle \leftrightarrow |2\rangle$). В пятом столбце приведены значения плотности потока и светимости на частоте Ly_{α} . Значения скорости водорода на линии 21 см приведены в шестом столбце. Наконец, в последнем столбце таблицы приведены значения оптической толщины. Ссылки на использованные данные см. в [130].

Name	$z_{\rm em}$	$z_{ m abs}$	$S_{1.4\Gamma\Gamma\mu}, Я$ н	$log L_{lpha}, W/\Gamma$ ц	v, км/с	$ au_0$
0235 + 164	0.94	0.523869	1.7	$log[\nu f] pprox -12.5$ эрг/(см ² с)	125	$\left(\frac{1}{f}\right)\int\tau d\upsilon = 13\pm0.6$
3C 190	1.1946	1.19565	2.47	0.17, Ян	-37.1	0.0027 ± 0.0002
3C 216	0.668	0.63	3.4	22.699	102	0.38
J0414 + 0534	2.6365	0.9586	1.82	22.188	205	0.0212(16)
J0414 + 0534	2.6365	2.63534	3.31	22.188	-94	(0.015 ± 0.002)
0902 + 343	3.398	3.3968	1.2	22.422	120	-
3C 49	0.621	0.6207	7.28	20.777	-138	0.036 ± 0.003
3C 286	0.849	0.692153	14.7	2.7, Ян	4.2	0.280 ± 0.004
0118-272	0.559	0.558	0.93	0.95, Ян	-	$log[N_{HI}] = 20.3$
0405-331	2.570	2.562	0.63	0.56, Ян	_	$log[N_{HI}] = 20.6$
0537-286	3.104	2.976	0.862	0.90, Ян	-	$(0.41 \pm 0.22) \times 10^{22}$
0957+561A	1.413	1.391	0.59	0.15, Ян	25	$N_{HI} = 7 \times 10^{19} \pm 30\%$
0248 + 430	1.31	0.3939	1.4	1.5, Ян	40	$N_{HI} = (3.6 \pm 0.4) \times 10^{19}$
0336-017	3.197	3.0619	0.60	0.15, Ян	13	$log[N_{HI}] = 21.25, \tau_0 < 0.2$
0528-250	2.813	2.8110	1.16	0.59, Ян	5	$log[N_{HI}] = 21.3 \pm 0.1$
2128-123	0.501	0.430	1.8	0.7, Ян	75	$log[N_{HI}] = 19.37 \pm 0.08, \ \tau_{LL} \simeq 150$

электрического поля E_{α} как

$$S_{\alpha} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} c E_c^2 , \qquad (10.40)$$

где ϵ_0 - диэлектрическая проницаемость вакуума, а μ_0 - проницаемость вакуума. В принципе, частоту Раби для перехода 21 см можно определить аналогично, т.е. как $S_{21} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} c B_p^2$.

Данные, использованные в расчетах, собраны в Таблице 10.8.

Используя данные из Таблицы 10.8, были выполнены оценки уширения линии и сдвига частоты. Поправка к оптической толщине $\delta \tau$ для нулевой и ненулевой отстройки рассчитывается по формуле (10.31). Эффект Доплера можно учесть, используя шестой столбец в Таблице 10.8. Следует отметить, что ввиду малости частоты ω_{21} по отношению к Ly_{α}, отстройку Таблица 10.9. В первом столбце указаны названия источников в соответствии с Таблицей 10.8. Во втором столбце приведены значения для недоплеровского уширения. Сдвиг частоты δ_{shift} для перехода $|1\rangle \leftrightarrow |2\rangle$ представлен в третьем столбце. В четвёртом столбце указаны относительные вклады $\delta \tau$ при отстройках $\delta_p \ll \delta_c = \frac{v}{c}\omega_{32}$. Значения $\delta \tau_0$ приведены в последнем столбце, в котором после запятой указаны значения поправки к оптической толщине, заданной в Таблице 10.8.

Name	$\gamma_{\rm broad}, {\rm c}^{-1}$	$\delta_{\rm shift}^{\beta}, {\rm c}^{-1}$	δau при	$\delta au_0, \delta au_0 \cdot au_0$	
	vs $\Gamma_2 = 2.85 \times 10^{-15}, c^{-1}$		$\delta_c = \frac{v}{c}\omega_{32}$		
0235+164	9.28×10^{-20}	3.87×10^{-23}	1.53×10^{-13}	$6.51 \times 10^{-5}, 8.46 \times 10^{-4}$	
3C 216	2.34×10^{-17}	7.97×10^{-21}	5.805×10^{-11}	$0.0164, 6.23 \times 10^{-3}$	
$J0414 + 0534(z_{abs} = 0.9586)$	4.93×10^{-24}	3.37×10^{-27}	3.02×10^{-18}	$3.46 \times 10^{-9}, \ 7.33 \times 10^{-11}$	
$ \boxed{ J0414 + 0534(z_{abs} = 2.63534) } $	5.59×10^{-16}	1.75×10^{-19}	1.63×10^{-9}	$0.392, 5.88 \times 10^{-3}$	
0902 + 343	8.502×10^{-16}	3.403×10^{-19}	1.52×10^{-9}	0.597	
3C 49	3.07×10^{-16}	1.41×10^{-19}	4.15×10^{-10}	$0.215, 7.74 \times 10^{-3}$	
0248 + 430	6.38×10^{-16}	8.51×10^{-20}	1.03×10^{-8}	0.448	
2128-123	1.32×10^{-14}	3.31×10^{-18}	6.07×10^{-8}	0.108, 16.1	
3C 190	3.08×10^{-11}	3.798×10^{-15}	5.79×10^{-4}	$4.63 \times 10^{-5}, \ 1.25 \times 10^{-7}$	
3C 286	8.398×10^{-14}	1.18×10^{-18}	1.23×10^{-4}	0.0169, 0.00475	
0118-272	1.72×10^{-10}	-	-	8.29×10^{-6}	
0405-331	8.95×10^{-10}	-	-	1.59×10^{-6}	
0537-286	2.07×10^{-11}	-	-	6.88×10^{-5}	
0957+561A	1.89×10^{-12}	1.58×10^{-16}	7.81×10^{-5}	$7.53 \times 10^{-4}, \ 0.0753$	
0336-017	3.69×10^{-12}	1.60×10^{-16}	5.63×10^{-4}	$3.86 \times 10^{-4}, \ 7.72 \times 10^{-5}$	
0528-250	2.41×10^{-8}	4.02×10^{-13}	0.0402	5.91×10^{-8}	

 δ_p можно положить равной нулю, поскольку $\delta_p = \beta \omega_p \ll \delta_c = \beta \omega_c$. Результаты численных расчетов приведены в Таблице 10.9, обозначения $\delta \tau_0$ и $\delta \tau$ соответствуют нулевой и ненулевой отстройке, соответственно.

10.8.4. Анализ результатов

Поправка к оптической толщине.

Итак, показано, что профиль линии поглощения перехода $|1\rangle \leftrightarrow |2\rangle$ формируется двумя вкладами: $\Im\{\rho_{21}^{(1)}\}$ и $\Im\{\rho_{21}^{(2)}\}$. Дополнительный вклад в профиль линии пропорционален Ω_p и Ω_c , частотам Раби переходов $|1\rangle \leftrightarrow |2\rangle$ и $|2\rangle \leftrightarrow |3\rangle$, соответственно. Его физическая интерпретация была дана в [95] как интерферирующие переходы в атоме. Используя такую модификацию,

поправку к оптической толщине можно найти по формуле (10.31). Поправка должна быть небольшой для $\Omega_c \ll \gamma_{21}$. Однако, ввиду малости ширины уровня γ_{21} условие выполняется для сильно отдаленных источника и поглотителя, а для $z_{\rm em} \approx z_{\rm abs}$ наблюдается противоположная ситуация (для очень мощного источника света). В этом случае основной вклад в профиль линии дает второе слагаемое $\Im\{\rho_{21}^{(2)}\}$, а поправку к оптической толщине следует принять как обратную величину первого вклада. Таблица 10.9 условно разделена на две части, отображающим как раз оба случая (сильно и слабо отдаленные источник и поглотитель). Численные результаты поправки на оптическую толщину при нулевых отстройках в случае $\Omega_c \ll \gamma_{21}$ и $\gamma_{21} \ll \Omega_c$ собраны в первой и второй частях Таблицы 10.9 в виде $\delta\tau_0$.

Хотя всегда можно выделить случай нулевой отстройки, поскольку излучение источника света имеет континуальный характер, для детального описания профиля линии поглощения 21 см в межзвездной среде следует учитывать скорость облаков. Последнее можно выразить приближенным равенством $\delta_p + \delta_c \approx \frac{v}{c} \omega_{32}$, где значения v указаны в Таблице 10.8. Численные результаты для $\delta \tau$ также приведены в Таблице 10.9.

В частности, из Таблицы 10.9 следует, что вклад $\delta \tau_0$ может быть существенным и превышать точность экспериментального определения τ_0 . Хотя приведенный анализ достаточно груб и не включает фитинг профилем Фойта, основной вывод состоит в том, что двухуровневое приближение атома недостаточно. Уже в трехуровневом приближении при соответствующем фите профиля поглощения необходимо учитывать дополнительные процессы, происходящие в атоме. Параметры среды, извлеченные из такого фита, можно скорректировать с помощью выражений (10.28), (10.31).

Недоплеровское уширение и сдвиг частоты. В соответствии с выражением (10.28), профиль линии поглощения можно анализировать с точки зрения уширения линии. Независимо от того, какой вклад является доминирующим, $\Im\{\rho_{21}^{(1)}\}$ или $\Im\{\rho_{21}^{(2)}\}$, линия поглощения возникающая из элемента матрицы плотности изменяется на ширину γ_{broad} , см. (10.32). Максимальное уширение можно оценить как $\Omega_c^2/4\gamma_{31}$, (10.33). Значения γ_{broad} при нулевых отстройках приведены в Таблице 10.9. Обнаружено, что уширение может быть значительным и на несколько порядков превышать естественную ширину линии.

Значительный интерес таких исследований состоит в определении сдвига частоты и, следовательно, уточнении расстояний до источника света и размеров облаков. Точность определения красного смещения находится на уровне 10^{-10} [279], а в некоторых случаях достигает 10^{-11} [280]. Процедуру определения красного смещения можно свести к нахождению максимума соответствующего контура линии. Таким же образом был получен сдвиг частоты, выражение (10.37). Максимальный сдвиг частоты возникает при $\delta_p + \delta_c = \gamma_{31}/2$. Численные значения перечислены в Таблице 10.9 в третьем столбце для $\delta_{\text{shift}}^{\beta}$ и равны γ_{Broad} в максимуме (см. второй столбец Таблицы 10.9). Тогда, неопределенность красного смещения δz_{shift} можно оценить с помощью сдвига частоты δ_{shift} следующим образом:

$$\delta z_{\text{shift}} = \frac{\delta_{\text{shift}}(1+z_{\text{abs}})}{\nu_0},\tag{10.41}$$

где ν_0 - частота перехода. Значения, приведенные в Таблице 10.9, показывают, что этот эффект весьма незначителен и может быть исключен из соответствующего анализа.

Таким образом, хотя сдвиг частоты пренебрежимо мал, ширина профиля линии может быть на несколько порядков больше естественной. Наиболее существенный эффект возникает для оптической толщины. В частности, погрешность определения оптической толщины для источника J0414+0534 составляет около 13%, см. Таблицу 10.8, тогда как вклад (10.31) оказывается около 39%. Тот же результат можно получить и для источника света 3С 49: погрешность и поправка составляют около 8% и 20%, соответственно. Величина поправки к оптической толщине и, следовательно, к столбцовой плотности водорода может достигать 60%, см. Таблицу 10.9. При $z \approx z_{\rm abs}$, фитирование наблюдаемого профиля линии однофотонным контуром для изолированного резонанса может привести к завышению соответствующих величин.

В заключение данной главы стоит обратить внимание на то, что процессы однократного рассеяния фотона на атоме водорода не полностью отражают явления, связанные с переносом излучения [76, 99]. В рамках формализма матрицы плотности показано, что профиль линии поглощения (излучения) претерпевает значительные изменения. В частности, теория матрицы плотности позволяет детально описать процессы излучения (поглощения) атомом, подверженного воздействию внешнего излучения. Профиль линии однофотонного поглощения в этом случае может быть получен в рамках двухуровневого приближения атомной системы, которое представляет собой нулевое приближение. Однако, следует учитывать дополнительные процессы эмиссии (поглощения). Эти процессы можно оценить в рамках трехуровневого приближения. Показано, что дополнительные интерферирующие переходы приводят к модификации профиля (контур линии получен явно) соответствующей линии. Также, основываясь на приближении Соболева, показано как теория переноса излучения может быть модифицирована с учетом явления ЭИП.

Заключение

Представленные в диссертации результаты относятся к теоретическому исследованию одно- и многофотонных процессов излучения и (или) поглощения. Как следствие, детальное теоретическое описание, представленное в диссертации, позволило явно учесть роль естественной асимметрии линии и асимметрии вызванной воздействием внешних полей. Приложение полученных результатов можно отнести сразу к трем широчайшим областям современной физики.

К первой из них относится спектроскопия атома водорода и прецизионные измерения частот переходов. В связи с достигнутой точностью в спектроскопических экспериментах для атома водорода, выявление эффектов влияющих на прецизионное определение частоты является чрезвычайно актуальным. В частности, теоретическое описание экспериментов по измерению частоты 1s - 2s перехода в водороде показало, что асимметрия линии не имеет решающей роли. Экспериментальныя погрешность определения частоты на несколько порядков превышает ожидаемый сдвиг за счет асимметрии профиля линии. Однако, картина существенно меняется для измерения частот в возбужденные состояния с главным квантовым числом n > 2. В этом случае, роль асимметрии линии может иметь решающую роль в определении частоты перехода. В рамках теории, представленной в диссертации, рассмотрен целый ряд эффектов, приводящих к асимметрии профиля спектральной линии как для полного, так и для дифференциального сечения рассеяния. Наиболее значимым является эффект квантовой интерференции, получаемый для дифференциального сечения рассеяния. По-мимо вычисления сдвигов резонансной частоты, возникающей за счет близколежащих к резонансному состояний, показано, что имеется влияние процесса излучения на формирование профиля поглощения. В рамках процесса однофотонного поглощения явно продемонстрирована роль асимметрии профиля за счет каскадного процесса излучения. Более того, на основе детального теоретического анализа указаны возможности для дальнейшего повышения точности экспериментов, связанных с измерением частот переходов в высоковозбужденные состояния. В рамках спектроскопии атома водорода обсуждаются как одно-, так и двухфотонные процессы поглощения.

К другой, не менее важной, области относятся эффекты, возникающие во внешнем электрическом поле. Так, показано, что возникающие в вероятностях излучения линейные по полю вклады могут приводить к существенной разнице спектральных характеристик атомов водорода и антиводорода. При этом, анализ, представленный в диссертации, касается не только метастабильного 2s состояния, но и высоковозбужденных (ридберговских) состояний. Последнее обусловлено экспериментальными условиями. В рамках проведенных исследований по этому направлению было обнаружено, что даже чрезвычайно слабые ("остаточные") поля могут приводить к обнаружению различий спектров H и H. Кроме того, показано как различия в спектрах атомов H и H, возникающие во внешних полях, могут быть использованы для поиска анти-материи во Вселенной.

Исследование роли асимметрии спектральной линии (естественной или индуцированной внешними полями) с необходимостью потребоавли детального вычисления двухфотонных переходов. В рамках диссертации представлена нерелятивистская теория, использующая различные формы и калибровки для соответствующих величин, представлены оценки вклада отрицательного спектра энергий. Вычисленные значения находятся в хорошем соответствии с полностью релятивистскими расчетами; дается соответствующий сравнительный анализ для различных калибровок.

Наконец, к третьей области, к которой прилагаются проведенные исследования, относятся астрофизические исследования микроволнового космического фона и межзвездной среды. В рамках данных вопросов, роль играют не только "чистые" многофотонные процессы излучения (детально обсуждаемые в диссертации), но и каскадные процессы, а также асимметрия спектральной линии. В частности, в диссертации представлен более "правильный" профиль линии, вытекающий из строго КЭД описания, продемонстрирована невозможность отделения "чистого" излучения (приводящее к непосредственному "отрыву" излучения), исследована роль двухфотонных мультипольных процессов излучения высоковозбужденных состояний, показана возможность выделения двухфотонного звена (в резонансном приближении) в мнофотонном каскадном распаде. Наконец, в качестве астрофизического приложения, рассмотрено влияние внешнего излучения на профиль линии; явно получен модифицированный контур и показан способ учета соответствующих эффектов, сопровождаемый численными оценками.

Благодарности

Автор диссертации считает своей почетной обязонностью выразить глубочайшую признательность своим коллегам Лабзовскому Л.Н., Дубровичу В.К., Андрееву О.Ю., Волотке А.В., Глазову Д.А., Кожедубу Ю.С. Plunien G., Soff G. и др. Ряд проведенных исследований был выполнен совместно с Залялютдиновым Т.А., Аникиным А.А., Щедриным Г. и Черновской Е., чей вклад не должен быть недооценен. Профессор Лабзовский Л.Н. является основоположником исследований асимметрии контура линии и научным наставником, без чьего руководства данные исследования были бы не возможны. Работа была поддержана гранатами РФФИ, РНФ, НИР из средств СПбГУ, грантами Института Макса Планка (Германия), а также другими некоммерческими фондами и программами.
Список иллюстраций

2.1Рассеяние фотона на связанном электроне. Волнистая линия обозначает поглощение, если стрелка направлена к вершине, или испускание, если стрелка направлена от вершины, фотона, а двойная сплошная линия означает связанный электрон в поле ядра (картина Фарри (Furry)); ω_1, ω_2 – частоты поглощенных и испущенных фотонов, i, n и f обозначают начальное, промежуточное и конечное состояния электрона, 35соответственно. Сравнение профилей Ly_α линии в красном крыле для профи-2.2лей поглощения, заданных выражениями (2.29), (2.40), (2.44), (2.45), (2.46) как функции от длины волны λ . Коэффициент нормировки $\aleph = 2\pi$ выбран для профилей заданных согласно (2.29) и (2.40). Пик соответствует резонансной длине волны $\lambda_{\alpha} = 1216$ Å. 49 4.1 Процесс двухфотонного поглощения, сопровождающийся спонтанным распадом. Рассматривается переход в метастабильное состояние 2s атома водорода (n = 2s в обозначениях Рис. 2.1), время жизни состояния $2s \tau = 1/8.229$ секунды, начальное и конечное состояния совпадают и представлены

основным состоянием 1s.

- 4.2 Схематическое изображение электронного пропагатора $S^{\text{FGS}}(x_1, x_2)$ (4.6) в координатном пространстве. Двойная сплошная линия и "обычная" точка представляют вершину и электрон, распространяющийся во out-space. одинарная сплошная линия и "выколотая" точка представляют собой вершину и электрон, распространяющийся в in-space. Предполагается, что соответствующие состояния in и out характеризуются одним и тем же набором квантовых чисел.
- 4.3Процесс двухфотонного возбуждения 1s - 2s атома водорода с последующим распадом во внешнем электрическом поле. Одинарные сплошные линии описывают волновые функции электрона и пропагатора в отсутствие внешнего электрического поля. Составная внутренняя электронная линия представляет собой электронный пропагатор в рамках теории [184], см. Рис. 4.2. Внешняя двойная сплошная линия соответствует атомному электрону, распространяющемуся во внешнем электрическом поле. Как и в стандартной теории, волнистые линии описывают фотоны. Два поглощенных фотона представляют собой лазерные фотоны с частотой $\omega =$ $1/2(E_{2s}-E_{1s})$, где E_i - энергии состояний атомного электрона в отсутствие внешнего поля (собственные состояния inгамильтониана). Испускаемый фотон имеет частоту ω' . Обозначения состояний с тильдой ($\tilde{a} = 1\tilde{s}, \tilde{a}' = 2\tilde{s}$) соответствуют электронным состояниям во внешнем поле (собственным состояниям out-гамильтониана); в частности, $2\tilde{s}$ состояние
- 4.4 Схема уровней двухфотонного 1s 2s перехода с учетом сверхтонкого расщепления. Вертикальные двойные линии обозначают разрешенные двухфотонные переходы. Вертикальные двойные пунктирные линии обозначают запрещенные по теореме Ландау-Янга двухфотонные переходы [122, 124, 125]. Вклад в НР поправку к частоте 1s 2s перехода возникает от разрешенного перехода 1s 2p.

68

70

- 5.1 НР поправка к частоте перехода $2s_{1/2}^{F_i=0} \rightarrow 4p_{1/2}^{F_a=1}$ как функция угла между векторами $\boldsymbol{n}_{k_1}, \, \boldsymbol{n}_{k_2}$ для эксперимента типа 1 (сплошная линия) и в зависимости от угла между векторами $\boldsymbol{e}_1, \, \boldsymbol{n}_{k_2}$ в эксперименте типа 2 (пунктирная линия) согласно выражению (5.16).
- 5.2 НР поправки в кГц для исследованных в эксперименте переходов [196] в зависимости от угла между вектором поляризации поглощенного фотона и вектором распространения излучаемого фотона, $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{n}_{\boldsymbol{k}_2}$. Графики, соответствующие $2^3 S_1^{3/2} \rightarrow 2^3 P_0^{1/2}$ и $2^3 S_1^{1/2} \rightarrow 2^3 P_0^{1/2}$ опущены в виду их малости. 104
- 6.1 Двухфотонный процесс возбуждения связанного электрона. Волнистая линия обозначает поглощение или излучение фотона. Двойная сплошная линия обозначает связанный электрон; *ω*₁, *ω*₂ - частоты поглощенных фотонов, а *ω*₃ - частота излучаемого фотона. Индексы *i*, *n*, *k*, *f* соответствуют начальному, двум промежуточным и конечному состояниям электрона, соответственно. Согласно правилам Фейнмана, существует еще 5 диаграмм, относящихся к перестановкам фотонов, которые здесь для краткости опущены.
- 6.3 НР поправка $\delta_{\rm NR}/2$ к частоте перехода $1s_{1/2}^{F_i=1} \rightarrow 3s_{1/2}^{F_a=1}$ в водороде (в Гц). Обозначения те же, что и для Рис. 6.2. . . . 114

6.5	Суммарный сдвиг частоты $\delta_{\rm NR}/2$ (в Гц) для частот $2s_{1/2}^{F_i=1} - nd_{3/2}^{F_a=2}$ ($n = 4, 6, 8, 12$) переходов в водороде, см. выраже-	
	ния (6.11)-(6.14) и (6.16)-(6.19). Все обозначения аналогичны	
	с Рис. 6.4.	116
6.6	Схематическая иллюстрация асимметрии профиля линии,	
	возникающей за пределами резонансного приближения для	
	эксперимента [32]	126
6.7	Экспериментальный профиль оптической фононной полосы	
	комбинационного рассеяния поликристаллического кремния.	
	Значения x показывают отношение сигнал/шум. Здесь и да-	
	лее спектры измерены на спектрометре LabRam HR-800 с	
	возбуждением лазерной линией 632.8 нм от источника He-Ne,	
	конфокальным отверстием 100 микрон и дифракционной ре-	
	шеткой 1800 град/мм. Ошибка измерения равна 0.35 см $^{-1}$.	
	Отношение сигнал/шум варьировалось за счет использова-	
	ния фильтров нейтральной плотности в лазерном тракте	132
6.8	Экспериментальный профиль полосы $lpha$ для серы с двойной	
	структурой на частоте около 219 см ⁻¹ , фитированные соглас-	
	но лоренцевой модели. Ошибка измерений составляет ± 0.35	
	cm^{-1}	134
6.9	Наблюдаемый профиль полосы для серы с размытой двойной	
	структурой при 473 см ⁻¹ . Для аппроксимации эксперимен-	
	тальных данных использовалась лоренцева модель. Ошибка	
	измерения равна ± 0.35 см ⁻¹	134
71	Схема уровней основного 1s1/2 состояния в атомах водоро-	
	да (Н) и антиводорода (П). Уровни изображены с учетом	
	спина ядра (полного момента F) и зеемановского расщепле-	
	ния, соответствующего расщеплению вырожденных подуров-	
	ней с разными магнитными квантовыми числами M _F . Линей-	
	ная поляризация, соответствующая переходу $F M_F = 10 \rightarrow$	
	$F' M_{F'} = 0.0$, показана стрелкой вверх-вниз. Левая и правая	
	круговые поляризации обозначены кружками со стрелками.	150

- 8.1 Распределение частот $dW_{3s,1s}^{(2\gamma)}/d\omega$ для полного двухфотонного перехода $3s \rightarrow 1s + 2\gamma$, включая каскадный и "чистый" двухфотонный переходы как функции частоты (в атомных единицах). Значения $dW_{3s;1s}^{(2\gamma)}/d\omega$, разделенные на α^6 (α - постоянная тонкой структуры), представлены в зависимости от частоты в интервале $[0, \omega_0], \omega_0 = E_{3s} - E_{1s}$. Границы частотных интервалов **I-V** обозначены вертикальными линиями.
- 8.2 Функция распределения по частоте $dW_{4s,1s}^{(2\gamma)}/d\omega$ для полного двухфотонного $4s \rightarrow 1s + 2\gamma$ перехода, включая резонансный и нерезонансный переходы. $dW_{4s,1s}^{(2\gamma)}/d\omega$ построена в атомных единицах в зависимости от частоты в интервале $[0, \omega_0]$, $\omega_0 = E_{4s} - E_{1s}$; значения вероятности для наглядности поделены на α^6 (α - постоянная тонкой структуры). Границы подинтервалов (**I**)-(**IX**) отмечены вертикальными линиями. 177

172

190

- 8.3 Набор двухпетлевых диаграмм Фейнмана, используемых для вычисления "двухфотонной ширины". В зависимости от того как "разрезана" диаграмма, возникают поправки к ширинам одно- и двухфотонного распадов (подробное изложение представлено в [121]). Здесь использованы стандартные обозначения: состояние, для которого ищется поправка, обозначено А, волнистая линия означает фотонный пропагатор, двойная сплошная линия электронный пропагатор. Диаграммы а), b) неприводимые, а с) приводимая. Последняя требует использования адиабатической теории S-матрицы для устранения дополнительно возникающих расходимостей за счет "reference" состояний.
- 8.4 Схематическое изображение перехода $3p \rightarrow 1s + 3\gamma(E1)$. Тройная вертикальная линия со стрелкой (a)) обозначает общий трехфотонный вклад, состоящий из "чистого" трехфотонного распада в 1s состояние b), однофотонного перехода в 2s состояние с последующим двухфотонным звеном c) и двухфотонного звена 3p - 2p с последующим однофотонным распадом d).

8.5	Схематическое изображение перехода $4s \rightarrow 1s + 4\gamma(E1)$ с	
	наличием двухфотонных звеньев. Обозначения аналогичны	
	Рис. 8.4.	196

10.5 Схематическое изображение энергетических уровней в атоме водорода. Нижние состояния соответствуют основному состоянию со сверхтонкими подуровнями для полных угловых моментов атома F = 1 и F = 0. Длина волны резонансного перехода между сверхтонкими подуровнями составляет 21 см. Верхнее состояние представлено возбужденным 2p состоянием, соответствующее переходу Лайман- α . Ω_p и Ω_c обозначают соответствующее переходу Лайман- α . Ω_p и Ω_c обозначают соответствующие частоты Раби для пробного и управляющего полей (Ω_{α} и Ω_{β} в предыдущих обозначениях) от внешнего источника. 239

Список таблиц

- 5.1 НР поправки в кГц к частоте перехода $2s_{1/2}^{F_i=0} \to 4p_{1/2}^{F_a=1} (\nu_{1/2}$ в обозначениях [32]) с учетом интерферируещего перехода в состояние $4p_{3/2}^{F_{a'}=1}$ для эксперимента типа 2 ($e_1n_{k_2}$ корреляция) и $2s_{1/2}^{F_i=0} \to 4p_{3/2}^{F_a=1} (\nu_{3/2}$ в обозначениях [32]) с учетом состояния $4p_{1/2}^{F_a'=1}$. Такие же значения получены для эксперимента типа 1 ($n_{k_1}n_{k_2}$ корреляция).
- 5.2 Численные значения частоты $\omega_{\rm res}^{\max{(1,2)}}$. В первом столбце указан канал парциального рассеяния, во втором столбце приведены значения ω_0 , использованные в расчетах для $\nu_{1/2}$ и $\nu_{3/2}$, см. [187], в третьем столбце показаны соответствующие значения нерезонансной поправки, а в последнем столбце приведены значения $\omega_{\rm max}$. Все значения указаны в кГц.
- 5.3 Численные значения нерезонансных сдвигов и общего вклада $\delta\omega_{\Sigma}$, умноженные на коэффициент доли каскада $W_{4p-n_al_a}/\Gamma_{4p}$. Приведено значение угла, при котором достигаются максимальное (θ_{\max}), минимальное (θ_{\min}) значения, а также значения НР поправок при "магическом угле" (θ_{m}). В выделенной строке указаны значения угла, при котором суммарный вклад равен нулю (θ_0), если он существует, доли каскада и рассматриваемый процесс. Все значения указаны в кГц.

87

- 5.6 Парциальные вклады $\delta_{\rm NR}(i \to a[a'])$ в полную поправку для синглетной ($F_i = 0$) и триплетной ($F_i = 1$) линий $i \to a$, возникающих вследствие интерференции с переходом $i \to a'$ в мюонном атоме водорода. Угол между вектором поляризации падающего фотона и вектором распространения уходящего фотона обозначен θ , что соответствует эксперименту второго типа согласно разделу 5.2, энергетическое расщепление определено как $\Delta \equiv E_{n_a l_a j_a' F_a'} - E_{n_a l_a j_a F_a}$. Результаты представлены для двух разных случаев: 1) когда конечные состояния предполагаются фиксированными; 2) производится суммирование по всем разрешенным конечным состояниям. Случаи, не зависящие от θ , приводятся без указания угла. 102

- 6.3 Естественные и индуцированные излучением АЧТ ширины линий для состояний ns/nd в атоме водорода при T = 300 К. Все значения указаны в Гц. Суммирование по n в (6.25) ограничено только дискретным спектром и n = 300, что оправдано достаточно малым коэффициентом $k_BT \approx 9.5 \times 10^{-4}$ в атомных единицах. Значения даны в Гц. Указана также доля от вклада в нерезонансную поправку, x (безразмерная величина).
- 6.4 Максимум полосы комбинационного рассеяния кремния, полученный в результате расчетов и фитирования (волновые числа, ν , в см⁻¹). В первом столбце показано отношение сигнал/шум x, во втором столбце показана экспериментальная погрешность. Значения, полученные с использованием приближений Гаусса, ν_{max}^{G} , и Лоренца, ν_{max}^{L} , приведены в третьем и четвертом столбцах соответственно. Результаты расчетов методом моментов приведены в пятом столбце. Наконец, в последнем столбце указаны значения, рассчитанные в приближении (6.33) с разницей между n = 20 и n = 40 в скобках. 133

- 8.1 Коэффициенты ветвления и вероятности перехода (в с⁻¹) для разных каналов распада уровня Зs атома водорода с разным размером частотного интервала (l).
 175
- 8.2 Вероятности перехода в с⁻¹, а также их относительные величины, для различных каналов двухфотонного распада 4*s* уровня в подинтервалах (I)-(IX) в зависимости от размеров интервалов (*l*-кратных соответствующей ширине, см. в тексте). Последняя колонка таблицы относится к предельному случаю, когда интервалы II,IV,VI и VIII замыкаются друг с другом с использованием двух параметров $l_1 = 3.48 \times 10^6$, $l_2 = 3.52 \times 10^6$. Этот случай соответствует методу расчета в [164,252].178
- 8.3 Двухфотонные вклады $\tilde{\Gamma}^{(2\gamma)}_{AA'}$, (8.85), в полную ширину атомного уровня для атома водорода. Значения даны в с⁻¹. . . . 192

- 9.1 Представлены численные значения $\delta(\mathcal{E})$ для различных значений главных квантовых чисел начального, *n*, и конечного, *k*, состояний. В третьем столбце представлена величина \mathcal{E}^{\max} в В/м в зависимости от главных квантовых чисел *n* и *k*. В четвертом и пятом столбцах приведены значения $\delta(\mathcal{E}^{\max})$ и $\delta(\mathcal{E})$ при $\mathcal{E} = 500$ В/м в случае ($\nu_{\mathcal{E}}\nu$) = 1, т.е. когда детектирование фотона происходит в направлении поля.
- 210Численные значения $W_1\equiv rac{n^2(n^2-1)}{12}e^2\mathcal{E}^2W^{(1\gamma)}_{np,ks}/\Delta^2$ и $W_2\equiv$ 9.2 $\frac{k^2(k^2-1)}{36} \frac{e^2 \mathcal{E}^2 W^{(1\gamma)}_{ns,kp}}{\Delta_2^2}$ для различных значений главных квантовых чисел начального *n* и конечного *k* состояний (в обратных секундах). В первом и втором столбцах указаны значения главных квантовых чисел *n* и *k*. Третий столбец соответствует значениям вероятностей перехода $W_{ns,ks}^{(1\gamma)}$, а значения $W_{np,ks}^{(1\gamma)}$ в s^{-1} приведены в четвёртом столбце [262–264]. В пятом столбце представлены значения $W_{np,ks}^{(1\gamma)}$ вероятности перехода. Используемые значения лэмбовского сдвига ΔE_L в приведены в шестом столбце. В седьмом и восьмом столбцах указаны значения естественной ширины уровней Γ_{np} и Γ_{ns} , соответственно. Γ_{np} и Γ_{ns} получены как сумма всех парциальных вероятностей E1 переходов в нижележащие состояния. Девятый и десятый столбцы представляют вклады квадратичных членов в (9.29). Использовалась напряженность поля $\mathcal{E}_{c}^{(n)}$, которая приблизительно обеспечивает полное смешивание ns и пр состояний. Все значения приводятся в обратных секундах 213 Обозначения те же, что и в Таблице 9.2, используется значе-9.3 ние $D_c^{(55)} pprox 3 \cdot 10^{-5} \; {
 m B/cm}.$ 214 10.1 Численные значения функции $f(\Omega_{\alpha}, \Omega_{\beta}, \Delta_{\alpha}, \Delta_{\beta})$ для различ-
- 10.1 Численные значения функции f (Ω_α, Ω_β, Δ_α, Δ_β) для различных величин отстроек. В первом столбце указаны различные значения f(Ω_α, Ω_β, Δ_α, Δ_β), во втором и третьем столбце отстройки и соответствующие магнитуды полей. 230

10.2	Численные значения функции $f(\Omega_{lpha},\Omega_{eta},\Delta_{lpha},\Delta_{eta})$ для различ-	
	ных величин отстроек. В первом столбце указаны значения	
	$f(\Omega_{lpha},\Omega_{eta},\Delta_{lpha},\Delta_{eta}),$ во втором и третьем столбцах указаны от-	
	стройки	232
10.3	Численные значения функции $f(\Omega_lpha,\Omega_eta,\Delta_lpha,\Delta_eta)$ для различ-	
	ных величин отстроек. В первом столбце указаны значения	
	$f(\Omega_{lpha},\Omega_{eta},\Delta_{lpha},\Delta_{eta})$, во втором и третьем столбцах указаны от-	
	стройки	233
10.4	Обозначения аналогичны Таблице 10.2.	234
10.5	Обозначения аналогичны Таблице 10.2	235
10.6	Обозначения аналогичны Таблице 10.2.	236
10.7	Обозначения аналогичны Таблице 10.2.	237
10.8	В первом столбце указаны названия источников. Во втором	
	и третьем столбцах представлены красные смещения звезды	
	и поглотителя, соответственно, где наблюдалось поглощение	
	21 см в сочетании с поглощением Ly _a . В следующем столб-	
	це показан поток плотности на частоте 1.4 ГГц (сверхтонкое	
	расщепление основного состояния атома водорода, переход	
	$ 1 angle \leftrightarrow 2 angle$). В пятом столбце приведены значения плотности	
	потока и светимости на частоте Ly _a . Значения скорости водо-	
	рода на линии 21 см приведены в шестом столбце. Наконец, в	
	последнем столбце таблицы приведены значения оптической	
	толщины. Ссылки на использованные данные см. в [130]	245
10.9	В первом столбце указаны названия источников в соответ-	
	ствии с Таблицей 10.8. Во втором столбце приведены значе-	
	ния для недоплеровского уширения. Сдвиг частоты $\delta_{ m shift}$ для	
	перехода $ 1\rangle \leftrightarrow 2\rangle$ представлен в третьем столбце. В четвёр-	
	том столбце указаны относительные вклады δau при отстрой-	
	ках $\delta_p \ll \delta_c = rac{v}{c} \omega_{32}$. Значения δau_0 приведены в последнем	
	столбце, в котором после запятой указаны значения поправ-	

ки к оптической толщине, заданной в Таблице 10.8. 246

Список сокращений и условных обозначений

 R_{∞} постоянная Ридберга (Rydberg constant)

- Z заряд ядра (nuclear charge)
- α постоянная тонкой структуры $\approx 1/137.036$ (fine structure constant)

H атом анти-водорода (anti-hydrogen atom)

- $\mu \mathbf{H}$ атом мюонного водорода (muonic hydrogen atom)
- H атом водорода (hydrogen atom)
- **He** атом гелия (helium atom)
- **Ps** атом позитрония (positronium atom)
- АЧТ абсолютно черное тело (blackbody)
- $\mathcal{A}\Phi\Gamma$ метод двухвременной функции Грина (two-time Green's function method)
- КЛ метод Контура Линии (Line Profile Approach)
- KM квантовая механика (quantum mechanics)
- КЭД квантовая электродинамика (quantum electrodynamics)
- M3И многозарядные ионы (multicharged ions)

M3C межзвездная среда (interstellar medium)

МКИ микроволновое космическое излучение (CMB - cosmic microwave background)

 $\mathbf{M} \mathbf{\Phi} \mathbf{\Gamma}$ метод функции Грина (Green's function method)

- **HP** нерезонансные (nonresonant)
- **ОКВ** метод оператора ковариантного вычисления (covariant evaluation operator method)
- **СТС** сверхтонкая структура (hyperfine structure)
- СЭ собственная энергия (self-energy)
- ЭИП электромагнитная индуцированная прозрачность (electromagnetically induced transparency)
- ЭКИ эффект квантовой интерференции (quantum interference effect)

В работе в основном используются релятивистская система единиц, в которой $\hbar = c = m = 1$, и атомная система единиц $\hbar = e = m = 1$, где c - скорость света, e - заряд электрона, \hbar - редуцированная постоянная Планка, m - масса электрона.

Библиография

- Berestetskii V., Lifshits E., Pitaevskii L. Quantum Electrodynamics. Oxford Butterworth-Heinemann, 1982.
- [2] Akhiezer A.I., Berestetskii V.B. Quantum Electrodynamics. Wiley-Interscience, New York, 1965.
- [3] Labzowsky L., Klimchitskaya G., Dmitriev Yu. Relativistic Effects in the Spectra of Atomic Systems. — Institute of Physics Publishing, 1993.
- [4] Greiner W., Reinhart J. Quantum Electrodynamics. Springer-Werlag Berlin Heidelberg, 2003.
- [5] Bethe H.A., Salpeter E.E. Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms. — Springer Berlin Heidelberg, 1957.
- [6] Sobel'man I.I. Introduction to the Theory of Atomic Spectra. Pergamon, 1972. – ISBN: 9781483159720.
- Shabaev V.M. Two-time Green's function method in quantum electrodynamics of high-Z few-electron atoms // Phys. Rep. 2002. Vol. 356, no. 3. P. 119-228.
- [8] Andreev O.Yu., Labzowsky L.N., Plunien G., Solovyev D.A. QED theory of the spectral line profile and its applications to atoms and ions // Phys. Rep. - 2008. - Vol. 455. - P. 135-246.
- [9] Lindgren I.P.K., Salomonson S., Åsén B. The covariant-evolutionoperator method in bound-state QED // Physics Reports. - 2004. - Vol. 389, no. 4. - P. 161 - 261.

- [10] Indelicato P. QED tests with highly charged ions // Journal of Physics
 B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 2019. Vol. 52, no. 23. P. 232001.
- [11] Mohr P.J., Newell D.B., Taylor B.N. CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2014 // J. Phys. Chem. Ref. Data. – 2016. – Vol. 45. – P. 043102.
- [12] Shabaev V.M., Glazov D.A., Plunien G., Volotka A.V. Theory of Bound-Electron g Factor in Highly Charged Ions // Journal of Physical and Chemical Reference Data. — 2015. — Vol. 44, no. 3. — P. 031205. — 10.1063/1.4921299.
- [13] Glazov D.A., Köhler-Langes F., Volotka A.V. et al. g Factor of Lithiumlike Silicon: New Challenge to Bound-State QED // Phys. Rev. Lett. - 2019. - Vol. 123. - P. 173001.
- [14] Sturm S., Vogel M., Kahler-Langes F. et al. High-Precision Measurements of the Bound Electron's Magnetic Moment // Atoms. - 2017. - Vol. 5, no. 1.
- [15] Arapoglou I., Egl A., Höcker M., et al. g Factor of Boronlike Argon ${}^{40}\text{Ar}^{13+}$ // Phys. Rev. Lett. 2019. Vol. 122. P. 253001.
- [16] Sturm S., Köhler F., Zatorski J., et al. High-precision measurement of the atomic mass of the electron // Nature. 2014. Vol. 506, no. 7489. P. 467–470. 1406.5590.
- [17] Stajic J. A Better-Known Electron Mass // Science. 2014. Vol. 343, no. 6175. - P. 1058-1058.
- [18] Andreev Yu.M., Banerjee D., Bernhard J., et al. Constraints on New Physics in Electron g-2 from a Search for Invisible Decays of a Scalar, Pseudoscalar, Vector, and Axial Vector // Phys. Rev. Lett. - 2021. -Vol. 126. - P. 211802.

- [19] Abi B., Albahri T., Al-Kilani S., et al. Measurement of the Positive Muon Anomalous Magnetic Moment to 0.46 ppm // Phys. Rev. Lett. - 2021. --Vol. 126. - P. 141801.
- [20] Parthey C.G., Matveev A., Alnis J. et al. Improved Measurement of the Hydrogen 1S - 2S Transition Frequency // Phys. Rev. Lett. - 2011. --Vol. 107. - P. 203001.
- [21] Matveev A., Parthey C.G., Predehl K., et al. Precision Measurement of the Hydrogen 1S - 2S Frequency via a 920-km Fiber Link // Phys. Rev. Lett. - 2013. - Vol. 110. - P. 230801.
- [22] Grinin A., Matveev A., Yost D.C., et al. Two-photon frequency comb spectroscopy of atomic hydrogen // Science. – 2020. – Vol. 370, no. 6520. – P. 1061–1066.
- [23] van Rooij R., Borbely J.S., Simonet J. et al. Frequency Metrology in Quantum Degenerate Helium: Direct Measurement of the $2^3S_1 \rightarrow 2^1S_0$ Transition // Science. - 2011. - Vol. 333, no. 6039. - P. 196-198.
- [24] Zheng X., Sun Y.R., Chen J.-J. et al. Laser Spectroscopy of the Fine-Structure Splitting in the $2^{3}P_{J}$ Levels of ⁴He // Phys. Rev. Lett. – 2017. – Vol. 118. – P. 063001.
- [25] Levi F., Calonico D., Calosso C.E. et al. Accuracy evaluation of ITCsF2: a nitrogen cooled caesium fountain // Metrologia. — 2014. — Vol. 51, no. 3. — P. 270–284.
- [26] Nicholson T.L., Campbell S.L., Hutson R.B., et al. Systematic evaluation of an atomic clock at 2×10^{-18} total uncertainty // Nature Communications. - 2015. - Vol. 6, no. 1. - P. 6896.
- [27] McGrew W.F., Zhang X., Fasano R.J., et al. Atomic clock performance enabling geodesy below the centimetre level // Nature. – 2018. – Vol. 564. – P. 87–90.

- [28] Pachucki K., Patkos V., Yerokhin V.A. Testing fundamental interactions on the helium atom // Phys. Rev. A. - 2017. - Vol. 95. - P. 062510.
- [29] Pohl R., et al. The size of the proton // Nature. 2010. Vol. 466. P. 213-216.
- [30] Antognini A., Nez F., Schuhmann K., et al. Proton Structure from the Measurement of 2S-2P Transition Frequencies of Muonic Hydrogen // Science. - 2013. - Vol. 339, no. 6118. - P. 417-420.
- [31] Antognini A., Kottmann F., Biraben F. et al. Theory of the 2S 2P Lamb shift and 2S hyperfine splitting in muonic hydrogen // Annals of Physics. - 2013. - Vol. 331. - P. 127-145.
- [32] Beyer A., et al. The Rydberg constant and proton size from atomic hydrogen // Science. - 2017. - Vol. 358, no. 6359. - P. 79-85.
- [33] Labzowsky L., Karasiev V., Goidenko I. Importance of the non-resonant corrections for the modern Lamb shift measurements in the multicharged hydrogen-like ions // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. - 1994. - Vol. 27, no. 15. - P. L439.
- [34] Labzowsky L.N., Goidenko I.A., Liesen D. The non-resonant corrections to the process of the radiative electron capture of highly charged heavy ions // Physica Scripta. — 1997. — Vol. 56, no. 3. — P. 271–274.
- [35] Labzowsky L.N., Solovyev D.A., Plunien G., Soff G. Asymmetry of the Natural Line Profile for the Hydrogen Atom // Phys. Rev. Lett. - 2001. --Vol. 87. - P. 143003.
- [36] Labzowsky L.N., Solovyev D.A., Plunien G., Soff G. Nonresonant corrections for the hydrogen atom // Canadian Journal of Physics. – 2002. – Vol. 80, no. 11. – P. 1187–1194. – 10.1139/p02-094.
- [37] Labzowsky L., Soloviev D., Plunien G., Soff G. Nonresonant corrections to the 1s-2s two-photon resonance for the hydrogen atom // Phys. Rev. A. 2002. Vol. 65. P. 054502.

- [38] Labzowsky L., Solovyev D., Sharipov V. et al. One- and two-photon resonant spectroscopy of hydrogen and anti-hydrogen atoms in external electric fields // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. - 2003. - Vol. 36, no. 15. - P. L227-L233.
- [39] Labzowsky L., Sharipov V., Solovyev D. et al. Spectroscopy of the hydrogen and anti-hydrogen atoms in external fields // International Journal of Modern Physics B. - 2004. - Vol. 18, no. 30. - P. 3875-3886. - 10.1142/S0217979204026809.
- [40] Labzowsky L.N., Schedrin G., Solovyev D., Plunien G. Nonresonant corrections and limits for the accuracy of the frequency measurements in modern hydrogen experiments // Canadian Journal of Physics. - 2007. -Vol. 85, no. 5. - P. 585-595. - 10.1139/p07-014.
- [41] Labzowsky L., Schedrin G., Solovyev D., Plunien G. Theoretical study of the accuracy limits of optical resonance frequency measurements // Physical Review Letters. - 2007. - Vol. 98. - P. 2030032.
- [42] Labzowsky L., Schedrin G., Solovyev D. et al. Nonresonant corrections for the optical resonance frequency measurements in the hydrogen atom // Phys. Rev. A. - 2009. - Vol. 79. - P. 052506.
- [43] Jentschura U.D., Mohr P.J. Nonresonant effects in one- and two-photon transitions // Can. J. of Phys. - 2002. - Vol. 80, no. 6. - P. 633-644.
- [44] Horbatsch M., Hessels E.A. Shifts from a distant neighboring resonance // Phys. Rev. A. - 2010. - Vol. 82. - P. 052519.
- [45] Horbatsch M., Hessels E.A. Shifts from a distant neighboring resonance for a four-level atom // Phys. Rev. A. - 2011. - Vol. 84. - P. 032508.
- [46] Sansonetti C.J., Simien C.E., Gillaspy J.D., et al. Absolute Transition Frequencies and Quantum Interference in a Frequency Comb Based Measurement of the ^{6,7}Li D Lines // Phys. Rev. Lett. - 2011. - Vol. 107. - P. 023001.

- [47] Brown R.C., Wu S., Porto J.V., et al. Quantum interference and light polarization effects in unresolvable atomic lines: Application to a precise measurement of the 6,7 Li D_2 lines // Phys. Rev. A. 2013. Vol. 87. P. 032504.
- [48] Marsman A., Horbatsch M., Hessels E.A. The Effect of Quantum-Mechanical Interference on Precise Measurements of the n = 2 Triplet P Fine Structure of Helium // J. Phys. Chem. Ref. Data. - 2015. --Vol. 44, no. 3. - P. 031207.
- [49] Amaro P., Fratini F., Safari L., et al. Quantum interference shifts in laser spectroscopy with elliptical polarization // Phys. Rev. A. - 2015. - Vol. 92. - P. 062506.
- [50] Amaro P., Franke B., Krauth J.J., et al. Quantum interference effects in laser spectroscopy of muonic hydrogen, deuterium, and helium-3 // Phys. Rev. A. - 2015. - Vol. 92. - P. 022514.
- [51] Udem Th., Maisenbacher L., Matveev A., et al. Quantum Interference Line Shifts of Broad Dipole-Allowed Transitions // Annalen der Physik. – 2019. – Vol. 531, no. 5. – P. 1900044.
- [52] Solovyev D., Anikin A., Zalialiutdinov T., Labzowsky L. Importance of nonresonant corrections for the description of atomic spectra // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. - 2020. - Vol. 53, no. 12. - P. 125002.
- [53] Anikin A., Zalialiutdinov T., Solovyev D. Angular correlations in twophoton spectroscopy of hydrogen // Phys. Rev. A. - 2021. - Vol. 103. -P. 022833.
- [54] Patkos V., Yerokhin V.A., Pachucki K. Complete $\alpha^7 m$ Lamb shift of helium triplet states // arXiv. 2021. 2103.01037.
- [55] Yerokhin V.A., Patkos V., Puchalski M., Pachucki K. QED calculation of ionization energies of 1snd states in helium // Phys. Rev. A. - 2020. – Vol. 102. – P. 012807.

- [56] Dorrer C., Nez F., de Beauvoir B. et al. Accurate Measurement of the $2^3S_1 3^3D_1$ Two-Photon Transition Frequency in Helium: New Determination of the 2^3S_1 Lamb Shift // Phys. Rev. Lett. 1997. Vol. 78. P. 3658-3661.
- [57] Luo P.-L., Peng J.-L., Hu J., et al. Precision frequency measurements of ${}^{3,4}\text{He}\,2\,{}^{3}P \rightarrow 3\,{}^{3}D$ transitions at 588 nm // Phys. Rev. A. 2016. Vol. 94. P. 062507.
- [58] Namba T. Precise measurement of positronium // Progress of Theoretical and Experimental Physics. — 2012. — Vol. 2012, no. 1.
- [59] Gurung L., Babij T.J., Hogan S.D., Cassidy D.B. Precision Microwave Spectroscopy of the Positronium n = 2 Fine Structure // Phys. Rev. Lett. -2020. – Vol. 125. – P. 073002.
- [60] Ishida, A. New Precise Measurement of the Hyperfine Splitting of Positronium // Journal of Physical and Chemical Reference Data. – 2015. – Vol. 44, no. 3. – P. 031212–03121210.
- [62] Kennedy C.J., Oelker E., Robinson J.M., et al. Precision Metrology Meets Cosmology: Improved Constraints on Ultralight Dark Matter from Atom-Cavity Frequency Comparisons // Phys. Rev. Lett. - 2020. - Vol. 125. -P. 201302.
- [63] Roberts B.M., Dzuba V.A., Flambaum V.V., et al. Dark matter scattering on electrons: Accurate calculations of atomic excitations and implications for the DAMA signal // Phys. Rev. D. - 2016. - Vol. 93. - P. 115037.
- [64] Gelmini G.B. Light weakly interacting massive particles // Reports on Progress in Physics. - 2017. - Vol. 80, no. 8. - P. 082201.

- [65] Kim K.W., Adhikari G., Adhikari P., et al. Limits on interactions between weakly interacting massive particles and nucleons obtained with NaI(Tl) crystal detectors // Journal of High Energy Physics. — 2019. — Vol. 2019, no. 3. — P. 194.
- [66] Andresen G.B., Ashkezari M.D., Baquero-Ruiz M. et al. Confinement of antihydrogen for 1,000 seconds // Nature Physics. - 2011. - Vol. 7, no. 7. - P. 558-564.
- [67] Hori M., Sótér A., Barna D.and Dax A. et al. Two-photon laser spectroscopy of antiprotonic helium and the antiproton-to-electron mass ratio // Nature. - 2011. - Vol. 475, no. 7357. - P. 484-488. - URL: https://www.nature.com/articles/nature10260.
- [68] Korobov V.I. Calculation of transitions between metastable states of antiprotonic helium including relativistic and radiative corrections of order $R_{\infty}\alpha^4$ // Phys. Rev. A. 2008. Apr. Vol. 77. P. 042506. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.77.042506.
- [69] Korobov V.I., Hilico L., Karr J.-Ph. mα⁷-Order Corrections in the Hydrogen Molecular Ions and Antiprotonic Helium // Phys. Rev. Lett. – 2014. – Mar. – Vol. 112. – P. 103003. – URL: https://link.aps.org/ doi/10.1103/PhysRevLett.112.103003.
- [70] Baur G., Boero G., Brauksiepe A. et al. Production of antihydrogen // Physics Letters B. - 1996. - Vol. 368, no. 3. - P. 251-258. - URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/ pii/0370269396000056.
- [71] Blanford G., Christian D.C., Gollwitzer K. et al. Observation of Atomic Antihydrogen // Phys. Rev. Lett. - 1998. - Apr. - Vol. 80. - P. 3037-3040. - URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett. 80.3037.
- [72] Amoretti M., Amsler C., Bonomi G. et al. Production and detection of cold antihydrogen atoms // Nuclear Instruments and Methods in

Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. - 2004. - Vol. 518, no. 1-2. - P. 244-248. - URL: https://www.nature.com/articles/nature01096.

- [73] Ahmadi M., Alves B., Baker C., et al. Observation of the hyperfine spectrum of antihydrogen // Nature. 2017. Vol. 548. P. 66-69. URL: https://www.nature.com/articles/nature23446.
- [74] Ahmadi M., Alves B.X.R., Baker C.J. et al. Observation of the 1S-2P Lyman-α transition in antihydrogen // Nature. – 2018. – Vol. 561, no. 7722. – P. 211–215. – URL: https://www.nature.com/articles/ s41586-018-0435-1.
- [75] Baker C.J., Bertsche W .and Capra A., Carruth C. et al. Laser cooling of antihydrogen atoms // Nature. 2021. Vol. 592, no. 7852. P. 35-42. URL: https://www.nature.com/articles/s41586-021-03289-6.
- [76] Seager S., Sasselov D.D., Scott D. A New Calculation of the Recombination Epoch // The Astrophysical Journal. - 1999. - aug. -Vol. 523, no. 1. - P. L1. - URL: https://dx.doi.org/10.1086/ 312250.
- [77] Peebles P.J.E. Recombination of the Primeval Plasma // Ap.J. 1968. Vol. 153. P. 1.
- [78] Zel'dovich Ya.B., Kurt V.G., Syunyaev R.A. Recombination of Hydrogen in the Hot Model of the Universe // Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics. — 1969. — Vol. 28. — P. 146. — ZhETF, Vol. 55, No. 1, p. 278, January 1969.
- [79] Zeldovich Ya.B., Sunyaev R.A. The Interaction of Matter and Radiation in a Hot-Model Universe // Astrophysics and Space Science. — 1969. — Vol. 4, no. 3. — P. 301–316.

- [80] Strukov I.A., Brukhanov A.A., Skulachev D.P., Sazhin M.V. The Relikt-1 experiment - New results // MNRAS. - 1992. - Vol. 258, no. 2. -P. 37P-40P.
- [81] Smoot G.F., Bennett C.L., Kogut A., et al. Structure in the COBE Differential Microwave Radiometer First-Year Maps // ApJL. - 1992. --Vol. 396. - P. L1.
- [82] Labzowsky L., Solovyev D., Plunien G. Two-photon decay of excited levels in hydrogen: The ambiguity of the separation of cascades and pure twophoton emission // Phys. Rev. A. - 2009. - Vol. 80. - P. 062514.
- [83] Solovyev D., Dubrovich V., Volotka A.V. et al. Two-photon decays of highly excited states in hydrogen // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. - 2010. - Vol. 43, no. 17. - P. 175001.
- [84] Zalialiutdinov T.A., Solovyev D.A., Labzowsky L.N., Plunien G. QED theory of multiphoton transitions in atoms and ions // Physics Reports. — 2018. — Vol. 737. — P. 1–84. — QED theory of multiphoton transitions in atoms and ions.
- [85] Low F. Natural Line Shape // Phys. Rev. 1952. Vol. 88. P. 53.
- [86] Landau L.D., Lifshitz E.M. Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory. – Pergamon Press, 1965.
- [87] Sucher J. S-Matrix Formalism for Level-Shift Calculations // Phys. Rev. - 1957. - Vol. 107. - P. 1448-1449.
- [88] Barbieri R., Sucher J. General theory of radiative corrections to atomic decay rates // Nucl. Phys. B. - 1978. - Vol. 134. - P. 155-168.
- [89] Gell-Mann M., Low F. Bound States in Quantum Field Theory // Phys. Rev. - 1951. - Vol. 84. - P. 350-354.
- [90] Labzowsky L.N. Adiabatic S-matrix approach in QED theory of highly charged two-electron ions // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. - 1993. - Vol. 26, no. 6. - P. 1039-1069.

- [91] Braun M.A., Gurchumelia A.D., Safronova U.I. Relativistic Atom Theory. — Nauka, Moscow, 1984.
- [92] Lindgren I., Morrison J. Atomic many-body theory. Springer series on atoms + plasmas. — Springer, 1986. — ISBN: 9783540166498.
- [93] Gea-Banacloche J., Li Y.-Q., Jin Sh.-Zh., Xiao M. Electromagnetically induced transparency in ladder-type inhomogeneously broadened media: Theory and experiment // Phys. Rev. A. 1995. Jan. Vol. 51. P. 576-584. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA. 51.576.
- [94] Marangos J.P. Electromagnetically induced transparency // Journal of Modern Optics. - 1998. - Vol. 45. - P. 471-503. - URL: https://api. semanticscholar.org/CorpusID:42159034.
- [95] Wielandy S., Gaeta A.L. Investigation of electromagnetically induced transparency in the strong probe regime // Phys. Rev. A. 1998. Sep. Vol. 58. P. 2500-2505. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.58.2500.
- [96] Boyd R.W. Nonlinear Optics. Elsevier Science, 2003. ISBN: 9780080479750.
- [97] Breuer H.P., Petruccione F. The theory of open quantum systems. Great Clarendon Street : Oxford University Press, 2002.
- [98] Keizer, J. On the solutions and the steady states of a master equation //Journal of Statistical Physics. -1972. - Vol. 6, no. 2. - P. 67–72.
- [99] Seager S., Sasselov D.D., Scott D. How Exactly Did the Universe Become Neutral? // The Astrophysical Journal Supplement Series. — 2000. jun. — Vol. 128, no. 2. — P. 407. — URL: https://dx.doi.org/10.1086/ 313388.
- [100] Sobolev V.V. The Diffusion of L_{α} Radiation in Nebulae and Stellar Envelopes. // Sov.Ast. 1957. oct. Vol. 1. P. 678.

- [101] Раппопорт Л.П., Зон Б.А., Манаков Н.Л. Теория многофотонных процессов в атомах. — Атомиздат, Москва, 1978.
- [102] Shabaev V.M., Tupitsyn I.I., Yerokhin V.A. et al. Dual Kinetic Balance Approach to Basis-Set Expansions for the Dirac Equation // Phys. Rev. Lett. - 2004. - Sep. - Vol. 93. - P. 130405. - URL: https://link. aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.93.130405.
- [103] Azimov V.I., Ansel'm A.A., Moskalev A.N., Ryndin R.M. Some paritynonconservation effects in emission by hydrogenlike atoms // Zh. Eksp. Teor. Fiz. - 1974. - Vol. 67. - P. 17-29.
- [104] Mohr P.J. E1 M1 Interference in Radiative Decay of Hydrogenlike Atoms in an Electric Field // Phys. Rev. Lett. - 1978. - Mar. -Vol. 40. - P. 854-856. - URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/ PhysRevLett.40.854.
- [105] Hilley M., Mohr P.J. Radiative decay of hydrogenlike atoms in an electric field // Phys. Rev. A. - 1980. - Jan. - Vol. 21. - P. 24-33. - URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.21.24.
- [106] Solov'ev D.A., Sharipov V.F., Labzovskii L.N., Plunien G. Probabilities of single-photon 2s - 1s transition in hydrogen and antihydrogen atoms in an external electric field // Optics and Spectroscopy. - 2008. - Vol. 104, no. 4. - P. 509-512.
- [107] Anikin A.A., Zalialiutdinov T.A., Solovyev D.A. Nonresonant Effects in the Two-Photon Spectroscopy of a Hydrogen Atom: Application to the Calculation of the Charge Radius of the Proton // JETP Letters. – 2021. – Aug. – Vol. 114, no. 4. – P. 180–187. – URL: https://doi. org/10.1134/S0021364021160037.
- [108] Zalialiutdinov T., Anikin A., Solovyev D. Analysis of nonresonant effects in the two-photon spectroscopy of helium // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. - 2021. - sep. - Vol. 54, no. 16. -P. 165002. - URL: https://dx.doi.org/10.1088/1361-6455/ac232c.

- [109] Solovyev D., Solovyeva E. Adapted method of moments for determining the transition frequency // Physics Letters A. - 2022. - Vol. 432. - P. 128021. - URL: https://www.sciencedirect.com/science/ article/pii/S0375960122001037.
- [110] Labzowsky L.N., Shonin A.V., Solovyev D.A. QED calculation of E1M1 and E1E2 transition probabilities in one-electron ions with arbitrary nuclear charge // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. - 2005. - Vol. 38, no. 3. - P. 265-278.
- [111] Labzowsky L., Solovyev D., Plunien G., Soff G. Two-photon E1M1 and E1E2 transitions between 2p and 1s levels in hydrogen // The European Physical Journal D - Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics. — 2006. — Vol. 37, no. 3. — P. 335–343.
- [112] Solovyev D.A., Labzowsky L.N., Sharipov V.F. Influence of an external electric field on the probabilities of two-photon transitions between 2s, 2p and 1s levels for hydrogen and antihydrogen atoms // Optics and Spectroscopy. 2009. Vol. 107, no. 1. P. 16-24.
- [113] Соловьёв Д.А., Лабзовский Л.Н., Шарипов В.Ф. Одно-, двух- и трехфотонные переходы между 2s-, 2p- и 1s-уровнями для атомов водорода и антиводорода во внешнем электрическом поле и без него // Вестник Санкт-Петербургского Университета. Физика и Химия. — 2009. по. 4. — Р. 377–390.
- [114] Solovyev D., Sharipov V., Labzowsky L., Plunien G. Influence of external electric fields on multi-photon transitions between the 2s, 2p and 1s levels for hydrogen and antihydrogen atoms and hydrogen-like ions // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. - 2010. - Vol. 43, no. 7. - P. 074005.
- [115] Solovyev D., Labzowsky L. Two-photon approximation in the theory of electron recombination in hydrogen // Phys. Rev. A. - 2010. - Vol. 81. -P. 062509.

- [116] Solovyev D., Labzowsky L. The two-photon approximation for the fourphoton decay of the 4d excited state in hydrogen // Canadian Journal of Physics. - 2011. - Vol. 89, no. 1. - P. 123-127.
- [117] Solovyev D., Labzowsky L., Volotka A., Plunien G. Extension of the sum rule for the transition rates between multiplets to the multiphoton case // The European Physical Journal D. - 2011. - Vol. 61, no. 2. - P. 297-304.
- [118] Zalyalyutdinov T.A., Solovyev D.A., Labzovskii L.N. 4s-1s two-photon decay in hydrogen atom with allowance for cascades // Optics and Spectroscopy. - 2011. - Vol. 110, no. 3. - P. 328-334.
- [119] Solovyev D., Solovyeva E. Rydberg-state mixing in the presence of an external electric field: Comparison of the hydrogen and antihydrogen spectra // Phys. Rev. A. - 2015. - Vol. 91. - P. 042506.
- [120] Zalialiutdinov T., Baukina Yu., Solovyev D., Labzowsky L. Theory of the multiphoton cascade transitions with two photon links: comparison of quantum electrodynamical and quantum mechanical approaches // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. - 2014. --Vol. 47, no. 11. - P. 115007.
- [121] Zalialiutdinov T., Solovyev D., Labzowsky L., Plunien G. Two-photon transitions with cascades: Two-photon transition rates and two-photon level widths // Phys. Rev. A. - 2014. - Vol. 89. - P. 052502.
- [122] Zalialiutdinov T., Solovyev D., Labzowsky L., Plunien G. Exclusion principle for photons: Spin-statistic selection rules for multiphoton transitions in atomic systems // Phys. Rev. A. - 2015. - Vol. 91. -P. 033417.
- [123] Zalialiutdinov T., Solovyev D., Labzowsky L. QED calculations of threephoton transition probabilities in H-like ions with arbitrary nuclear charge // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 2016. — Vol. 49, no. 5. — P. 055001.

- [124] Zalialiutdinov T., Solovyev D., Labzowsky L., Plunien G. Spin-statistic selection rules for multiphoton transitions: Application to helium atoms // Phys. Rev. A. - 2016. - Vol. 93. - P. 012510.
- [125] Zalialiutdinov T., Solovyev D., Labzowsky L. Generalized spin-statistic selection rules for atomic transitions with arbitrary number of equivalent photons // The European Physical Journal Special Topics. — 2017. — Vol. 226, no. 12. — P. 2837–2842.
- [126] Labzowsky L., Solovyev D. Resonant spectroscopy of the antihydrogen atom // Phys. Rev. A. - 2003. - Vol. 68. - P. 014501.
- [127] Solovyev D., Labzowsky L. The 21 cm absorption line profile as a tool for the search for antimatter in the universe // Progress of Theoretical and Experimental Physics. - 2014. - Vol. 2014, no. 11. - 111E01.
- [128] Solovyev D., Dubrovich V.K., Plunien G. Investigation of the electromagnetically induced transparency in the era of cosmological hydrogen recombination // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. - 2012. - Vol. 45, no. 21. - P. 215001.
- [129] Solovyev D., Dubrovich V. EIT phenomenon for the three-level hydrogen atoms and its application to the era of cosmological recombination // Central European Journal of Physics. - 2014. - Vol. 12, no. 5. - P. 367-374.
- [130] Solovyev D. Analysis of the absorption line profile at 21 cm for the hydrogen atom in the interstellar medium // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. - 2018. - Vol. 51, no. 22. -P. 225004.
- [131] Weisskopf V., Wigner E. Berechnung der natürlichen Linienbreite auf Grund der Diracschen Lichttheorie // Zeitschrift für Physik. — 1930. — Jan. — Vol. 63, no. 1. — P. 54-73. — URL: https://doi.org/10.1007/ BF01336768.

- [132] Labzowsky L. Natural spectral line width and shape in the relativistic theory of the atom // Zh. Eksp. Teor. Fiz. - 1983. - Vol. 85. -P. 869-880. - URL: http://www.jetp.ras.ru/cgi-bin/r/index/e/ 58/3/p503?a=list.
- [133] Karasiev V.V., Labzowsky L.N., Nefiedov A.N. et al. Overlap of the line profiles in the spectra of the heliumlike uranium // Physica Scripta. 1992. sep. Vol. 46, no. 3. P. 225–229. URL: https://doi.org/ 10.1088/0031-8949/46/3/004.
- [134] Niering M., Holzwarth R., Reichert J. et al. Measurement of the Hydrogen 1S-2S Transition Frequency by Phase Coherent Comparison with a Microwave Cesium Fountain Clock // Phys. Rev. Lett. - 2000. - Jun. --Vol. 84. - P. 5496-5499. - URL: https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevLett.84.5496.
- [135] Labzowsky L., Karasiev V., Lindgren I. et al. Higher-order QED corrections for multi-charged ions // Physica Scripta. — 1993. jan. — Vol. T46. — P. 150–156. — URL: https://doi.org/10.1088/ 0031-8949/1993/t46/022.
- [136] Labzowsky L., Solovyev D. Multiple resonant photon scattering on the hydrogen atom and the shift of the photon intensity distribution // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. - 2004. --Vol. 37, no. 16. - P. 3271-3281.
- [137] Eikema K.S.E., Walz J., Hänsch Th.W. Continuous Coherent Lyman-α Excitation of Atomic Hydrogen // Phys. Rev. Lett. - 2001. - Jun. -Vol. 86. - P. 5679-5682. - URL: https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevLett.86.5679.
- [138] Cui Z.-F., Binosi D., Roberts C.D., Schmidt S.M. Fresh Extraction of the Proton Charge Radius from Electron Scattering // Phys. Rev. Lett. – 2021. – Aug. – Vol. 127. – P. 092001. – URL: https://link.aps.org/ doi/10.1103/PhysRevLett.127.092001.

- [139] Bezginov N., Valdez T., Horbatsch M. et al. A measurement of the atomic hydrogen Lamb shift and the proton charge radius // Science. - 2019. -09. - Vol. 365. - P. 1007-1012.
- [140] Salour M.M. Quantum interference effects in two-photon spectroscopy // Rev. Mod. Phys. - 1978. - Jul. - Vol. 50. - P. 667-681. - URL: https: //link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.50.667.
- [141] Matveev A., Kolachevsky N., Adhikari C.M., Jentschura U.D. Pressure shifts in high-precision hydrogen spectroscopy: II. Impact approximation and Monte-Carlo simulations // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 2019. mar. Vol. 52, no. 7. P. 075006. URL: https://doi.org/10.1088/1361-6455/ab08e1-1.
- [142] Jentschura U.D., Adhikari Ch.M. Long-Range Interactions for Hydrogen:
 6P-1S and 6P-2S Systems // Atoms. 2017. Vol. 5, no. 4. URL:
 https://www.mdpi.com/2218-2004/5/4/48.
- [143] Brandt A.D., Cooper S.F., Rasor C. et al. Measurement of the $2S_{1/2} 8D_{5/2}$ Transition in Hydrogen // Phys. Rev. Lett. 2022. Jan. Vol. 128. P. 023001. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/ PhysRevLett.128.023001.
- [144] Fleurbaey H., Galtier S., Thomas S. et al. New Measurement of the 1S - 3S Transition Frequency of Hydrogen: Contribution to the Proton Charge Radius Puzzle // Phys. Rev. Lett. - 2018. - May. -Vol. 120. - P. 183001. - URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/ PhysRevLett.120.183001.
- [145] Yost D.C., Matveev A., Peters E. et al. Quantum interference in twophoton frequency-comb spectroscopy // Phys. Rev. A. - 2014. - Jul. -Vol. 90. - P. 012512. - URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/ PhysRevA.90.012512.
- [146] Fleurbaey H., Biraben F., Julien L. et al. Cross-damping effects in 1S-3S spectroscopy of hydrogen and deuterium // Phys. Rev. A. 2017. -

May. — Vol. 95. — P. 052503. — URL: https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevA.95.052503.

- [147] Marsman A., Horbatsch M., Hessels E.A. Quantum interference effects in saturated absorption spectroscopy of n = 2 triplet-helium fine structure // Phys. Rev. A. - 2015. - Jun. - Vol. 91. - P. 062506. -URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.91.062506.
- [148] Amaro P., Loureiro U., Safari L. et al. Quantum interference in laser spectroscopy of highly charged lithiumlike ions // Phys. Rev. A. – 2018. – Feb. – Vol. 97. – P. 022510. – URL: https://link.aps.org/ doi/10.1103/PhysRevA.97.022510.
- [149] Patkóš V., Yerokhin V.A., Pachucki K. Nonradiative α⁷m QED effects in the Lamb shift of helium triplet states // Phys. Rev. A. - 2020. - Jun. -Vol. 101. - P. 062516. - URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/ PhysRevA.101.062516.
- [150] Braskén M., Kyrölä E. Resonance scattering of Lyman alpha from interstellar hydrogen // Astronomy and Astrophysics. - 1998. - Vol. 332. - P. 732-738. - URL: https://api.semanticscholar.org/ CorpusID:14622417.
- [151] Magnan C., Pecker J.C. Asymmetry in solar spectral lines. // Highlights of Astronomy. - 1974. - jan. - Vol. 3. - P. 171-203.
- [152] Jackson J.M., Whitaker J.S., Rathborne J.M. et al. Asymmetric Line Profiles in Dense Molecular Clumps Observed in MALT90: Evidence for Global Collapse // The Astrophysical Journal. - 2018. - dec. - Vol. 870, no. 1. - P. 5. - URL: https://doi.org/10.3847/1538-4357/aaef84.
- [153] Lee H.-W. Asymmetric absorption profiles of Lyα and Lyβ in damped Lyα systems // The Astrophysical Journal. 2013. jul. Vol. 772, no. 2. P. 123. URL: https://doi.org/10.1088/0004-637x/772/2/123.

- [154] Bach K. Radiation-damped profiles of extremely high column density neutral hydrogen: implications of cosmic reionization // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. - 2016. - 09. - Vol. 464, no. 1. - P. 1137-1145. - https://academic.oup.com/mnras/articlepdf/464/1/1137/18512453/stw2208.pdf.
- [155] Lee C.C., Webb J.K., Carswell R.F. Quantum mechanics at high redshift - modelling damped Lyman-α absorption systems // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. - 2019. - 11. - Vol. 491, no. 4. - P. 5555-5571. - https://academic.oup.com/mnras/articlepdf/491/4/5555/31613939/stz3170.pdf.
- [156] Wang F., Yang J., Fan X. et al. A Luminous Quasar at Redshift 7.642 // The Astrophysical Journal Letters. - 2021. - jan. - Vol. 907, no. 1. -P. L1. - URL: https://doi.org/10.3847/2041-8213/abd8c6.
- [157] Heisenberg W. Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen. // Zeitschrift für Physik. – 1925. – Vol. 33, no. 1. – P. 879–893.
- [158] Goldman S.P., Drake G.W.F. Relativistic two-photon decay rates of 2s₁/₂ hydrogenic ions // Phys. Rev. A. 1981. Jul. Vol. 24. P. 183-191. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.24.183.
- [159] Furry W. On Bound States and Scattering in Positron Theory // Phys. Rev. - 1951. - Jan. - Vol. 81. - P. 115-124. - URL: https://link. aps.org/doi/10.1103/PhysRev.81.115.
- [160] Anikin A., Zalialiutdinov T., Solovyev D. Natural line profile asymmetry // Physica Scripta. - 2023. - mar. - Vol. 98, no. 4. -P. 045407. - URL: https://dx.doi.org/10.1088/1402-4896/acc28d.
- [161] Łach G., DeKieviet M., Jentschura U.D. Enhancement of Blackbody Friction due to the Finite Lifetime of Atomic Levels // Phys. Rev. Lett. – 2012. – Vol. 108. – P. 043005.

- [162] Gunn J.E., Peterson B.A. On the Density of Neutral Hydrogen in Intergalactic Space // Astrophysical Journal. — 1965. — nov. — Vol. 142. — P. 1633–1636.
- [163] Bach K., Lee H.-W. The Kramers-Heisenberg Formula and the Gunn-Peterson Trough from the First Objects in the Universe // Journal of The Korean Astronomical Society. — 2014. — Vol. 47, no. 47. — P. 187– 193.
- [164] Chluba J., Sunyaev R.A. Two-photon transitions in hydrogen and cosmological recombination // A&A. - 2008. - Vol. 480, no. 3. - P. 629-645. - URL: https://doi.org/10.1051/0004-6361:20077921.
- [165] Chluba J., Sunyaev R.A. Lyα escape during cosmological hydrogen recombination: the 3d-1s and 3s-1s two-photon processes // A&A. – 2010. – Vol. 512. – P. A53. – URL: https://doi.org/10.1051/ 0004-6361/200912263.
- [166] Zel'dovich Y.B., Raizer Y.P. Physics of Shock Waves and High-Temperature Hydrodynamic Phenomena. Dover Books on Physics. – Dover Publications, 2012. – ISBN: 9780486135083.
- [167] Santos M.R. Probing reionization with Lyman α emission lines // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. – 2004. – 04. – Vol. 349, no. 3. – P. 1137–1152. – https://academic.oup.com/mnras/articlepdf/349/3/1137/18649003/349-3-1137.pdf.
- [168] Hirata Ch.M., Forbes J. Lyman-α transfer in primordial hydrogen recombination // Phys. Rev. D. - 2009. - Jul. - Vol. 80. - P. 023001. -URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.80.023001.
- [169] Peebles P.J.E. Principles of Physical Cosmology. Princeton University Press, 1993.
- [170] Lee H.-W., Lee K.W. On the profiles and the polarization of Raman-scattered emission lines in symbiotic stars // Monthly Notices

of the Royal Astronomical Society. -1997. -05. - Vol. 287, no. 1. - P. 211-220. - https://academic.oup.com/mnras/article-pdf/287/1/211/3166581/287-1-211.pdf.

- [171] Веселов М.Г., Лабзовский Л.Н. Теория атома: строение электронных оболочек. Москва: Наука, ФИЗМАТЛИТ, 1986.
- [172] Labzowsky L.N., Solovyev D.A. Coulomb Green Function and Its Applications in Atomic Theory // Precision Physics of Simple Atomic Systems / Ed. by S.G. Karshenboim, V.B. Smirnov. — Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2003. — P. 15–34. — ISBN: 978-3-540-45059-7. — URL: https://doi.org/10.1007/978-3-540-45059-7_2.
- [173] Wichmann E.H., Kroll N.M. Vacuum Polarization in a Strong Coulomb Field // Phys. Rev. - 1956. - Jan. - Vol. 101. - P. 843-859. - URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.101.843.
- [174] Martin P.C., Glauber R.J. Relativistic Theory of Radiative Orbital Electron Capture // Phys. Rev. - 1958. - Feb. - Vol. 109. - P. 1307-1325. - URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.109. 1307.
- [175] Gorshkov V.G. On the Coulomb Green's function // JETP. 1965. -January. - Vol. 20. - P. 234. - URL: http://jetp.ras.ru/cgi-bin/ r/index/e/20/1/p234?a=list.
- [176] Gorshkov V.G. Relativistic Coulomb Functions // JETP. 1965. -May. - Vol. 20. - P. 1331. - URL: http://jetp.ras.ru/cgi-bin/r/ index/e/20/5/p1331?a=list.
- [177] Marmo S.I. Mnogofotonnye perekhody v kulonovskom kontinuume // Diss. doc. fiz.-mat. nauk [Multiphoton transitions in Coulomb continuum. D.Sc. (Physics and Mathematics)], Voronezh, 2006. – 2006. – URL: https://www.dissercat.com/content/ mnogofotonnye-perekhody-v-kulonovskom-kontinuume.

- [178] Gradshteyn I.S., Ryzhik I.M., Jeffrey A. Table of integrals, series, and products. — 5th ed edition. — San Diego : Academic Press, 1994.
- [179] Varshalovich D.A., Moskalev A.N., Khersonskii V.K. Quantum Theory of Angular Momentum. — Singapore : World Scientific, 1988.
- [180] Baird P.E.G., Brambley R.J., Burnett K. et al. Optical isotope shifts and hyperfine structure in λ 553.5 nm of barium // Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences. — 1979. — Vol. 365, no. 1723. — P. 567–582. https://royalsocietypublishing.org/doi/pdf/10.1098/rspa.1979.0035.
- [181] Korobov V.I., Hilico L., Karr J.-Ph. mα⁷-Order Corrections in the Hydrogen Molecular Ions and Antiprotonic Helium // Phys. Rev. Lett. – 2014. – Mar. – Vol. 112. – P. 103003. – URL: https://link.aps.org/ doi/10.1103/PhysRevLett.112.103003.
- [182] Huber A., Gross B., Weitz M., Hänsch Th.W. High-resolution spectroscopy of the 1S - 2S transition in atomic hydrogen // Phys. Rev. A. - 1999. - Mar. - Vol. 59. - P. 1844-1851. - URL: https: //link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.59.1844.
- [183] Tiesinga E., Mohr P.J., Newell D.B., Taylor B.N. CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2018 // Rev. Mod. Phys. – 2021. – Vol. 93. – P. 025010. – URL: https://link.aps.org/doi/10. 1103/RevModPhys.93.025010.
- [184] Fradkin E. S., Gitman D. M., Shvartsman Sh. M. Quantum electrodynamics with unstable vacuum. — Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1991.
- [185] Parthey C.G., Matveev A., Alnis J. et al. Precision Measurement of the Hydrogen-Deuterium 1S-2S Isotope Shift // Phys. Rev. Lett. - 2010. -Jun. - Vol. 104. - P. 233001. - URL: https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevLett.104.233001.
- [186] Kolachevsky N., Fendel P., Karshenboim S.G., Hänsch Th.W. 2S hyperfine structure of atomic deuterium // Phys. Rev. A. - 2004. -Dec. - Vol. 70. - P. 062503. - URL: https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevA.70.062503.
- [187] Horbatsch M., Hessels E.A. Tabulation of the bound-state energies of atomic hydrogen // Phys. Rev. A. - 2016. - Vol. 93. - P. 022513.
- [188] Schippers S. Analytical expression for the convolution of a Fano line profile with a gaussian // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. - 2018. - Vol. 219. - P. 33-36. -URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/ S0022407318304849.
- [189] Solovyev D., Zalialiutdinov T., Anikin A., Labzowsky L. Theoretical prerequisites for the upcoming generation of precision spectroscopic experiments // submitted. 2023. arXiv: 2311.12606 [physics.atom-ph], 21 Nov 2023. URL: https://doi.org/10.48550/arXiv.2311. 12606.
- [190] Solovyev D., Anikin A., Zalialiutdinov T., Labzowsky L. Impact of quantum interference in cascade radiation on the absorption profile // Phys. Rev. A. 2024. Feb. Vol. 109. P. 022806. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.109.022806.
- [191] Martynenko A.P. 2S Hyperfine splitting of muonic hydrogen // Phys. Rev. A. - 2005. - Feb. - Vol. 71. - P. 022506. - URL: https://link. aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.71.022506.
- [192] Martynenko A.P. Hyperfine structure of the S levels of the muonic helium ion // Journal of Experimental and Theoretical Physics. - 2008. - Apr. -Vol. 106, no. 4. - P. 690-699. - URL: https://doi.org/10.1134/ S1063776108040079.
- [193] Borie E. Lamb shift in muonic hydrogen // Phys. Rev. A. -2005. -

Mar. - Vol. 71. - P. 032508. - URL: https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevA.71.032508.

- [194] Milotti E. Energy levels and radiative transitions in muonic hydrogen // Atomic Data and Nuclear Data Tables. - 1998. - Vol. 70, no. 2. - P. 137
 - 177. - URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/ pii/S0092640X98907902.
- [195] Borie E. Lamb shift in light muonic atoms Revisited // Annals of Physics. - 2012. - Vol. 327, no. 3. - P. 733-763. - URL: https://www. sciencedirect.com/science/article/pii/S0003491611001904.
- [196] Cancio Pastor P., Consolino L., Giusfredi G. et al. Frequency Metrology of Helium around 1083 nm and Determination of the Nuclear Charge Radius // Phys. Rev. Lett. - 2012. - Apr. - Vol. 108. - P. 143001. - URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/ PhysRevLett.108.143001.
- [197] Zheng X., Sun Y.R., Chen J.-J. et al. Measurement of the Frequency of the 2 ³S - 2 ³P Transition of ⁴He // Phys. Rev. Lett. - 2017. - Dec. -Vol. 119. - P. 263002. - URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/ PhysRevLett.119.263002.
- Yu.R., Hu Sh.-M. Precision 198 Sun spectroscopy of atomic National Science Review. – 2020. - 08. -Vol. 7, helium no. 12. – Р. 1818–1827. https://academic.oup.com/nsr/articlepdf/7/12/1818/38880256/nwaa216.pdf.
- [199] Morton D.C., Wu Q., Drake G.W.F. Energy levels for the stable isotopes of atomic helium (4He I and 3He I) // Canadian Journal of Physics. – 2006. – Vol. 84, no. 2. – P. 83–105. – https://doi.org/10.1139/p06-009.
- [200] Sulai I.A., Wu Q., Bishof M. et al. Hyperfine Suppression of $2 {}^{3}S_{1} 3 {}^{3}P_{J}$ Transitions in ${}^{3}\text{He}$ // Phys. Rev. Lett. 2008. Oct. Vol. 101. P. 173001. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/ PhysRevLett.101.173001.

- [201] Weitz M., Huber A., Schmidt-Kaler F. et al. Precision measurement of the 1S ground-state Lamb shift in atomic hydrogen and deuterium by frequency comparison // Phys. Rev. A. - 1995. - Vol. 52. - P. 2664-2681.
- [202] Weitz M., Schmidt-Kaler F., Hänsch Th.W. Precise optical Lamb shift measurements in atomic hydrogen // Phys. Rev. Lett. - 1992. - Feb. --Vol. 68. - P. 1120-1123. - URL: https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevLett.68.1120.
- [203] Nez F., Plimmer M. D., Bourzeix S. et al. Precise frequency measurement of the 2S-8S/8D transitons in atomic hydrogen: New determination of the Rydberg constant // Phys. Rev. Lett. 1992. Oct. Vol. 69. P. 2326-2329. URL: https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevLett.69.2326.
- [204] Schwob C., Jozefowski L., de Beauvoir B. et al. Optical Frequency Measurement of the 2S-12D Transitions in Hydrogen and Deuterium: Rydberg Constant and Lamb Shift Determinations // Phys. Rev. Lett. – 1999. – Vol. 82, no. 25. – P. 4960–4963.
- [205] de Beauvoir B., Schwob C., Acef O. et al. Metrology of the hydrogen and deuterium atoms: Determination of the Rydberg constant and Lamb shifts // Eur. Phys. J. D. - 2000. - Vol. 12, no. 1. - P. 61-93.
- [206] de Beauvoir B., Nez F., Julien L. et al. Absolute Frequency Measurement of the 2S - 8S/D Transitions in Hydrogen and Deuterium: New Determination of the Rydberg Constant // Phys. Rev. Lett. - 1997. -Vol. 78. - P. 440-443.
- [207] Schwob C., Jozefowski L., Acef O. et al. Frequency measurement of the 2S-12D transitions in hydrogen and deuterium, new determination of the Rydberg constant // IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement. — 1999. — Vol. 48, no. 2. — P. 178–181.

- [208] Patkóš V., Yerokhin V.A., Pachucki K. Complete α⁷m Lamb shift of helium triplet states // Phys. Rev. A. - 2021. - Apr. - Vol. 103. -P. 042809. - URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA. 103.042809.
- [209] Schmoranzer H., Roth H., Volz U., Marger D. Radiative lifetimes of He I 3^3S_1 and 3^3D_J by beam-gas dye-laser spectroscopy // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 1991. feb. Vol. 24, no. 3. P. 595–604. URL: https://doi.org/10.1088/0953-4075/24/3/015.
- [210] Riehle F. Frequency Standards: Basics and Applications. Wiley Verlag, Weinheim, 2004.
- [211] Drake G.W.F. Atomic, Molecular and Optical Physics Handbook.— Springer, New York, NY, 1996.
- [212] Hlousek L., Lee S.A., Fairbank W.M. Precision Wavelength Measurements and New Experimental Lamb Shifts in Helium // Phys. Rev. Lett. - 1983. - Jan. - Vol. 50. - P. 328-331. - URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.50.328.
- [213] Theodosiou C.E. Lifetimes of singly excited states in He I // Phys. Rev. A. - 1984. - Dec. - Vol. 30. - P. 2910-2921. - URL: https://link. aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.30.2910.
- [214] Farley J.W., Wing W.H. Accurate calculation of dynamic Stark shifts and depopulation rates of Rydberg energy levels induced by blackbody radiation. Hydrogen, helium, and alkali-metal atoms // Phys. Rev. A. – 1981. – Vol. 23. – P. 2397.
- [215] Solovyev D., Labzowsky L., Plunien G. QED derivation of the Stark shift and line broadening induced by blackbody radiation // Phys. Rev. A. – 2015. – Vol. 92. – P. 022508.
- [216] Solovyev D. Thermal QED theory for bound states // Annals of Physics. - 2020. - Vol. 415. - P. 168128.

- [217] Collisional Effects on Molecular Spectra / Ed. by J.-M. Hartmann,
 C. Boulet, D. Robert. Second Edition edition. Elsevier, 2021. P. 1 557. ISBN: 978-0-12-822364-2.
- [218] Kolachevsky N., Haas M., Jentschura U.D. et al. Photoionization broadening of the 1S-2S transition in a beam of atomic hydrogen // Phys. Rev. A. -2006. - Nov. - Vol. 74. - P. 052504.
- [219] Dubessy J., Caumon M.-C., Rull F., Sharma Sh. Instrumentation in Raman spectroscopy: elementary theory and practice // Raman spectroscopy applied to Earth sciences and cultural heritage.— Mineralogical Society of Great Britain and Ireland, 2012.—01.
- [220] Yuan X., Mayanovic R.A. An Empirical Study on Raman Peak Fitting and Its Application to Raman Quantitative Research // Applied Spectroscopy. - 2017. - Vol. 71, no. 10. - P. 2325-2338. - PMID: 28665140.
- [221] Bakker R.J. The perfection of Raman spectroscopic gas densimeters // Journal of Raman Spectroscopy. - 2021. - Vol. 52, no. 11. - P. 1923-1948.
- [222] Nims, Ch. and Cron, Br. and Wetherington, M. and Macalady, J. and Cosmidis, J. Low frequency Raman Spectroscopy for micron-scale and in vivo characterization of elemental sulfur in microbial samples // Scientific Reports. - 2019. - Vol. 9, no. 1. - P. 7971.
- [223] Holzscheiter M.H., Bendiscioli G., Bertin A. et al. Antihydrogen production and precision experiments // Nuclear Physics B - Proceedings Supplements. - 1997. - Vol. 56, no. 1. - P. 336-348. - Proceedings of the Fourth Biennial Conference on Low Energy Antiproton Physics. URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/ pii/S092056329700296X.
- [224] Cesar, Cl.L. Trapping and spectroscopy of hydrogen // Hyperfine Interactions. - 1997. - Vol. 109, no. 1. - P. 293-304.

- [225] Meshkov, I.N. Antihydrogen generation and studies in storage rings // Hyperfine Interactions. — 1997. — Vol. 109, no. 1. — P. 225–232.
- [226] Regenfus, C. Antihydrogen production and precision experiments on trapped cold antihydrogen // Hyperfine Interactions. - 1999. - Vol. 119, no. 1. - P. 301-304.
- [227] Bluhm R., Kostelecký V.A., Russell N. CPT and Lorentz Tests in Hydrogen and Antihydrogen // Phys. Rev. Lett. - 1999. - Mar. --Vol. 82. - P. 2254-2257. URL: https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevLett.82.2254.
- [228] Hellwig H., Vessot R.F.C., Levine M.W. et al. Measurement of the Unperturbed Hydrogen Hyperfine Transition Frequency // IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement. — 1970. — Vol. 19, no. 4. — P. 200–209.
- [229] Zel'dovich Ya.B. Dipole Moment of Unstable Elementary Particles // JETP [ZhETF 39(5), 1483 (1961)]. - 1961. - Vol. 12, no. 1. -P. 1030. - URL: http://jetp.ras.ru/cgi-bin/e/index/e/12/5/ p1030?a=list.
- [230] Aleksandrov E.B., Khodovoy V.A. Note on Dehmelt's Experiment // Optics and Spectroscopy. - 1963. - jun. - Vol. 14. - P. 437.
- [231] Aleksandrov E.B., Kaliteevski N.I., Chaika M.P. Superhigh-resolution spectroscopy based on interference of states // Soviet Physics Uspekhi. — 1979. — sep. — Vol. 22, no. 9. — P. 760. — URL: https://dx.doi.org/ 10.1070/PU1979v022n09ABEH005611.
- [232] Andrae H.J. Stark-induced quantum beats in H Ly alpha emission // Physical Review A. - 1970. - Vol. 2. - P. 2200-2207. - URL: https: //api.semanticscholar.org/CorpusID:124112337.
- [233] Labzowsky L., Sharipov V. Quantum Beats in Hydrogen and Antihydrogen Atoms in an External Electric Field // Phys. Rev. Lett. —

2004. - Mar. - Vol. 92. - P. 133003. - URL: https://link.aps.org/ doi/10.1103/PhysRevLett.92.133003.

- [234] Labzowsky L., Sharipov V., Solovyev D., Plunien G. Coherent beam-foil excitation of 2s1/2 and 2p1/2 states of hydrogen and antihydrogen atoms in an external electric field // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 2006. — Vol. 39, no. 24. — P. 5091–5096.
- [235] Labzowsky L., Sharipov V. Antihydrogen atom in external electric and magnetic fields // Phys. Rev. A. - 2005. - Jan. - Vol. 71. - P. 012501. -URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.71.012501.
- [236] Kanekar N., Briggs F.H. 21-cm absorption studies with the Square Kilometer Array // New Astronomy Reviews. — 2004. — Vol. 48, no. 11. — P. 1259–1270. — Science with the Square Kilometre Array. URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/ pii/S1387647304001125.
- [237] Ishwara-Chandra, C.H. and Dwarakanath, K.S. and Anantharamaiah K.R. GMRT detection of HI 21 cm associated absorption towards thez = 1.2 red quasar 3C 190 // Journal of Astrophysics and Astronomy. – 2003. – Vol. 24, no. 1. – P. 37–43.
- [238] Roberts D.A., Dickel H.R., Goss W.M. High-Resolution Observations of H I Zeeman Absorption toward DR 21 // The Astrophysical Journal. – 1997. – feb. – Vol. 476, no. 1. – P. 209. – URL: https://dx.doi.org/ 10.1086/303602.
- [239] Sarma A.P., Momjian E., Troland T.H., Crutcher R.M. Very Large Array H I Zeeman Observations of NGC 1275 (Perseus A) // The Astronomical Journal. - 2005. - dec. - Vol. 130, no. 6. - P. 2566. - URL: https: //dx.doi.org/10.1086/497637.
- [240] Cooray A., Furlanetto S.R. Polarization signals of the 21-cm background from the era of reionization // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society: Letters. -2005.-05.- Vol. 359,

no. 1. – P. L47–L52. – https://academic.oup.com/mnrasl/articlepdf/359/1/L47/6404218/359-1-L47.pdf.

- [241] Weisberg J.M., Cordes J.M., Kuan B. et al. Arecibo 430 MHz Pulsar Polarimetry: Faraday Rotation Measures and Morphological Classifications // The Astrophysical Journal Supplement Series. – 2004. – jan. – Vol. 150, no. 1. – P. 317. – URL: https://dx.doi.org/ 10.1086/379802.
- [242] Никитин А.А., Рудзикас З.Б. Основы теории спектров атомов и ионов. — Москва: Наука, 1983.
- [243] Sucher J. Magnetic dipole transitions in atomic and particle physics: ions and psions // Reports on Progress in Physics. 1978. nov. Vol. 41, no. 11. P. 1781. URL: https://dx.doi.org/10.1088/0034-4885/41/11/002.
- [244] Лабзовский Л.Н. Теория атома. Квантовая электродинамика электронных оболочек и процессы излучения. Москва: Наука, ФИЗ-МАТЛИТ, 1996. — ISBN: 5-02-015016-9.
- [245] Зон Б.А., Манаков Н.Л., Раппопорт Л.И. Двухфотонные связаносвязанные переходы в кулоновском поле // ЖЭТФ. — 1969. — Март. — Vol. 55, по. 3. — Р. 924. — URL: http://www.jetp.ras.ru/ cgi-bin/r/index/r/55/3/p924?a=list.
- [246] Jentschura U.D. Self-energy correction to the two-photon decay width in hydrogenlike atoms // Phys. Rev. A. - 2004. - May. - Vol. 69. -P. 052118. - URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA. 69.052118.
- [247] Page L., Hinshaw G., Komatsu E. et al. Three-Year Wilkinson Microwave Anisotropy Probe (WMAP) Observations: Polarization Analysis // The Astrophysical Journal Supplement Series. — 2007. — Jun. — Vol. 170, no. 2. — P. 335. — URL: https://dx.doi.org/10.1086/513699.

- [248] Hinshaw G., Nolta M.R., Bennett C.L. et al. Three-Year Wilkinson Microwave Anisotropy Probe (WMAP) Observations: Temperature Analysis // The Astrophysical Journal Supplement Series. — 2007. — Jun. — Vol. 170, no. 2. — P. 288–334.
- [249] Labzowsky L.N., Shonin A.V. QED theory of cascades and two-photon transitions and calculation of the E1 M1 transition probability in two-electron highly charged ions // Phys. Rev. A. 2004. Jan. Vol. 69. P. 012503. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA. 69.012503.
- [250] Drake G.W.F. Energy level calculations and E1M1 two photon transition rates in two electron U90+ // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. - 1985. - Vol. 9, no. 4. - P. 465-470. - URL: https://www. sciencedirect.com/science/article/pii/0168583X85903489.
- [251] Savukov I.M., Johnson W.R. Two-photon E1M1 decay of 2³P₀ states in heavy heliumlike ions // Phys. Rev. A. - 2002. - Dec. - Vol. 66. -P. 062507. - URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA. 66.062507.
- [252] Hirata Ch.M. Two-photon transitions in primordial hydrogen recombination // Phys. Rev. D. - 2008. - Jul. - Vol. 78. - P. 023001. -URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.78.023001.
- [253] Jentschura U.D., Surzhykov A. Relativistic calculation of the two-photon decay rate of highly excited ionic states // Phys. Rev. A. 2008. Apr. Vol. 77. P. 042507. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/ PhysRevA.77.042507.
- [254] Jentschura U.D. Non-uniform convergence of two-photon decay rates for excited atomic states // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical. - 2007. - feb. - Vol. 40, no. 9. - P. F223. - URL: https: //dx.doi.org/10.1088/1751-8113/40/9/F02.

- [255] Jentschura U.D. Two-photon decays reexamined: cascade contributions and gauge invariance // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical. - 2008. - apr. - Vol. 41, no. 15. - P. 155307. - URL: https://dx.doi.org/10.1088/1751-8113/41/15/155307.
- [256] Jentschura U.D. Virtual resonant states in two-photon decay processes: Lower-order terms, subtractions, and physical interpretations // Phys. Rev. A. - 2009. - Feb. - Vol. 79. - P. 022510. - URL: https://link. aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.79.022510.
- [257] Sapirstein J., Pachucki K., Cheng K.T. Radiative corrections to onephoton decays of hydrogenic ions // Phys. Rev. A. - 2004. - Feb. -Vol. 69. - P. 022113. - URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/ PhysRevA.69.022113.
- [258] Amaro P., Santos J.P., Parente F. et al. Resonance effects on the twophoton emission from hydrogenic ions // Phys. Rev. A. - 2009. - Jun. -Vol. 79. - P. 062504. - URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/ PhysRevA.79.062504.
- [259] Labzovskii L.N. Electron Correlation in the Relativistic Theory of Atoms // JETP. - 1971. - Jan. - Vol. 32. - P. 94. - URL: http: //jetp.ras.ru/cgi-bin/e/index/r/59/1/p168?a=list.
- [260] Боголюбов Н.Н., Ширков Д.В. Введение в теорию квантованных полей. — Гос. Изд-Во Технико-Теоретической Литературы, 1957.
- [261] Gallagher Th.F. Rydberg Atoms. Cambridge Monographs on Atomic, Molecular and Chemical Physics. — Cambridge University Press, 1994.
- O., Bunge C.F. Transition Probabilities 262 Jitrik for Hydrogen-Like Atoms Journal of Physical and Chemical Data. — 2005. - 01. -Vol. 33, Reference no. 4. -Ρ. 1059 - 1070. https://pubs.aip.org/aip/jpr/articlepdf/33/4/1059/8183662/1059 1 online.pdf.

- [263] Wiese W.L., Fuhr J.R. Accurate Atomic Transition Probabilities Helium, and Lithium of Physical for Hydrogen, Journal Data. — 2009. - 06. and Chemical Reference Vol. 38. 3. -Ρ. 565-720. https://pubs.aip.org/aip/jpr/articleno. pdf/38/3/565/15667142/565 1 online.pdf.
- [264] Puchkov A.M., Labzovskii L.N. Probabilities of forbidden magnetic-dipole transitions in the hydrogen atom and hydrogen-like ions // Optics and Spectroscopy. - 2009. - Vol. 106, no. 2. - P. 153-157.
- [265] Alijah A., Broad J.T., Hinze J. Stark effect and field ionisation of atomic hydrogen // Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics. 1986. sep. Vol. 19, no. 17. P. 2617. URL: https://dx.doi.org/10.1088/0022-3700/19/17/011.
- [266] Feranchuk I.D., Hai L.X. Analytical estimation of the energies and widths of the Rydberg states of a hydrogen atom in an electric field // Physics Letters A. - 1989. - Vol. 137, no. 7. - P. 385-388. - URL: https:// www.sciencedirect.com/science/article/pii/0375960189909109.
- [267] Fernández-Menchero L., Summers H.P. Stark effect in neutral hydrogen by direct integration of the Hamiltonian in parabolic coordinates // Phys. Rev. A. - 2013. - Aug. - Vol. 88. - P. 022509. - URL: https://link. aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.88.022509.
- [268] Kolosov V.V. A hydrogen atom in a strong electric field // Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics. — 1987. — jun. — Vol. 20, no. 11. — P. 2359. — URL: https://dx.doi.org/10.1088/0022-3700/ 20/11/008.
- [269] Damburg R.J., Kolosov V.V. A hydrogen atom in a uniform electric field.
 III // Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics. 1979. aug. Vol. 12, no. 16. P. 2637. URL: https://dx.doi.org/10. 1088/0022-3700/12/16/011.

- [270] Drake G.W.F., Farago P.S., van Wijngaarden A. Test of the anisotropy method for Lamb-shift measurements—theory and experiment // Phys. Rev. A. 1975. May. Vol. 11. P. 1621-1628. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.11.1621.
- [271] Kuroda N., Ulmer S., Murtagh D.J. et al. A source of antihydrogen for in-flight hyperfine spectroscopy // Nature Communications. - 2014. --Vol. 5, no. 1. - P. 3089.
- [272] Ficek Z., Drummond P.D. Three-level atom in a broadband squeezed vacuum field. I. General theory // Phys. Rev. A. 1991. Jun. Vol. 43. P. 6247-6257. URL: https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevA.43.6247.
- [273] Ficek Z., Drummond P.D. Three-level atom in a broadband squeezed vacuum field. II. Applications // Phys. Rev. A. - 1991. - Jun. -Vol. 43. - P. 6258-6271. - URL: https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevA.43.6258.
- [274] Weiner J., Nunes F. Light-matter interaction: physics and engineering at the nanoscale. — Oxford University Press, 2017.
- [275] Kaplan S.A., Khaplanov G.M., Khronopulo Yu.G. On the nonlinear absorption coefficient of electromagnetic radiation under astrophysical conditions // Astrophysics. - 1971. - Vol. 7, no. 3. - P. 294-296.
- [276] Whitley R.M., Stroud C.R. Double optical resonance // Phys. Rev. A. 1976. – Oct. – Vol. 14. – P. 1498–1513. – URL: https://link.aps. org/doi/10.1103/PhysRevA.14.1498.
- [277] Grachev S.I., Dubrovich V.K. Hydrogen recombination in an expanding universe // Astrophysics. - 1991. - Vol. 34, no. 2. - P. 124-134.
- [278] Gupta N., Salter C.J., Saikia D.J. et al. Probing radio source environments via HI and OH absorption // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. - 2006. - dec. - Vol. 373, no. 3. - P. 972-992.

- [279] Darling J. Toward a direct measurement of the cosmic accelaration // The Astrophysical Journal Letters. - 2012. - dec. - Vol. 761, no. 2. P. L26. - URL: https://dx.doi.org/10.1088/2041-8205/761/2/ L26.
- [280] Wolfe A.M., Jorgenson R.A., Robishaw T. et al. Spectral polarization of the redshifted 21 cm absorption line toward 3C 286 // The Astrophysical Journal. - 2011. - apr. - Vol. 733, no. 1. - P. 24. - URL: https://dx. doi.org/10.1088/0004-637X/733/1/24.

Список публикаций автора диссертации, выносимых на защиту

- [35] Labzowsky L. N., Solovyev D. A., Plunien G., Soff G. Asymmetry of the Natural Line Profile for the Hydrogen Atom // Phys. Rev. Lett. 2001.
 Vol. 87, no. 14. P. 143003-1-143003-4.
- [36] Labzowsky L. N., Solovyev D. A., Plunien G., Soff G. Nonresonant corrections for the hydrogen atom // Canadian Journal of Physics. 2002.
 Vol. 80, no. 11. P. 1187–1194. 10.1139/p02-094.
- [37] Labzowsky L., Soloviev D., Plunien G., Soff G. Nonresonant corrections to the 1s-2s two-photon resonance for the hydrogen atom // Phys. Rev. A. 2002. Vol. 65, no. 5. P. 054502-1-054502-3.
- [38] Labzowsky L., Solovyev D., Sharipov V. et al. One- and two-photon resonant spectroscopy of hydrogen and anti-hydrogen atoms in external electric fields // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 2003. Vol. 36, no. 15. P. L227–L233.
- [126] Labzowsky Leonti, Solovyev Dmitri. Resonant spectroscopy of the antihydrogen atom // Phys. Rev. A. 2003. Vol. 68, no. 1. P. 014501-1– 014501-3.
 - [39] Labzowsky L., Sharipov V., Solovyev D. et al. Spectroscopy of the hydrogen and anti-hydrogen atoms in external fields // International

Journal of Modern Physics B. 2004. Vol. 18, no. 30. P. 3875–3886. 10.1142/S0217979204026809.

- [110] Labzowsky L. N., Shonin A. V., Solovyev D. A. QED calculation of E1M1 and E1E2 transition probabilities in one-electron ions with arbitrary nuclear charge // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 2005. Vol. 38, no. 3. P. 265–278.
- [111] L. Labzowsky, D. Solovyev, G. Plunien, G. Soff. Two-photon E1M1 and E1E2 transitions between 2p and 1s levels in hydrogen // The European Physical Journal D - Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics. 2006. Vol. 37, no. 3. P. 335–343.
 - [40] Labzowsky L. N., Schedrin G., Solovyev D., Plunien G. Nonresonant corrections and limits for the accuracy of the frequency measurements in modern hydrogen experiments // Canadian Journal of Physics. 2007. Vol. 85, no. 5. P. 585–595. 10.1139/p07-014.
 - [41] Labzowsky L., Schedrin G., Solovyev D., Plunien G. Theoretical study of the accuracy limits of optical resonance frequency measurements // Physical Review Letters. 2007. Vol. 98, no. 20. P. 2030032-1–2030032-4.
- [106] Solov'ev D. A., Sharipov V. F., Labzovskii L. N., Plunien G. Probabilities of single-photon 2s - 1s transition in hydrogen and antihydrogen atoms in an external electric field // Optics and Spectroscopy. 2008. Vol. 104, no. 4. P. 509-512.
 - [8] Andreev O. Yu., Labzowsky L. N., Plunien G., Solovyev D. A. QED theory of the spectral line profile and its applications to atoms and ions // Phys. Rep. 2008. Vol. 455, no. 4. P. 135–246.
 - [42] Labzowsky L., Schedrin G., Solovyev D. et al. Nonresonant corrections for the optical resonance frequency measurements in the hydrogen atom // Phys. Rev. A. 2009. Vol. 79, no. 5. P. 052506-1-052506-14.
 - [82] Labzowsky L., Solovyev D., Plunien G. Two-photon decay of excited levels in hydrogen: The ambiguity of the separation of cascades and pure two-

photon emission // Phys. Rev. A. 2009. Vol. 80, no. 6. P. 062514-1-062514-15.

- [112] Solovyev D. A., Labzowsky L. N., Sharipov V. F. Influence of an external electric field on the probabilities of two-photon transitions between 2s, 2p and 1s levels for hydrogen and antihydrogen atoms // Optics and Spectroscopy. 2009. Vol. 107, no. 1. P. 16–24.
- [113] Соловьёв, Д.А. и Лабзовский, Л.Н. и Шарипов, В.Ф. Одно-, двухи трехфотонные переходы между 2s-, 2p- и 1s-уровнями для атомов водорода и антиводорода во внешнем электрическом поле и без него // ВЕСТНИК САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО УНИВЕРСИТЕ-ТА. ФИЗИКА И ХИМИЯ 2009. по. 4. Р. 377-390.
- Solovyev D., Sharipov V., Labzowsky L., Plunien G. Influence of external electric fields on multi-photon transitions between the 2s, 2p and 1s levels for hydrogen and antihydrogen atoms and hydrogen-like ions // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 2010. Vol. 43, no. 7. P. 074005-1-074005-16.
- [83] Solovyev D., Dubrovich V., Volotka A. V. et al. Two-photon decays of highly excited states in hydrogen // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 2010. Vol. 43, no. 17. P. 175001-1–175001-8.
- Solovyev D., Labzowsky L. Two-photon approximation in the theory of electron recombination in hydrogen // Phys. Rev. A. 2010. Vol. 81, no. 6.
 P. 062509-1-062509-10.
- [116] Solovyev D., Labzowsky L. The two-photon approximation for the fourphoton decay of the 4d excited state in hydrogen // Canadian Journal of Physics. 2011. Vol. 89, no. 1. P. 123–127.
- [117] Solovyev D., Labzowsky L., Volotka A., Plunien G. Extension of the sum rule for the transition rates between multiplets to the multiphoton case // The European Physical Journal D. 2011. Vol. 61, no. 2. P. 297–304.

- [118] Zalyalyutdinov T. A., Solovyev D. A., Labzovskii L. N. 4s-1s two-photon decay in hydrogen atom with allowance for cascades // Optics and Spectroscopy. 2011. Vol. 110, no. 3. P. 328–334.
- [128] Solovyev D., Dubrovich V. K., Plunien G. Investigation of the electromagnetically induced transparency in the era of cosmological hydrogen recombination // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 2012. Vol. 45, no. 21. P. 215001-1-215001-7.
- [120] Zalialiutdinov T., Baukina Yu., Solovyev D., Labzowsky L. Theory of the multiphoton cascade transitions with two photon links: comparison of quantum electrodynamical and quantum mechanical approaches // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 2014. Vol. 47, no. 11. P. 115007-1-115007-11.
- [129] Solovyev D., Dubrovich V. EIT phenomenon for the three-level hydrogen atoms and its application to the era of cosmological recombination // Central European Journal of Physics. 2014. Vol. 12, no. 5. P. 367–374.
- [127] Solovyev D., Labzowsky L. The 21 cm absorption line profile as a tool for the search for antimatter in the universe // Progress of Theoretical and Experimental Physics. 2014. Vol. 2014, no. 11. P. 111E01-1-111E01-6.
- Zalialiutdinov T., Solovyev D., Labzowsky L., Plunien G. Two-photon transitions with cascades: Two-photon transition rates and two-photon level widths // Phys. Rev. A. 2014. Vol. 89, no. 5. P. 052502-1-052502-15.
- [122] Zalialiutdinov T., Solovyev D., Labzowsky L., Plunien G. Exclusion principle for photons: Spin-statistic selection rules for multiphoton transitions in atomic systems // Phys. Rev. A. 2015. Vol. 91, no. 3. P. 033417-1-033417-12.
- [119] Solovyev D., Solovyeva E. Rydberg-state mixing in the presence of an external electric field: Comparison of the hydrogen and antihydrogen spectra // Phys. Rev. A. 2015. Vol. 91, no. 4. P. 042506-1-042506-8.

- Zalialiutdinov T., Solovyev D., Labzowsky L. QED calculations of threephoton transition probabilities in H-like ions with arbitrary nuclear charge // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 2016. Vol. 49, no. 5. P. 055001-1-055001-8.
- [124] Zalialiutdinov T., Solovyev D., Labzowsky L., Plunien G. Spin-statistic selection rules for multiphoton transitions: Application to helium atoms // Phys. Rev. A. 2016. Vol. 93, no. 1. P. 012510-1-012510-7.
- [125] Zalialiutdinov T., Solovyev D., Labzowsky L. Generalized spin-statistic selection rules for atomic transitions with arbitrary number of equivalent photons // The European Physical Journal Special Topics. 2017. Vol. 226, no. 12. P. 2837–2842.
- Solovyev D. Analysis of the absorption line profile at 21 cm for the hydrogen atom in the interstellar medium // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 2018. Vol. 51, no. 22. P. 225004-1-225004-13.
 - [84] Zalialiutdinov T. A., Solovyev D. A., Labzowsky L. N., P. Gunter. QED theory of multiphoton transitions in atoms and ions // Physics Reports. 2018. Vol. 737. P. 1–84.
 - [52] Solovyev D., Anikin A., Zalialiutdinov T., Labzowsky L. Importance of nonresonant corrections for the description of atomic spectra // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 2020. Vol. 53, no. 12. P. 125002-1-125002-14.
 - [53] Anikin A., Zalialiutdinov T., Solovyev D. Angular correlations in twophoton spectroscopy of hydrogen // Phys. Rev. A. 2021. Vol. 103, no. 2. P. 022833-1-022833-11.
- [107] Anikin A. A., Zalialiutdinov T. A., Solovyev D. A. Nonresonant Effects in the Two-Photon Spectroscopy of a Hydrogen Atom: Application to the Calculation of the Charge Radius of the Proton // JETP Letters. 2021. Aug. Vol. 114, no. 4. P. 180–187.

- Zalialiutdinov T., Anikin A., Solovyev D. Analysis of nonresonant effects in the two-photon spectroscopy of helium // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 2021. sep. Vol. 54, no. 16. P. 165002-1– 165002-6.
- [109] Solovyev D., Solovyeva E. Adapted method of moments for determining the transition frequency // Physics Letters A. 2022. Vol. 432. P. 128021-1–128021-7.