### ПРИГЛАШЕННАЯ СТАТЬЯ

PACS 32.80.Pj, 32.10.Dk, 31.15.Ar, 31.25.Jf; 42.62.Eh

# Поляризационные и дисперсионные свойства световых сдвигов в высокостабильных оптических стандартах частоты

В.Д.Овсянников, В.Г.Пальчиков, Х.Катори, М.Такамото

Рассмотрены теоретические аспекты штарковской спектроскопии холодных щелочноземельных атомов в трехмерной оптической решетке, связанные с разработкой ультрастабильных оптических стандартов частоты нового поколения. Основное внимание уделено дисперсионным и поляризационным свойствам светового сдвига частоты в этих атомах, зависящим от мощности, частоты и поляризации лазерных источников возбуждения, формирующих оптическую решетку. Детально рассмотрен режим «выключенного светового сдвига», при котором происходит взаимная компенсация динамических штарковских поправок второго порядка на запрещенных часовых переходах  ${}^3P_0 - {}^1S_0$  и  ${}^3P_1 - {}^1S_0$ . Для атомов  ${}^4P_0$ ,  ${}^4P_$ 

**Ключевые слова**: оптическая решетка, запрещенные переходы, холодные атомы, световой сдвиг, оптические стандарты частоты.

### 1. Введение

Основными метрологическими параметрами, характеризующими первичные стандарты времени и частоты, являются точность определения частоты, ее воспроизводимость и стабильность. В настоящее время наивысшую точность имеют стандарты частоты нового поколения – атомные фонтаны, созданные в последнее десятилетие в ряде ведущих лабораторий мира: NIST (F1) [1], PTB (CSF1) [2], SYRTE (FO2, FOM) [3,4], IEN (CsF1) [5], NPL (CsF1) [6]. В сравнении с классическими первичными микроволновыми стандартами на атомах цезия (см., напр., [7-9]) точность независимого воспроизведения единиц времени и частоты в стандартах фонтанного типа как минимум на порядок выше и составляет  $\sim 10^{-16}$ , а долговременная стабильность равна  $\sim 10^{-15}$  за сутки [10].

В последние несколько лет наметился качественно новый этап в развитии оптических стандартов частоты, связанный с использованием фемтосекундных лазеров как для разработки оптических часов, так и для решения задач синтеза и высокоточных измерений абсолютных значений частот в оптическом диапазоне [11–14]. Спектр излучения фемтосекундного лазера представляет собой набор эквидистантных частотных компонент с шагом  $100~\mathrm{M}\Gamma\mathrm{u}-1~\mathrm{\Gamma}\Gamma\mathrm{u}$ , заполняющих всю ширину спектра

**В.Д.Овсянников.** Воронежский государственный университет, физический факультет, Россия, 394006 Воронеж, Университетская пл., 1; e-mail: ovd@phys.vsu.ru

В.Г.Пальчиков. ФГУП «Всероссийский научно-исследовательский институт физико-технических и радиотехнических измерений», Институт метрологии времени и пространства Россия, 141570 Менделеево, Московская обл.; e-mail: vitpal@mail.ru

**H.Katori, M.Takamoto.** University of Tokyo, Engineering Research Institute, Bunkyo-ku, Tokyo 113-8656, Japan; e-mail: katori@ato.t.u-tokyo.ac.jp

Поступила в редакцию 29 августа 2005 г.

(вплоть до сотен терагерц), причем эквидистантность межмодовых интервалов реализуется с погрешностью не хуже  $\sim 10^{-16}-10^{-17}$  и обусловливается самим процессом самосинхронизации мод [15–17]. Таким образом, для получения оптической линейки частот в широком диапазоне достаточно осуществить привязку любой из компонент комб-генератора к стандарту частоты, принятому в качестве эталона. Примеры использования фемтосекундных лазеров для абсолютных измерений оптических частот приведены в [17–21].

Альтернативой атомным фонтанам при высокоточных измерениях времени и частоты в настоящее время могут служить оптические стандарты на холодных нейтральных атомах или однократных ионах (см., напр., [22 – 27]). Не вдаваясь в подробный анализ как достоинств, так и недостатков, присущих стандартам частоты данного типа, отметим здесь их наиболее существенные отличительные свойства, обусловливающие стремительно растущий интерес к разработкам оптических реперов частоты, основанных на применении различных схем лазерного охлаждения и пленения атомов.

Во-первых, одним из важнейших достоинств оптических стандартов является более высокая частота используемых в них так называемых часовых переходов (сотни и тысячи терагерц), что, в свою очередь, делает возможным достижение более высокой (на несколько порядков) относительной стабильности частоты за счет увеличения добротности резонанса ( $10^{12}-10^{14}$  [28]). Так, в оптических стандартах частоты на ионах  $\mathrm{Hg}^+$  и атомах Ca, в которых в качестве реперов используются электрический квадрупольный переход

$${}^{2}S_{1/2}(F=0, M_{F}=0) - {}^{2}D_{5/2}(F=0, M_{F}=0) \ (\lambda = 282 \text{ HM})$$

и интеркомбинационный переход

$${}^{1}S_{0}(M=0) - {}^{3}P_{1}(M=0) \ (\lambda = 657 \text{ HM}),$$

относительная стабильность частоты оценивается как  $1 \times 10^{-15}$  и  $1.6 \times 10^{-16}$  за одну секунду соответственно, а в стандартах частоты на фермионом изотопе атома стронция ( $^{87}$ Sr) аналогичная оценка для перехода  $5s^2$   $^{1}$ S<sub>0</sub>(F=9/2) — 5s5p  $^{3}$ P<sub>0</sub>(F=9/2) ( $\lambda=698$  нм) дает  $\sim 1 \times 10^{-18}$  за одну секунду [25]. Из приведенных оценок следует, что эталон частоты в оптической области спектра имеет преимущества перед микроволновым эталоном частоты фонтанного типа, поскольку обладает существенно более высокой стабильностью за меньшее время измерений.

Во-вторых, атомные системы с несколькими валентными электронами во внешней оболочке, используемые в оптических стандартах в качестве рабочих сред, характеризуются весьма сложной структурой спектра и наличием в нем узких линий, соответствующих сильно запрещенным переходам в оптическом диапазоне. Например, в фермионных изотопах щелочноземельных атомов наряду с интеркомбинационным переходом  $^1{\rm S}_0-^3{\rm P}_1$  используется упоминавшийся переход  $5{\rm s}^2\,^1{\rm S}_0(F=9/2)-5{\rm s}5{\rm p}\,^3{\rm P}_0(F=9/2)$ , обусловленный эффектами сверхтонкой структуры и синглет-триплетным смешиванием атомных  $^3{\rm P}_1$ - и  $^1{\rm P}_1$ - уровней.

В цикле недавних работ Х.Катори с соавторами [24-25, 29-31] (Токийский университет, Япония) экспериментально реализована идея локализации холодных атомов Sr в периодических пространственных областях с размерами, меньшими длины волны света, которые создаются в стоячей волне лазерного излучения (оптические решетки). В первоначальном виде эта идея была предложена В.С.Летоховым [32] в связи с поисками путей уменьшения доплеровских ширин в спектре излучения атомов. В этом подходе атомы, плененные в пространственной области с размерами, много меньшими длины волны света, излучают спектр частот, в котором доплеровское уширение сильно подавлено, т. е. в спектре флуоресценции атомов наблюдается сужение линий из-за эффекта Лэмба-Дике [33]. Как следует из рис.1 [25], переходы  $5s^2$   $^1$ S<sub>0</sub>(F =9/2) —  $5s5p^3P_0(F=9/2)$  на длине волны  $\lambda = 698$  нм происходят между уровнями атомов, занимающих фиксированные колебательные состояния в потенциальной яме оптической решетки. Первичное лазерное охлаждение атомов Sr осуществляется с помощью излучения с  $\lambda=461$  нм на резонансном переходе  $^1{\rm S}_0-^1{\rm P}_1$ ; при этом часть атомов переходит на триплетные уровни  $5{\rm s}5{\rm p}\,^3{\rm P}_2$  и  $5{\rm s}5{\rm p}\,^3{\rm P}_1$  через промежуточный уровень  $5{\rm s}4{\rm d}\,^1{\rm D}_2$ . Вторичное, более глубокое лазерное охлаждение (до нескольких сотен нанокельвинов) проводится на интеркомбинационном переходе  $5{\rm s}^2\,^1{\rm S}_0(F=9/2)-5{\rm s}5{\rm p}\,^3{\rm P}_1(F=9/2)$  [34]. Оптическая решетка, изображенная на рис.1, формируется в стоячей волне линейно поляризованного лазерного излучения с  $\lambda_0 \approx 800$  нм [25, 31].

Из общих физических соображений ясно, что локализующий атом потенциал оптической решетки может оказывать заметное возмущающее воздействие как на внутренние, так и на внешние степени свободы атома (динамический штарковский сдвиг уровней энергии атома, модуляция его положения и скорости и т. д.). В оптических стандартах частоты данного типа именно внутренние степени свободы представляют наибольший фундаментальный и практический интерес, поскольку точное определение частоты часового перехода зависит прежде всего от степени воздействия факторов, возмущающих энергетические уровни атомов и смещающих частоту относительно ее номинального значения в идеальном случае.

В работах [24, 25, 29–31] предложен оригинальный метод, позволивший свести к минимуму влияние потенциала оптической решетки на измеряемую частоту переходов  $^{1}$ S $_{0}$  —  $^{3}$ P $_{J}$  (J = 0, 1) в атоме Sr. Теоретически [25] и экспериментально [31] было показано, что при определенном выборе параметров лазерного излучения (поляризации и частоты), создающего оптическую решетку, можно добиться полной взаимной компенсации квадратичных штарковских сдвигов для основных и возбужденных атомных уровней (режим «выключенного светового сдвига»). По существу, этот метод позволяет существенно снизить погрешность измерений, связанную с влиянием потенциала решетки на частоту оптических переходов

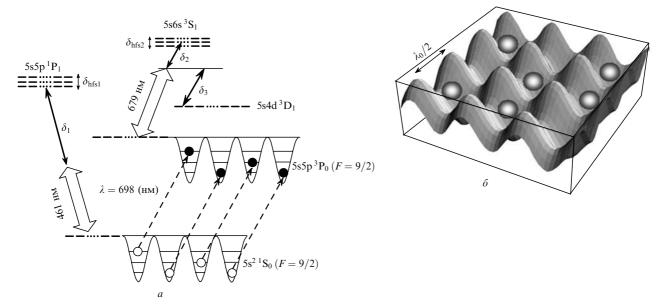


Рис.1. Схема оптических переходов в атоме Sr (a) и трехмерная оптическая решетка в линейно поляризованном лазерном поле  $(\delta)$  [25];  $\delta_{1-3}$  – отстройки частоты излучения лазера от центра перехода,  $\delta_{\mathrm{hfs1}}$  и  $\delta_{\mathrm{hfs2}}$  – компоненты сверхтонкой структуры состояний,  $\lambda_0/2$  – период оптической решетки.

в щелочноземельных атомах, что предопределяет актуальность применения данного подхода при разработках высокостабильных стандартов частоты в оптическом диапазоне спектра.

Основной целью настоящей работы является теоретическое исследование поляризационных и дисперсионных свойств световых сдвигов частоты на запрещенных переходах  ${}^{1}S_{0} - {}^{3}P_{J}$  (J = 0, 1) в щелочноземельных атомах, используемых в современных оптических стандартах частоты с применением оптических решеток. В работе использован общий подход квазистационарной теории возмущений к расчету динамических поляризуемостей и гиперполяризуемостей атомных уровней как функций параметров лазерного поля оптической решетки. Подробно обсуждаются результаты расчетов «магических» длин волн лазерного излучения, при которых реализуется режим «выключенного светового сдвига», минимизирующий влияние локализующего потенциала на сдвиг частоты часовых переходов  ${}^{1}\mathbf{S}_{0} - {}^{3}\mathbf{P}_{J} (J=0,1)$  в щелочноземельных атомах.

## 2. Радиационные вероятности запрещенных переходов в щелочноземельных атомах

Как отмечалось в разд.1, спектры щелочноземельных атомов характеризуются наличием интеркомбинационных и запрещенных линий, обладающих весьма малой естественной шириной, что является главной причиной использования их в качестве часовых переходов в современных высокостабильных оптических стандартах частоты на холодных атомах. На рис.2 представлена упрощенная схема низколежащих уровней щелочноземельного атома с обозначением возможных каналов радиационного распада.

Естественная ширина линии  $\Delta v$  атомного перехода из возбужденного состояния  $|{\bf k}\rangle$  в состояние  $|{\bf i}\rangle$  связана со скоростью спонтанной эмиссии (вероятностью перехода в единицу времени, или коэффициентом Эйнштейна)  $A_{{\bf k}{\bf i}}$  соотношением

$$\Delta v = \frac{A_{\rm ki}}{2\pi}.\tag{1}$$

Коэффициент  $A_{\rm ki}$  удобно выразить через силу линии S (табл.1). В табл.1  $g_{\rm k}=2J_{\rm k}+1$  – статистический вес для возбужденного уровня  $|{\bf k}\rangle$ . В атомной системе единиц сила линии записывается через квадрат приведенного матричного элемента оператора взаимодействия с полем излучения [35, 36]:

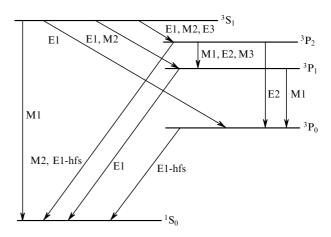


Рис.2. Схема оптических мультипольных переходов в щелочноземельных атомах.

Табл.1. Зависимости между  $A_{\rm ki}$  и силой линии S (в атомных единицах) для электрических и магнитных мультипольных переходов, сопровождаемых излучением с длиной волны  $\lambda$  (в ангстремах).

Тип перехода	$A_{ki}$ (c <sup>-1</sup> )
E1	$[2.026 \times 10^{18}/(g_{\rm k}\lambda^3)]S_{\rm E1}$
E2	$[1.120 \times 10^{18}/(g_{\rm k}\lambda^5)]S_{\rm E2}$
M1	$[2.697 \times 10^{13}/(g_{\rm k}\lambda^3)]S_{\rm M1}$
M2	$[1.491 \times 10^{13}/(g_{\rm k}\lambda^5)]S_{\rm M2}$

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_{\text{E1}} &= |\langle \mathbf{i} \| \boldsymbol{D} \| \mathbf{k} \rangle|^2, \quad \mathbf{S}_{\text{E2}} &= |\langle \mathbf{i} \| \boldsymbol{Q}_2 \| \mathbf{k} \rangle|^2, \\ \mathbf{S}_{\text{M1}} &= |\langle \mathbf{i} \| \boldsymbol{L} + 2 \boldsymbol{S} \| \mathbf{k} \rangle|^2, \\ \mathbf{S}_{\text{M2}} &= |\langle \mathbf{i} \| \{ (\boldsymbol{L} + 2 \boldsymbol{S}) \otimes \boldsymbol{D} \}_2 \| \mathbf{k} \rangle|^2, \end{aligned}$$
(2)

где D,  $Q_2$ , L и S – электрический дипольный, электрический квадрупольный, орбитальный и спиновый моменты атома;  $\{a \otimes b\}_2$  – неприводимое тензорное произведение второго ранга двух векторов. Общая теория и основы многоконфигурационного подхода к расчету сил линий и вероятностей мультипольных переходов в атомах с двумя валентными электронами изложены, например, в [35–37].

Результаты расчетов вероятностей однофотонных переходов с  $^3$ P<sub>2</sub>-уровня показывают, что для атомов Mg и Са доминирующим каналом распада является магнитно-квадрупольный (M2) переход в основное состояние (рис.2 и табл.2). Для атома Sr, однако, эта тенденция нарушается и более вероятным становится магнитно-дипольный

Табл.2. Расчетные и экспериментальные вероятности запрещенных переходов для изотопов щелочноземельных атомов с нулевым ядерным спином.

Переход	Тип пе- рехода	$A_{\mathrm{ki}}^{\mathrm{calc}}\left(\mathrm{c}^{-1}\right)$		$A_{\mathrm{ki}}^{\mathrm{exp}}\left(\mathrm{c}^{-1}\right)$			
		Mg	Ca	Sr	Mg	Ca	Sr
${}^{3}P_{1} - {}^{1}S_{0}$	E1	$2.6 \times 10^{2}$ [37] $2.8 \times 10^{2}$ [40]	$2.4 \times 10^3 [37]$ $2.7 \times 10^3 [40]$	$5.5 \times 10^4 [37]$ $5.3 \times 10^4 [40]$	$1.9(3) \times 10^{2}$ [41] $2.1(4) \times 10^{2}$ [42] $2.5(1.2) \times 10^{2}$ [43]	$2.98(8) \times 10^{3}$ [44] $2.9(2) \times 10^{3}$ [45] $2.9(3) \times 10^{3}$ [46]	$4.9(1) \times 10^4 [47]$ $4.7(1) \times 10^4 [45]$ $4.6(1) \times 10^4 [48]$
${}^{3}P_{2} - {}^{1}S_{0}$ ${}^{3}P_{2} - {}^{3}P_{1}$ ${}^{3}P_{2} - {}^{3}P_{1}$ ${}^{3}P_{2} - {}^{3}P_{0}$ ${}^{3}P_{0} - {}^{1}S_{0}$	M1 E2 E2	$9.12 \times 10^{-7} [38]$ $1.0 \times 10^{-12} [38]$ $3.0 \times 10^{-12} [38]$	$4.41 \times 10^{-4} [38]$ $1.60 \times 10^{-5} [38]$ $3.0 \times 10^{-10} [38]$ $1.0 \times 10^{-9} [38]$ $3.6 \times 10^{-13} [39]$				

(М1) переход  ${}^{3}P_{2} - {}^{3}P_{1}$  между подуровнями тонкой структуры атомного мультиплета (рис.2). Если воспользоваться нерелятивистским приближением при вычислениях вероятности данного радиационного перехода, то коэффициент Эйнштейна  $A_{\rm M1}$  (в атомных единицах) будет определяться простой аналитической формулой [38]

$$A_{\rm M1} = \frac{1}{6} \alpha^5 \omega_{\rm M1}^3, \tag{3}$$

в которой  $\alpha = 1/137.0360$  — постоянная тонкой структуры;  $\omega_{\rm M1}$  — частота атомного M1-перехода.

Интересно отметить, что при использовании в формуле (3) экспериментального значения  $\omega$  численная оценка  $A_{\rm M1}$  будет отличаться от данных аb initio вычислений работы [49] лишь на 3 %. Поправки более высокой мультипольности для этого перехода (связанные с учетом магнитно-октупольного канала распада (М3) и двухфотонной вероятности перехода) пренебрежимо малы, и их можно не учитывать в расчетах полной вероятности переходов с метастабильного уровня  $^3$ P2.

Вплоть до недавнего времени численные значения вероятности магнитно-квадрупольного (M2) перехода  ${}^{3}\mathrm{P}_{2}-{}^{1}S_{0}$  в литературе отсутствовали. Исключением яв-

Табл. 3. Вероятности радиационного распада метастабильных  $^3P_0$ - и  $^3P_2$ -уровней, индуцированные сверхтонким взаимодействием в фермионных изотопах щелочноземельных атомов и в атоме Yb.

Атом	Переход	F	$A_{\mathrm{ki}}$ (c <sup>-1</sup> )	Литература
<sup>25</sup> Mg	$^{3}P_{0} - {}^{1}S_{0}$	5/2	$4.44 \times 10^{-4}$	[52]
			$4.2\times10^{-4}$	[55]
	$^{3}P_{2}-^{1}S_{0}$	3/2	$2.25\times10^{-4}$	[52]
			$1.4\times10^{-4}$	[55]
	${}^{3}P_{2} - {}^{1}S_{0}$	5/2	$4.65\times10^{-4}$	[52]
			$2.9\times10^{-4}$	[55]
	$^{3}P_{2}-^{1}S_{0}$	7/2	$5.02\times10^{-4}$	[52]
			$3.1 \times 10^{-4}$	[55]
<sup>43</sup> Ca	${}^{3}P_{0} - {}^{1}S_{0}$	7/2	$2.22 \times 10^{-3}$	[52]
		5/2	$1.02\times10^{-3}$	[52]
	$^{3}P_{2} - {}^{1}S_{0}$	7/2	$1.81 \times 10^{-3}$	[52]
		9/2	$1.74\times10^{-3}$	[52]
		3/2	$2.25\times10^{-4}$	[52]
$^{87}$ Sr	$^{3}P_{0}-^{1}S_{0}$	9/2	$7.58 \times 10^{-3}$	[52]
			$6.3  imes 10^{-3}$	[29]
			$5.5\times10^{-3}$	[56]
	$^{3}P_{2}-^{1}S_{0}$	7/2	$4.01\times10^{-3}$	[52]
		9/2	$6.81\times10^{-3}$	[52]
		11/2	$6.38 \times 10^{-3}$	[52]
$^{171}\mathrm{Yb}$	${}^{3}P_{0} - {}^{1}S_{0}$	1/2	$4.35\times10^{-2}$	[52]
			$5.5\times10^{-2}$	[57]
		3/2	$9.18\times10^{-2}$	[52]
<sup>173</sup> Yb	$^{3}P_{0}-^{1}S_{0}$	5/2	$3.85\times10^{-2}$	[52]
			$4.3\times10^{-2}$	[57]
	$^{3}P_{2}-^{1}S_{0}$	3/2	$2.14\times10^{-2}$	[52]
		5/2	$5.32\times10^{-2}$	[52]
·		7/2	$7.22 \times 10^{-2}$	[52]

лялся атом Mg, для которого первые оценки вероятности  $A_{\rm M2}$  (1.6  $\times$  10<sup>-4</sup> c<sup>-1</sup>) были получены более 30 лет назад [50, 51]. Результаты современных теоретических расчетов как минимум в два раза превышают это значение, достаточно хорошо согласуясь друг с другом (4.44  $\times$  10<sup>-4</sup> c<sup>-1</sup> [38] и 3.983  $\times$  10<sup>-4</sup> c<sup>-1</sup> [49]). Вероятности электрического квадрупольного (E2) канала распада с  $^3$ P<sub>2</sub>-уровня на  $^3$ P<sub>0,1</sub>-уровни на несколько порядков меньше вероятностей переходов М1 и М2 (табл.2).

Однофотонный переход с <sup>3</sup>P<sub>0</sub>-уровня в основное состояние строго запрещен правилами отбора по угловому моменту атома, а двухфотонный или трехфотонный переходы с этого уровня сильно подавлены (табл.2). Однако для атомов с ненулевым ядерным спином (нечетные фермионные изотопы щелочноземельных атомов) возможен однофотонный переход (Е1) в основное состояние, обусловленный, с одной стороны, синглет-триплетным смешиванием атомных уровней с одинаковой четностью и одинаковыми полными моментами, а с другой – сверхтонким взаимодействием рассматриваемых уровней с триплетным  ${}^{3}P_{1}$ -уровнем [39, 52 – 54]. В результате, например, радиационное время жизни  ${}^{3}P_{0}$  и  ${}^{3}P_{2}$ -уровней может весьма существенно уменьшиться за счет индуцированного сверхтонким взаимодействием дополнительного (Е1) канала распада в основное состояние (табл.3).

Исходя из анализа численных данных, представленных в табл. 2 и 3, можно сделать вывод о том, что время жизни метастабильных уровней щелочноземельных атомов  $\tau=1/A_{\rm ki}$  составляет  $10^2-10^4$  с, а типичные значения естественных ширин запрещенных спектральных линий не превышают нескольких миллигерц. Именно эти уникальные радиационные характеристики запрещенных переходов стимулируют широкое применение щелочноземельных атомов в качестве рабочих сред в оптических стандартах частоты.

## 3. Штарковский сдвиг и расщепление атомных линий в монохроматическом поле

Для исследования взаимодействия атомной системы с полем монохроматической световой волны

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = E_0 \operatorname{Re} \{ \mathbf{e} \exp[\mathrm{i}(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)] \}$$
(4)

(где  $E_0$  и  $\omega$  – амплитуда и частота волны,  $\mathbf{k} = \omega \mathbf{n}/c$  – волновой вектор,  $\mathbf{e}$  и  $\mathbf{n}$  – единичные векторы поляризации и направления распространения волны) удобно использовать понятия квазиэнергии и квазиэнергетических состояний [58–60]. В этом подходе спектральные характеристики атома во внешнем поле определяются комплексными квазиэнергиями

$$\varepsilon = \operatorname{Re} \varepsilon - i\Gamma/2,\tag{5}$$

мнимые и действительные части которых соответствуют штарковскому радиационно-ионизационному уширению  $\Gamma$  и штарковскому смещению

$$\Delta \varepsilon = \operatorname{Re} \varepsilon - E_{\beta J}^{(0)} \tag{6}$$

невырожденных уровней с энергией  $E_{\beta J}^{(0)}$  полем световой волны (здесь J – полный момент,  $\beta$  – набор остальных квантовых чисел). Данный подход позволяет наиболее простым и рациональным способом решать довольно

широкий круг задач атомной и молекулярной спектроскопии, в частности задачи о распаде слабосвязанных состояний [60-62] и изменении атомного спектра в монохроматическом поле [60, 63-64], а также исследовать многофотонные процессы [60] и сходимость рядов теории возмущений в переменном поле для изолированных и вырожденных уровней [64, 65] и т. д.

Если амплитуда монохроматического поля (4) невелика в сравнении с амплитудой внутриатомного поля  $E_{\rm at}\approx 5\times 10^9$  В/см, то для количественных расчетов изменения энергии атома под действием световой волны достаточно использовать поправки низшего порядка теории возмущений.

В общем случае сдвиг квазиэнергии  $\Delta \varepsilon = \varepsilon - E_{\beta J}^{(0)}$  подуровней  $|\beta JM\rangle$  атомного мультиплета с проекциями M полного момента J во внешнем монохроматическом поле определяется из решений секулярного уравнения [66, 67]

$$\det \|\Delta \varepsilon \delta_{J'J} \delta_{M'M} - U_{J'M'JM}\| = 0. \tag{7}$$

Таким образом, действие электрического поля нарушает спин-орбитальную структуру атома, смешивая состояния с различными полными моментами J, а нарушение осевой симметрии под действием световой волны приводит к смешиванию состояний с различными магнитными квантовыми числами M. Поэтому задача о спектре квазиэнергий сводится к диагонализации матрицы в подпространстве близких по энергии состояний мультиплета с различными моментами и магнитными квантовыми числами:

$$U_{J'M'JM} = -\langle \langle \beta J'M' | V(\mathbf{r}, t) \mathcal{G} V(\mathbf{r}, t) | \beta JM \rangle \rangle \tag{8}$$

(двойные дираковские скобки означают интегрирование по координатам и усреднение по времени). Выражение для оператора взаимодействия с внешним полем имеет вил

$$V(\mathbf{r},t) = v(\mathbf{r})\exp(-\mathrm{i}\omega t) + v^{+}(\mathbf{r})\exp(\mathrm{i}\omega t), \tag{9}$$

где

$$v(\mathbf{r}) = V_D + V_{\mu} + V_Q + ...; \tag{10}$$

$$V_D = -\frac{1}{2}\mathbf{D}\mathbf{E} = \frac{E_0}{2}\mathbf{r}\mathbf{e},\tag{11}$$

$$V_{\mu} = -\frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}[\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{E}]) = \frac{\alpha E_0}{4}(\boldsymbol{J} + \boldsymbol{S})[\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{e}], \tag{12}$$

$$V_{Q} = -\frac{i}{6} \sum_{s_{1}, s_{2}} Q_{s_{1}, s_{2}} k_{s_{1}} E_{s_{2}} = \frac{iE_{0} \alpha \omega}{2\sqrt{6}} r^{2} \{ \mathbf{n} \otimes \mathbf{e} \}_{2} C_{2}(\theta, \varphi)$$
 (13)

— операторы электрического дипольного, магнитно-дипольного и электрического квадрупольного взаимодействий атома с полем соответственно [66]; в одноэлектронном приближении D=-r,  $\mu=-\alpha(J+S)/2$  и  $Q=-r^2C_2(\theta,\phi)$  — электрический дипольный, магнитно-дипольный и электрический квадрупольный моменты атома;  $C_2(\theta,\phi)$  — модифицированная сферическая функция угловых переменных радиуса-вектора валентного электрона r. В выражении (8)

$$\mathscr{G}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}'t') = \sum_{m,\kappa} \frac{\langle \langle \mathbf{r},t|m,\kappa \rangle \rangle \langle \langle m,\kappa|\mathbf{r}',t' \rangle \rangle}{\varepsilon_{m\kappa} - E_{\beta J}}$$
(14)

— редуцированная квазиэнергетическая функция Грина, представленная в виде разложения по квазиэнергетическим состояниям невозмущенного атома  $\langle \langle \pmb{r},t|m,\kappa\rangle\rangle = \langle \pmb{r}|m\rangle \exp{(i\kappa\omega t)}$  с квазиэнергией  $\varepsilon_{m\kappa} = E_m + \kappa\omega$ . Временная зависимость функции Грина (14) может быть выделена в явном виде в фурье-разложении [66]

$$\mathscr{G}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}'t') = \sum_{\kappa} G^{E_{\beta J} - \kappa \omega}(\mathbf{r};\mathbf{r}') \exp[i\kappa\omega(t-t')], \qquad (15)$$

коэффициентами которого являются стационарные функции Грина

$$G^{(\varepsilon)}(\mathbf{r};\mathbf{r}') = \sum_{m} \frac{\langle \mathbf{r}|m\rangle\langle m|\mathbf{r}'\rangle}{E_{m} - \varepsilon},\tag{16}$$

где суммирование проводится по полному набору состояний, за исключением исходного состояния  $|m\rangle=|\beta JM\rangle$   $(M=0,\pm 1,...,\pm J).$ 

После усреднения по времени и интегрирования по угловым переменным матричный элемент (8) можно представить в виде разложения по неприводимым тензорным произведениям  $\{e \otimes e^*\}_{j\chi}$  вектора поляризации e и его комплексно-сопряженного вектора  $e^*$  рангов j=0, 1, 2 (разложение по компонентам поляризационного тензора [66, 67]):

$$U_{J'M'JM} = \frac{E_0^2}{2} w_{J'M'JM},\tag{17}$$

где

$$egin{align} w_{J'M'JM} &= -rac{1}{2}\langleeta J'M'|e^*r'\,G^{E_{eta J}+\omega}(r;r')er'\ &+ er\,G^{E_{eta J}-\omega}(r;r')e^*r'|eta JM\,
angle \end{aligned}$$

$$= -\frac{1}{2} \sum_{\gamma i=0,1,2} (-1)^{\chi} C_{JMj-\chi}^{J'M'} b_{J'J}^{(j)} \{ \boldsymbol{e} \otimes \boldsymbol{e}^* \}_{j\chi}.$$
 (18)

Множитель -1/2 перед суммой матричных элементов второго порядка здесь оставлен для того, чтобы в статическом пределе (при  $\omega=0$ ) значения матричного элемента  $w_{J'M'JM}$  совпадали с аналогичными величинами, введенными в работе [68] для стационарного эффекта Штарка на триплетных состояниях Не. Коэффициенты разложения (18) представлены в виде произведений коэффициентов Клебша – Гордана  $C_{JMJ-\chi}^{J'M'}$  и неприводимых атомных параметров

$$b_{J'J}^{(j)} = (-1)^{J'+J+j} \left(\frac{2j+1}{2J'+1}\right)^{1/2} \sum_{J_1} \left\{ \begin{array}{c} 1 & 1 & j \\ J' & J & J_1 \end{array} \right\}$$

$$\times \left[ R_{J_1}(\omega) + (-1)^j R_{J_1}(-\omega) \right], \tag{19}$$

где

$$\left\{ \begin{array}{cc}
1 & 1 & j \\
J' J J_1
\end{array} \right\}$$

- стандартное обозначение 6*j*-символа;

$$R_{J_1}(\omega) = \langle \beta J' \| \boldsymbol{D} G_{J_1}^{E_{\beta J} + \omega} \boldsymbol{D} \| \beta J \rangle$$
 (20)

— приведенный дипольный матричный элемент второго порядка с парциальной функцией Грина из подпространства состояний с фиксированным значением полного момента  $J_1$ . Дальнейшее интегрирование по угловым переменным позволяет выразить приведенный матричный элемент (20) через суперпозицию радиальных матричных элементов, которая зависит от конкретной спин-орбитальной структуры промежуточных состояний. В частном случае LS-схемы связи набор квантовых чисел  $\beta$  представляет собой совокупность главного (n), орбитального (L) и спинового (S) квантовых чисел:  $\beta = \{nLS\}$ . После вычисления приведенных матричных элементов дипольного момента в схеме LS-связи выражение (19) принимает вид

$$b_{J'J}^{(j)} = (2L+1)[(2J+1)(2j+1)]^{1/2} \sum_{L_1, J_1} (-1)^{J'+J_1+j} (2J_1+1)$$

$$\times (C_{L010}^{L_10})^2 \left\{ \begin{array}{cc} 1 & 1 & j \\ J' J J_1 \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{cc} L_1 & S & J_1 \\ J' & 1 & L \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{cc} 1 & J & J_1 \\ S & L_1 L \end{array} \right\} \sigma_{L_1 J_1}^{(j)}(\omega), \quad (21)$$

где

$$\sigma_{L_{1}J_{1}}^{(j)}(\omega) = \langle nLSJ' | r \left[ g_{L_{1}J_{1}}^{E_{nLSJ}^{(0)} + \omega}(r, r') + (-1)^{j} g_{L_{1}J_{1}}^{E_{nLSJ}^{(0)} - \omega}(r, r') \right] r' | nLSJ \rangle \quad (j = 0, 1, 2)$$
(22)

—сумма (для j=0,2) или разность (для j=1) радиальных матричных элементов второго порядка с положительно-частотной ( $g^{E_{nLSJ}^{(0)}+\omega}(r,r')$ ) и отрицательно-частотной ( $g^{E_{nLSJ}^{(0)}-\omega}(r,r')$ ) радиальными функциями Грина в подпространстве состояний с фиксированными орбитальным и полным моментами  $L_1$  и  $J_1$  (спиновый момент S в электрических дипольных переходах остается неизменным).

Выражение (21) существенно упрощается, если радиальные матричные элементы (22) при фиксированном орбитальном моменте  $L_1$  не зависят от полного момента  $J_1$ , т.е. если влиянием спин-орбитального расщепления уровней на матричные элементы можно пренебречь, записав  $\sigma_{L_1J_1}^{(j)}(\omega) \equiv \sigma_{L_1}^{(j)}(\omega)$ . Тогда суммирование по  $J_1$  в (21) можно выполнить аналитически:

$$b_{J'J}^{(j)} = (-1)^{1+L+S+J} (2L+1)[(2J+1)(2j+1)]^{1/2}$$

$$\times \left\{ \frac{L}{J'} \frac{L}{J} \frac{j}{S} \right\} \sum_{L_1} \left( C_{L010}^{L_10} \right)^2 \left\{ \frac{1}{L} \frac{1}{L} \frac{j}{L} \right\} \sigma_{L_1}^{(j)}(\omega). \tag{23}$$

В этом приближении все матричные элементы (17) можно выразить через три независимые компоненты тензора динамической поляризуемости состояния  $|nLSJ\rangle$ .

Компоненты поляризационного тензора (18) зависят от типа поляризации поля излучения (4). Считая волну полностью поляризованной, рассмотрим наиболее общий случай эллиптической поляризации. В поле такой волны имеется два выделенных направления: направление распространения волны, определяемое единичным волновым вектором  $\mathbf{n} = (\lambda/2\pi)\mathbf{k}$  и направление главной оси эллипса поляризации, задаваемое перпендикулярным к  $\mathbf{n}$  вектором  $\mathbf{u}$ . Удобно ввести ортогональный ба-

зис единичных векторов  $e_z = n$ ,  $e_x = u$ ,  $e_y = n \times u$ , с помощью которых выражение для единичного вектора поляризации из (4) можно представить в виде

$$\boldsymbol{e} = \frac{\boldsymbol{e}_x + \mathrm{i}\gamma \boldsymbol{e}_y}{(1 + \gamma^2)^{1/2}},\tag{24}$$

где  $\gamma$  – параметр эллиптичности ( $-1\leqslant \gamma\leqslant 1$ ), определяющий степени линейной поляризации  $l=(1-\gamma^2)/(1+\gamma^2)$  ( $0\leqslant l\leqslant 1$ ) и круговой поляризации  $\xi=2\gamma/(1+\gamma^2)$  ( $-1\leqslant \xi\leqslant 1$ ), причем  $l^2+\xi^2=1$  в соответствии с условием стопроцентной поляризации излучения. Разлагая далее вектор (24) по циклическому базису векторов [69]  $e=(e)_ie^i$ , где  $i=0,\pm 1,\ e^0=e_z,\ e^{\pm 1}=\mp(e_x\mp ie_y)/\sqrt{2}$ , получаем следующие выражения для циклических компонент:

$$(\mathbf{e})_0 = 0, \quad (\mathbf{e})_{\pm 1} = -(\mathbf{e}^*)_{\mp 1} = \mp \frac{1 \mp \gamma}{[2(1 + \gamma^2)]^{1/2}}.$$
 (25)

В заданной таким образом системе координат параметр  $\chi$  поляризационного тензора в (18) может принимать значения 0 и  $\pm 2$ , т.е. из девяти компонент тензоров  $\{e\otimes e^*\}_{j\chi}$  ненулевыми могут быть только пять, выражения для которых можно записать в виде

$$\{e \otimes e^*\}_{j\chi} = -\xi^{\delta_{j1}} C_{1-111}^{j0} \delta_{\chi 0} + \frac{l}{2} \delta_{j2} (\delta_{\chi 2} + \delta_{\chi - 2})$$

$$= \left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\delta_{j0} + \frac{\xi}{\sqrt{2}}\delta_{j1} - \frac{1}{\sqrt{6}}\delta_{j2}\right)\delta_{\chi 0} + \frac{l}{2}\delta_{j2}(\delta_{\chi 2} + \delta_{\chi - 2}). \quad (26)$$

Следовательно, матрица (18) полностью определяется набором инвариантных атомных параметров (21):

$$w_{J'M'JM} = \delta_{M'M} \left( -\frac{b_{JJ}^{(0)}}{\sqrt{3}} \delta_{J'J} + \xi \frac{b_{J'J}^{(1)}}{\sqrt{2}} C_{JM10}^{J'M} - \frac{b_{J'J}^{(2)}}{\sqrt{6}} C_{JM20}^{J'M} \right)$$

$$+\frac{l}{2}b_{J'J}^{(2)}(C_{JM2-2}^{J'M'}+C_{JM22}^{J'M'}), (27)$$

каждый из которых в приближении (23) можно выразить через три независимые характеристики мультиплета — компоненты тензора поляризуемости [66, 67, 70 – 72]. Так, величину  $b_{JJ}^{(0)}$ , дающую вклад только в диагональный ( $J' = J, \ M' = M$ ) матричный элемент (27), можно представить в виде

$$b_{II}^{(0)} = -\sqrt{3}\alpha_{nII}^{s}(\omega), \tag{28}$$

где

$$\alpha_{nLJ}^{s}(\omega) = \frac{1}{3(2J+1)} \sum_{J_1 = J, J \pm 1} (-1)^{J_1 - J} [R_{J_1}(\omega) + R_{J_1}(-\omega)]$$
(29)

- скалярная поляризуемость, которая в приближении (23) одинакова для всех подуровней мультиплета, т. е. не зависит от полного момента J:

$$\alpha_{nLJ}^{s}(\omega) \approx \alpha_{nL}^{s}(\omega) = \frac{1}{3(2L+1)}$$

$$\times [L\sigma_{L-1}^{+}(\omega) + (L+1)\sigma_{L+1}^{+}(\omega)]$$
 (30)

(здесь и далее используем обозначения  $\sigma_{L_1}^{(0)}(\omega) = \sigma_{L_1}^{(2)}(\omega)$ 

 $\equiv \sigma_{L_1}^+(\omega), \, \sigma_{L_1}^{(1)}(\omega) \equiv \sigma_{L_1}^-(\omega)$ ). Величины  $b_{J'J}^{(1)}$ , дающие вклад в матричные элементы (27) с  $J'=J, J\pm 1, \, M'=M, \, {\rm c}$  помощью (23) тоже можно выразить через диагональную компоненту  $b_{JJ}^{(1)}$ :

$$b_{J'J}^{(1)} = b_{JJ}^{(1)} \left\{ \begin{array}{c} L & L & 1 \\ J' & J & S \end{array} \right\} / \left\{ \begin{array}{c} L & L & 1 \\ J & J & S \end{array} \right\}, \tag{31}$$

которая, в свою очередь, выражается через антисимметричную (векторную или аксиальную) поляризуемость:

$$b_{JJ}^{(1)} = \alpha_{nLSJ}^{a} \left(\frac{J+1}{2J}\right)^{1/2},$$
 (32)

$$\alpha_{nLSJ}^{a} = -\frac{1}{(2J+1)_2} \sum_{J_1=J,J\pm 1} (-1)^{J_1-J} X[R_{J_1}(\omega) - R_{J_1}(-\omega)],$$

где  $X = J(J+1) + 2 - J_1(J_1+1)$  и использовано общепринятое обозначение для символа Похгаммера [73]:  $(x)_n = x(x+1)...(x+n-1)$ . При этом зависимость от полного момента здесь может быть выделена в явном виле:

$$\alpha_{nLSJ}^{a} \approx (-1)^{J+L+S+1} \left[ \frac{(2L+1)_2(2J)_2}{4L(J+1)} \right]^{1/2} \left\{ \begin{array}{c} S \ L \ J \\ 1 \ J \ L \end{array} \right\} \alpha_{nL}^{a}$$

$$=\frac{Y}{2L(J+1)}\alpha_{nL}^{a},\tag{33}$$

где Y = J(J+1) + L(L+1) - S(S+1);

$$\alpha_{nL}^{a} = -\frac{L}{(2L+1)} [\sigma_{L-1}^{-}(\omega) - \sigma_{L+1}^{-}(\omega)]$$
 (34)

- одинаковая для всех подуровней характеристика, совпадающая с аксиальной поляризуемостью состояния с максимальным значением полного момента J=L+S.

Величины  $b_{J'J}^{(2)}$  дают вклад в матричные элементы (27) с  $J' = J, J \pm 1, J \pm 2$  и с  $M' = M, M \pm 2$ . Их можно выразить через симметричную (или тензорную) поляризуемость:

$$b_{J'J}^{(2)} = b_{JJ}^{(2)} \left\{ \begin{array}{c} L & L & 2 \\ J' & J & S \end{array} \right\} / \left\{ \begin{array}{c} L & L & 2 \\ J & J & S \end{array} \right\},$$

$$b_{JJ}^{(2)} = \alpha_{nLSJ}^{t} \left[ \frac{3(2J+2)_{2}}{2(2J-1)_{2}} \right]^{1/2}, \tag{35}$$

где

$$\alpha_{nLSJ}^{t} = \frac{1}{3(2J+1)_3} \sum_{J_1 = J, J \pm 1} (-1)^{J_1 - J}$$

$$\times [3X(X-1) - 8J(J+1)] [R_{J_1}(\omega) + R_{J_1}(-\omega)].$$
 (36)

По аналогии с (33) можно записать

$$\alpha_{nLSJ}^{t} \approx (-1)^{J+L+S} \left[ \frac{(2L+1)_3(2J-1)_3}{(2L-1)_2(2J+2)_2} \right]^{1/2} \left\{ \begin{array}{l} S \ L \ J \\ 2 \ J \ L \end{array} \right\} \alpha_{nL}^{t}$$

$$=2\frac{3Y(Y-1)-4L(L+1)J(J+1)}{(2L-1)_2(2J+2)_2}\alpha_{nL}^{t},$$
(37)

где

$$\alpha_{nL}^{t} = -\frac{L}{3(2L+1)} \left[ \sigma_{L-1}^{+}(\omega) + \frac{2L-1}{2L+3} \sigma_{L+1}^{+}(\omega) \right]$$
 (38)

— общая для всех подуровней мультиплета характеристика, совпадающая с тензорной поляризуемостью подуровня с полным моментом J=L+S.

Таким образом, общее выражение для матричного элемента (27) с использованием компонент поляризуемости (30), (34), (38) можно представить в виде

$$w_{J'M'JM} = -\frac{1}{2} \left\{ \alpha_{nL}^{s} \delta_{J'J} + \frac{\xi}{2} (-1)^{L+S+J+1} C_{JM10}^{J'M} \right.$$

$$\times \left[ \frac{(2L+1)_{2} (2J+1)}{2L} \right]^{1/2} \left\{ \begin{array}{l} S \ L \ J \\ 1 \ J' \ L \end{array} \right\} \alpha_{nL}^{a} \left. \right\} \delta_{M'M}$$

$$+ \frac{(-1)^{L+S+J}}{4} \left[ \frac{(2L+1)_{3} (2J+1)}{(2L-1)_{2}} \right]^{1/2} \left\{ \begin{array}{l} S \ L \ J \\ 2 \ J' \ L \end{array} \right\} \alpha_{nL}^{t}$$

$$\times \left[ \delta_{M'M} C_{JM20}^{J'M} - l \left( \frac{3}{2} \right)^{1/2} (C_{JM2-2}^{J'M'} + C_{JM22}^{J'M'}) \right]. \tag{39}$$

Если энергия взаимодействия атома с полем значительно меньше энергии спин-орбитального расщепления, то влиянием недиагональных по J матричных элементов можно пренебречь. В поле с круговой поляризацией ( $\xi=\pm 1,\ l=0$ ) матрица (39) становится диагональной и по M, т.е. проекция полного момента на направление распространения волны является интегралом движения. При этом диагональный матричный элемент

$$w_{JMJM} = -\frac{1}{2} \left[ \alpha_{nL}^{s} + \frac{M}{2J} \xi \alpha_{nLSJ}^{a} - \frac{3M^{2} - J(J+1)}{2J(2J-1)} \alpha_{nLSJ}^{t} \right]$$
(40)

полностью определяет сдвиг и расщепление (по проекциям момента) квазиэнергии изолированного  $|nLSJ\rangle$ -состояния. Если же  $l\neq 0$ , то магнитное квантовое число перестает быть интегралом движения, а недиагональный по M матричный элемент

$$w_{JM\pm2JM} = -\frac{3l\left[(J\pm M + 1)_2(J\mp M - 1)_2\right]^{1/2}}{4(2J-1)_2}\alpha_{nLSJ}^{t}$$
 (41)

определяет относительный вклад в состояние с проекцией M состояний с проекциями  $M'=M\pm 2$ . Значение квазиэнергии находится путем диагонализации матрицы с элементами (40), (41).

В качестве примера рассмотрим  $nP_1$ -состояние в поле эллиптической поляризации. Матричные элементы (40), (41) здесь принимают вид

$$w_{1\pm 1 \ 1\pm 1} = -\frac{1}{2} \left( \alpha_{nP}^{s} \pm \frac{1}{2} \xi \alpha_{nP_{1}}^{a} - \frac{1}{2} \alpha_{nP_{1}}^{t} \right),$$

$$w_{10\,10} = -\frac{1}{2} \left( \alpha_{n\mathbf{P}}^{\,\mathrm{s}} + \alpha_{n\mathbf{P}_1}^{\,\mathrm{t}} \right),$$

$$w_{1-1\,11}=w_{11\,1-1}=-\frac{3l}{4}\alpha_{nP_1}^{t}.$$

С использованием этих матричных элементов секулярное уравнение (7) дает следующие три решения:

$$\Delta \varepsilon_{\pm} = -\frac{E_0^2}{4} \left\{ \alpha_{nP}^{s} - \frac{\alpha_{nP_1}^{t}}{2} \pm \frac{3}{2} \alpha_{nP_1}^{t} \right. \\ \left. \times \left\{ 1 + \xi^2 \left[ \left( \frac{\alpha_{nP_1}^{a}}{\alpha_{nP_1}^{t}} \right)^2 - 1 \right] \right\}^{1/2} \right\},$$

$$\Delta \varepsilon_0 = -\frac{E_0^2}{4} (\alpha_{nP}^{s} + \alpha_{nP_1}^{t}).$$
(42)

Для линейно поляризованного излучения  $(l=1,\ \xi=0)$  зависимость этих решений от аксиальной поляризуемости  $\alpha_{n\mathrm{P}_1}^a$  исчезает, а  $\Delta\varepsilon_+=\Delta\varepsilon_0$ , что соответствует вырождению по знаку проекции момента на направление вектора поляризации  $e=e^*=e_x$ . В случае циркулярной поляризации  $(\xi=\pm 1,\ l=0)$  недиагональные матричные элементы (41) обращаются в нуль и тогда три значения сдвига квазиэнергии определяются тремя диагональными элементами  $w_{1M1M}(M=0,\pm 1)$ .

Таким образом, расчет квазиэнергии атома в поле в квадратичном по напряженности излучения приближении сводится к вычислению трех независимых величин – компонент тензора поляризуемости рассматриваемого мультиплета. В конечном счете эти величины определяются радиальными дипольными матричными элементами второго порядка, которые можно записать через спектральные суммы сил осцилляторов радиационных переходов, определяемых формулой [35]

$$f(\beta_1 J_1; \beta J) = \frac{1}{2J+1} \sum_{M_1, M} 2(E_{\beta_1 J_1} - E_{\beta J}) |\langle \beta_1 J_1 M_1 | \mathbf{D} | \beta J M \rangle|^2$$
$$= \frac{2(E_{\beta_1 J_1} - E_{\beta J})}{3(2J+1)} |\langle \beta_1 J_1 | \mathbf{D} | \beta J \rangle|^2.$$

Тогда

$$\alpha^{s}(\omega) = \sum_{\beta_{1}, J_{1}} \frac{f(\beta_{1}J_{1}; \beta J)}{\left[ \left( E_{\beta_{1}J_{1}}^{(0)} - E_{\beta J}^{(0)} \right)^{2} - \omega^{2} \right]}, \tag{43}$$

$$\alpha^{a}(\omega) = -\frac{3\omega}{2(J+1)} \sum_{\beta_{1},J_{1}} \frac{X}{(E_{B,J_{1}}^{(0)} - E_{BJ}^{(0)})}$$

$$\times \frac{f(\beta_1 J_1; \beta J)}{\left[ \left( E_{\beta_1 J_1}^{(0)} - E_{\beta J}^{(0)} \right)^2 - \omega^2 \right]},\tag{44}$$

$$\alpha^{\rm t}(\omega) = -\sum_{\beta_1,J_1} \frac{3X(X-1) - 8J(J+1)}{(2J+2)_2}$$

$$\times \frac{f(\beta_1 J_1; \beta J)}{\left[ \left( E_{\beta_1 J_1}^{(0)} - E_{\beta J}^{(0)} \right)^2 - \omega^2 \right]}.$$
 (45)

Следует отметить, что в постоянном поле тензорная поляризуемость определяет главную (резонансную) часть поправки четвертого порядка к энергии подуровней [66, 74, 75].

Если же расстояния между взаимодействующими подуровнями значительно превышают изменение квазиэнергии атома, а магнитное квантовое число остается интегралом движения, то для расчета полевых поправок достаточно использовать формулы теории возмущений для невырожденных состояний. В этом случае изменение

энергии  $\Delta E$  изолированного состояния атома  $|\beta JM\rangle$  под действием поля световой волны (4) в квадратичном по напряженности приближении также удобно анализировать с помощью динамической поляризуемости  $\alpha(e,\omega)$ , а в приближении четвертого порядка — с помощью динамической гиперполяризуемости  $\gamma(e,\omega)$ :

$$\Delta E = E - E^{(0)} = \Delta E^{(2)} + \Delta E^{(4)} + \dots, \tag{46}$$

$$\Delta E^{(2)} = -\frac{1}{4} \alpha_{\beta JM}(\mathbf{e}, \omega) E_0^2 = -\langle \langle \beta JM | VGV | \beta JM \rangle \rangle, \tag{47}$$

$$\Delta E^{(4)} = -\frac{1}{64} \gamma_{\beta JM}(\boldsymbol{e}, \omega) E_0^4$$

$$= -\langle \langle \beta JM | VGVGVGV | \beta JM \rangle \rangle + \langle \langle \beta JM | VGV | \beta JM \rangle \rangle$$

$$\times \langle \langle \beta J M | V G^2 V | \beta J M \rangle \rangle. \tag{48}$$

Динамические восприимчивости второго и четвертого порядков  $\alpha_{\beta JM}$  и  $\gamma_{\beta JM}$  в (47), (48) определяют также индуцированный внешним полем дипольный момент атома на частоте  $\omega$  с точностью до членов третьего порядка по внешнему полю [65]:

$$D_{j}(\omega, t) = \text{Re}[D_{j}^{(\omega)} \exp(-i\omega t) + D_{j}^{(3\omega)} \exp(-3i\omega t) + ...],$$

$$D_{j}^{(\omega)} = \alpha_{jk} e_{k} E_{0} + \frac{1}{16} \gamma_{jklm} e_{k}^{*} e_{l} e_{m} E_{0}^{3}.$$
(49)

В соответствии с определениями (47), (48) частота перехода в атоме, помещенном в переменное внешнее поле, описывается формулой [60]

$$\omega_{\rm fi} = \omega_{\rm fi}^{(0)} - \frac{E_0^2}{4} \Delta \alpha(\boldsymbol{e}, \omega) - \frac{E_0^4}{64} \Delta \gamma(\boldsymbol{e}, \omega) - \dots, \tag{50}$$

в которой  $\omega_{\rm fi}^{(0)}$  соответствует частоте невозмущенного перехода в отсутствие поля, а  $\Delta\alpha(e,\omega)$  и  $\Delta\gamma(e,\omega)$  – разности динамических поляризуемостей и гиперполяризуемостей начального ( $|{\rm i}\rangle$ ) и конечного ( $|{\rm f}\rangle$ ) состояний.

Для атомов с ненулевым ядерным моментом I, например фермионных изотопов атомов щелочноземельных элементов, квадратичный эффект Штарка описывается аналогичными формулами (для простоты ограничимся случаем линейно поляризованного поля, воздействующего на атомный уровень  $|\beta JFM_F\rangle$ ):

$$\Delta E^{(2)} = -\frac{E_0^2}{4} \left[ \alpha_F^{\rm s}(\omega) + \alpha_F^{\rm t}(\omega) \frac{3M_F^2 - F(F+1)}{F(2F-1)} \right].$$
 (51)

Здесь F — полный момент атома с учетом сверхтонкой структуры. Если предположить, что сверхтонкое взаимодействие не влияет существенным образом на электронную часть волновой функции (приближение IJ-связи [70]), то в этом приближении скалярные и тензорные компоненты поляризуемости уровня  $|\beta JFM_F\rangle$  связаны с  $\alpha_{nLSJ}^s(\omega)$  и  $\alpha_{nLSJ}^t(\omega)$  в (51) простыми соотношениями:

$$\alpha_F^s(\omega) = \alpha_{nL}^s(\omega),$$

$$\alpha_F^{t}(\omega) = (-1)^{I+J+F} \times$$

$$\times \left[ \frac{F(2F-1)(2F+1)(2J+3)(2J+1)(J+1)}{(2F+3)(F+1)J(2J-1)} \right]^{1/2}$$

$$\times \left\{ \begin{array}{cc} F & J & I \\ J & F & 2 \end{array} \right\} \alpha_{nLSJ}^{t}(\omega)$$

$$=\frac{3\,Y_F(Y_F-1)-4J(J+1)F(F+1)}{(2F+2)_2(2J-1)_2}\alpha_{nLSJ}^{\rm t}(\omega),$$

где

$$Y_F = F(F+1) + J(J+1) - I(I+1). \tag{52}$$

Однако теоретические расчеты сдвига и расщепления на зеемановские компоненты частоты перехода между подуровнями сверхтонкой структуры состояний с нулевыми орбитальным и/или полным моментами (в частности, основных состояний атомов) в постоянных и переменных электромагнитных полях осложняются необходимостью вычисления составных матричных элементов третьего порядка теории возмущений, содержащих две функции Грина и включающих в себя оператор сверхтонкого взаимодействия электронной оболочки с атомным ядром [76–79].

Формулы, аналогичные (51) и (52), могут быть записаны и для неприводимых компонент динамической гиперполяризуемости (тензора четвертого ранга), однако в силу их исключительной громоздкости [66, 67, 74] в настоящей работе они не приводятся.

## 4. Выбор базисных волновых функций в расчетах светового сдвига в щелочноземельных атомах

В настоящее время наиболее точные вычисления спектральных характеристик щелочноземельных атомов выполнены в рамках многочастичной теории возмущений, в которой последовательно учтены эффекты конфигурационного взаимодействия [37, 38, 40, 49, 57]. В этом подходе энергии  $E_{\beta J}$  и собственные функции  $|\Psi_{\beta J}\rangle$  определялись на основе решений волнового уравнения

$$H_{\text{eff}}(E_{\beta J})|\Psi_{\beta JM}\rangle = E_{\beta J}|\Psi_{\beta JM}\rangle,$$
 (53)

в котором эффективный гамильтониан записывался в виле

$$H_{\rm eff}(E_n) = H_{\rm fc} + \Sigma. \tag{54}$$

Здесь  $H_{\rm fc}$  – двухэлектронный гамильтониан в приближении замороженного остова, а  $\Sigma$  – совокупность поправок к  $H_{\rm fc}$ , связанных с учетом взаимодействия валентных электронов с электронами атомного остова. В приближении замороженного остова волновой вектор  $|\Psi_{\beta JM}\rangle$  записывается в виде разложения по двухчастичным базисным функциям  $|\Phi_q\rangle\equiv|\Phi_{JM}(ij)\rangle$ :

$$|\Psi_{\beta JM}\rangle = \sum_{q} C_q |\Phi_q\rangle,$$
 (55)

где значениями полного углового момента J, проекции M и четности фиксированы. Весовые коэффициенты  $C_q$ , нормированные условием

$$\sum_{q} |C_q|^2 = 1, (56)$$

определяются на основе вариационного принципа с использованием усредненного по формуле (55) релятивистского гамильтониана

$$\langle \Psi_{\beta JM} | H_{\text{fc}} | \Psi_{\beta JM} \rangle = \sum_{q} E_q C_q^2 + \sum_{q,p} V_{qp} C_q C_p, \tag{57}$$

включающего в себя кулоновский и брейтовский операторы межэлектронного взаимодействия. В (57)  $E_q=E_i+E_j$  — сумма одночастичных дирак-фоковских энергий, а  $V_{qp}$  — матричный элемент первого порядка для двухчастичных взаимодействий между конфигурациями q=(ij) и p=(kl). Энергия E и волновая функция  $\sum_q C_q |\Phi_q\rangle$  определяются решениями системы уравнений [37]

$$\sum_{p} (E_q \delta_{qp} + V_{qp}) C_p = E C_q.$$
 (58)

Одночастичные базисные орбитали, используемые для построения двухчастичных базисных функций  $|\Phi_q\rangle$  в (55), включают в себя парциальные s-, p-, d-, f- и g-волны со сплайновой аппроксимацией каждой из них. Оценки скорости сходимости метода (для заданной точности расчета) описаны в [80,81]. Наиболее сложной составляющей метода конфигурационного взаимодействия является учет поправки  $\Sigma$  в гамильтониане (54), описывающей взаимодействие остовных и валентных электронов, а также эффекты поляризации остова электронами валентных оболочек. Такой учет осуществляется в рамках многочастичной теории возмущений низшего порядка [37].

Расчеты спектральных характеристик щелочноземельных атомов, выполненные на основе описанного выше подхода, как правило, весьма сложны и требуют значительных вычислительных ресурсов даже при использовании современных высокопроизводительных компьютеров. Кроме того, как показывает практика расчетов, технические трудности реализации этого метода значительно возрастают, когда требуется оценить эффекты высшего порядка теории возмущений по внешнему электромагнитному полю. Данное обстоятельство стимулирует развитие приближенных, менее строгих в теоретическом отношении полуэмпирических методов вычислений, в которых используются характеристики спектров атомов, полученные либо на основе экспериментальных измерений, либо в рамках других, более точных теоретических подходов. Расчетные формулы, применяемые в этих методах, достаточно просты, наглядны и содержат сравнительно небольшое число свободных полуэмпирических параметров, слабо зависящих от энергий, заряда ядра или квантовых чисел рассматриваемых атомных уровней.

В настоящей работе для проведения численных расчетов динамических восприимчивостей второго и четвертого порядков использовался метод модельного потенциала, в рамках которого роль базисных волновых функций ограничивалась главным образом описанием оптических свойств валентных электронов, а учет их взаимодействия с остовом проводился феноменологически, посредством ввода эффективного потенциала [82]. Различные модификации метода модельного потенциала, а также обоснование его применимости к расчету спектров и

вероятностей радиационных переходов в щелочноземельных атомах приведены, например, в работах [39,83—89]. В данной работе нами использовался потенциал Фьюса [87], эффективность применения которого в значительной степени определяется возможностью получения замкнутых аналитических выражений для волновых функций и функции Грина валентных электронов при расчетах матричных элементов в произвольных порядках теории возмущений [66]. В этом подходе выражение для модельного потенциала Фьюса имеет вид [87—89]

$$U_{\rm F}(r) = -\frac{Z}{r} + \sum_{L} \frac{B_L}{r^2} \hat{P}_L, \tag{59}$$

где Z – заряд остаточного иона;  $\hat{P}_L$  – оператор проектирования на подпространство сферических функций с данным орбитальным моментом L; параметры  $B_L$  потенциала определяются из условия совпадения экспериментального значения энергии нижнего уровня с данным Lс соответствующим собственным значением гамильтониана. Таким образом, модельный потенциал Фьюса описывается непрерывной функцией, для которой существует аналитическое решение уравнения Шредингера. Данное обстоятельство является весьма существенным, поскольку в теории многоэлектронного атома функции Грина могут быть построены лишь приближенными методами, выбор которых обуславливается, в первую очередь, типом рассматриваемой задачи и точностью, с которой необходимо определить спектр энергии (полюсов функции Грина) и волновых функций (вычетов в полюсах).

Функция Грина для модельного потенциала Фьюса (59) строится аналогично функции Грина для кулоновского поля с использованием разложений по функциям Штурма. Например, выражение для радиальной части функции Грина модельного потенциала имеет вид [66]

$$g_L(E; r_1, r_2) = \frac{4Z}{v}$$

$$\times \sum_{k=0}^{\infty} \frac{k! \exp[-(x_1 + x_2)/2] (x_1 x_2)^{\lambda_L} L_k^{2\lambda_L + 1}(x_1) L_k^{2\lambda_L + 1}(x_2)}{\Gamma(k + 2 + \lambda_L)(k + \lambda_L + 1 - \nu)}. (60)$$

Здесь  $x_j = 2Zr_j/v$   $(j=1,2); \ v = Z/(-2E-\mathrm{iO})^{1/2}; \ L_k^m(x)$  – полином Лагерра;  $\Gamma(x)$  – гамма-функция Эйлера. Радиальные волновые функции для связанных состояний атома получаются из вычетов радиальной функции Грина (60) в полюсах, определяемых формулой  $n_\mathrm{r} + \lambda_L + 1 - v_{nL} = 0$ , где  $n_\mathrm{r} = 0, 1, 2, \ldots$  – радиальное квантовое число;  $\lambda_L$  – эффективный орбитальный момент;  $v_{nL}$  – эффективное главное квантовое число в формуле для энергии атомного состояния  $|nL\rangle$ 

$$E_{nL} = -\frac{Z^2}{2v_{nI}^2}. (61)$$

Для определения параметра  $\lambda_L$  используется условие совпадения (61) с экспериментальным значением энергии низшего состояния валентного электрона с заданным L [89, 90]. Здесь необходимо отметить, что абсолютная сходимость рядов полиномов Лагерра (60) имеет место лишь для отрицательных энергетических параметров, обеспечивающих вещественность величины  $\nu$ . Однако при надпороговых значениях частот, при которых энергии функции Грина становятся положительными, сходи-

мость ряда (60) нарушается, что приводит к необходимости использования обобщенного разложения Штурма (для кулоновского потенциала см., напр., [91–93]), позволяющего получить универсальные замкнутые выражения для составных матричных элементов. Спектральное разложение общего вида

$$g_L(E; r_1, r_2) = \sum_{n} \frac{R_{nL}(r_1)R_{nL}(r_2)}{E_n - E} + \int_0^\infty d\varepsilon \frac{R_{\varepsilon L}(r_1)R_{\varepsilon L}(r_2)}{\varepsilon - E - iO}$$
(62)

полезно лишь для анализа структуры радиальных матричных элементов, в частности для оценки высокочастотной асимптотики, разделения действительной и мнимой частей в амплитудах переходов и т. д. Однако применение данного представления для численного расчета матричных элементов, в особенности в высших порядках теории возмущений, становится весьма проблематичным из-за необходимости вычисления интегралов по состояниям непрерывного спектра и слабой сходимости рядов по состояниям дискретного спектра. Кроме того, трех- и более кратные ряды по дискретному спектру расходятся [91], т. е. спектральное разложение (62) для расчета поправок четвертого порядка неприменимо.

В работах [75, 94, 95] нами сформулирован модифицированный вариант теории модельного потенциала Фьюса, позволивший существенно уточнить расчеты спектроскопических характеристик атомов как для основных, так и для высоковозбужденных состояний валентного электрона. Так, для щелочных атомов волновая функция совпадает с волновой функцией теории квантового дефекта [96], если радиальное квантовое число для основного состояния положить равным единице, а эффективный орбитальный момент  $\lambda_L$  приравнять  $v_{\rm g}-2$  ( $v_{\rm g}$  – эффективное главное квантовое число основного состояния). При таком выборе  $\lambda_L$  и  $n_{\rm r}$  волновая функция атома умножается на дополнительный фазовый множитель  $(-1)^i$ , где  $i = n - n_r - 1$ . В работах [75, 94], в частности, было показано, что такой же подход следует применять и к метастабильным состояниям Не. Появляющееся при этом дополнительное состояние с  $n_{\rm r}=0$  в полном наборе состояний в подпространстве радиальных функций с данным орбитальным моментом L расположено очень низко на энергетической шкале и практически не влияет на функцию Грина и результаты численных расчетов статических восприимчивостей. Полученные при таком выборе модельных параметров значения тензорной поляризуемости и разности скалярных поляризуемостей триплетных подуровней Не, весьма чувствительные к качеству используемых волновых функций, отличаются от результатов ab initio расчетов менее чем на 10 %.

Выбор замкнутой системы функций модельного потенциала Фьюса позволяет существенно упростить и унифицировать расчеты рядов теории возмущений за счет получения точных аналитических выражений для соответствующих характеристик.

## 5. Анализ результатов расчетов динамических восприимчивостей второго и четвертого порядков

Как было показано в разд.3, вычисления угловых интегралов в выражениях для матричных элементов, определяющих поправки второго и более высоких порядков к квазиэнергии атома в поле, основываются на примене-

нии стандартных методов квантовой теории углового момента атома [69] и особых проблем не вызывают (см., напр., [66–68] и ссылки в этих работах). Расчеты радиальных матричных элементов, напротив, сопряжены с упомянутыми выше трудностями вычисления спектральных сумм по полному набору промежуточных состояний, включающему в себя состояния непрерывного спектра и представляющему функцию Грина.

Таким образом, в практических вычислениях поляризуемостей атомных уровней большое значение имеет правильный выбор представления для функции Грина, который позволит получить конечный результат в наиболее рациональном и удобном для дальнейших приложений виде. В настоящей работе для расчета радиальных матричных элементов функция Грина для модельного потенциала строилась аналогично функции Грина для кулоновского поля (см. разд.4), а для радиальной части  $g_L^E(r,r')$ , появляющейся в комбинациях матричных элементов (22), применялось разложение по функциям Штурма (60), обладающее только дискретным спектром. При этом выражение для отдельных слагаемых в суммах (22)

$$\rho_{L_1}(\pm \omega) = \langle nLSJ | rg_{L_1}^{E_{nLSJ}^{(0)} \pm \omega}(r, r') r' | nLSJ \rangle$$
 (63)

можно записать в замкнутом аналитическом виде [71]:

$$\begin{split} \rho_{L_{1}}(\pm\omega) &= \frac{v^{3}}{16Z^{4}} \left(\frac{2v}{v+v_{n}}\right)^{2\lambda_{n}+4} \left(\frac{2v_{n}}{v+v_{n}}\right)^{2\lambda_{L_{1}}+4} \\ &\times \frac{\Gamma(1+v_{n}+\lambda_{n})}{n_{r}!\Gamma(2\lambda_{L_{1}}+2)} \frac{\left[\Gamma(4+\lambda_{n}+\lambda_{L_{1}})\right]^{2}}{\left[\Gamma(2\lambda_{n}+2)\right]^{2}} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(2\lambda_{L_{1}}+2)_{m}}{m!(1+m+\lambda_{L_{1}}-v)} \\ &\times \left[F_{2}(\lambda_{n}+\lambda_{L_{1}}+4;-n_{r},-m;2\lambda_{n}+2,2\lambda_{L_{1}}+2;\frac{2v}{v+v_{n}},\frac{2v_{n}}{v+v_{n}})\right]^{2}. \end{split}$$

Здесь  $v=Z/[-2(E_{nLSJ}^{(0)}\pm\omega+\mathrm{iO})]^{1/2};\ v_n=Z/(-2E_{nLSJ}^{(0)})^{1/2};$   $\lambda_n=v_n-n_r-1$  — орбитальный параметр [60, 66, 90] состояния  $|nLSJ\rangle;$   $F_2$  — функция Аппеля [73]. В сравнении со спектральным разложением  $\rho_{L_1}(\pm\omega)$  по собственным функциям промежуточных состояний (62), ряд (64) обладает более быстрой сходимостью, объясняемой дискретностью и эквидистантностью спектра собственных значений в обобщенной задаче Штурма — Лиувилля [97].

Для иллюстрации скорости сходимости спектральных рядов при вычислениях поляризуемостей щелочноземельных атомов в табл.4 на примере расчета поляризуемости основного состояния атома Мg приведены парциальные вклады спектра промежуточных 3snp <sup>1</sup>P<sub>1</sub>-уровней как функции главного квантового числа п. Расчеты динамической поляризуемости проводились на «магической» длине волны  $\lambda = 467$  нм. В расчетах вкладов промежуточных уровней с n = 3 - 10 использовались точные данные для сил осцилляторов, вычисленные с применением многоконфигурационного метода Хартри – Фока [98, 99]. Уровни с  $n = 11, ..., \infty$ , а также вклад непрерывного спектра рассчитывались методом модельного потенциала Фьюса. Из табл.4 следует, что учет лишь первых возбужденных состояний промежуточного спектра обеспечивает погрешность расчета поляризуемости порядка нескольких процентов, в то время как вклад состояний непрерывного спектра не превышает 1%. Однако в ряде случаев вклад непрерывного спектра в поляризуемость атомных уровней может быть достаточно большим (в зависимости от  $\omega$  и структуры основного и возбужденных состояний атома) и достигать нескольких десятков процентов [100].

Таким образом, значительное преимущество метода функций Грина заключается в возможности одновременного учета вклада дискретных состояний и состояний непрерывного спектра в расчетах поляризуемостей атомов, в то время как применение здесь методов прямого суммирования приводит к существенным проблемам в оценках вклада непрерывного спектра.

Как отмечалось в разд.1, для реализации режима «выключенного светового сдвига» в оптических стандартах частоты на холодных атомах необходим точный расчет поляризационных и дисперсионных свойств динамических поляризуемостей уровней в зависимости от мощности лазерного поля, формирующего оптическую решетку [24, 25, 29 – 30]. Согласно формуле (50) при сканировании частоты  $\omega$  в окрестности точки пересечения динамических поляризуемостей  $\omega = \omega_0$ , соответствующей «магической» длине волны  $\lambda_0$ , происходит полная взаимная компенсация динамического эффекта Штарка второго порядка и, следовательно, возмущение часового перехода  ${}^1S_0 - {}^3P_J$  (J = 0, 1, 2) лазерным полем оптической решетки обуславливается лишь членами высшего порядка (динамическими восприимчивостями четвертого поряд-

Табл.4. Вклады промежуточных 3snp  $^{1}P_{1}$ -уровней в дипольные статическую и динамическую поляризуемости атома Mg в основном состоянии

n	Разность энергий в отсутствие поля $\Delta E \; (3s^2  ^1S_0 - 3snp  ^1P_1) \; (cm^{-1})$	Статическая поляризуемость (а. е.)		Динамическая поляризуемость (а. е.)	
		3snp <sup>1</sup> P <sub>1</sub> -уровень	Спектральная сумма	3snp <sup>1</sup> P <sub>1</sub> -уровень	Спектральная сумма
3	35051	67.801	67.80	108.17	108.1
4	49346	2.412	70.21	2.97	111.1
5	54706	0.455	70.66	0.53	111.6
6	57214	0.150	70.81	0.17	111.8
7	58580	0.068	70.88	0.07	111.9
8	59403	0.036	70.92	0.04	111.9
9	59936	0.022	70.94	0.02	112.0
10	60302	0.014	70.96	0.01	112.0
$11,,\infty$		0.020	70.98	0.02	112.1
Непрерывнь спектр	й	0.41	71.39	0.4	112.4

ка (гиперполяризуемостями) и релятивистсткими поправками к оператору электрического дипольного взаимодействия с полем лазерного излучения).

Из литературы хорошо известно [101, 102], что дисперсионные свойства динамической поляризуемости в межрезонансной области зависят не только от частоты и поляризации лазерного поля, но и от структуры рассматриваемых атомных уровней. Так, в случае линейно поляризованного поля динамическая поляризуемость основного состояния атомов обращается в нуль один раз в каждом межрезонансном промежутке. Для возбужденных атомов поведение поляризуемостей может кардинально измениться, в частности поляризуемость мо-жет либо вообще не обратиться в нуль, либо обращаться в нуль дважды в каждом межрезонансном промежутке (меняя при этом знак при прохождении каждого резонанса). Перечисленные дисперсионные свойства объясняются возможностями возникновения резонанса рассматриваемых уровней как с высоколежащими, так и с низколежащими атомными уровнями. Специфика поведения поляризуемостей высоковозбужденных ридберговых атомных уровней в монохроматическом поле описана в [72, 92, 101].

С другой стороны, частота лазерного излучения  $\omega_0$ , при которой происходит взаимная компенсация светового сдвига, должна удовлетворять двум основным условиям [25, 31]:

1) точка пересечения динамических поляризуемостей должна располагаться как можно дальше от резонанса, что позволяет свести к минимуму эффект резонансного поглощения и рассеяния лазерного излучения, формирующего оптическую решетку;

2) вероятность распада возбужденного  ${}^{3}P_{J}$ -уровня (J=0,1,2) за счет канала двухфотонной ионизации на частоте  $\omega_{0}$  должна быть пренебрежимо малой величиной по сравнению с вероятностью однофотонного радиационного распада в основное состояние.

Применяя теоретические формулы предыдущих разделов и учитывая перечисленные выше условия, мы рассчитали динамические поляризуемости основного ( $^1S_0$ ) и возбужденного ( $^3P_0$ ) уровней для фермионного изотопа атома Sr в окрестности «магической» длины волны  $\lambda_0 \approx 800$  нм (рис.3). Поле лазерного излучения считалось линейно поляризованным, его интенсивность полагалась

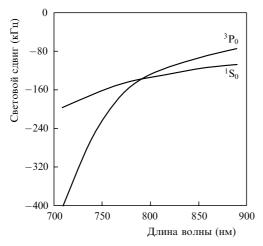


Рис.3. Световой сдвиг для  $^1$  S $_0$  и  $^3$  P $_0$ -уровней в атоме Sr в окрестности «магической» длины волны  $\lambda_0$  линейно поляризованного лазерного поля.

равной 10 кВт/см<sup>2</sup>. Вычисления динамических поляризуемостей проводились двумя независимыми способами: методом разложения Штурма функции Грина для модельного потенциала Фьюса и методом прямого суммирования при учете уровней дискретного спектра с  $n \le 10$ . В последнем случае использовались точные матричные элементы дипольного момента атома, вычисленные в многоконфигурационном подходе Хартри-Фока [25, 103]. Результаты этих вычислений показывают совпадение сравниваемых значений в пределах 2 % – 3 %, что несомненно подтверждает достоверность проводимых расчетов. Как было показано нами в [25], эффекты сверхтонкой структуры, а также зависимость светового сдвига от поляризации лазерного поля незначительны благодаря нулевым электронным моментам основного и возбужденного уровней и не оказывают заметного влияния на величину  $\lambda_0$  при расчетах динамических поляризуемостей атома Sr. Вклад состояний непрерывного спектра также невелик и не превышает 1 %. Однако результат измерений  $\lambda_0$ , представленный в работе [31], несколько отличается в большую сторону от приведенных выше оценок и составляет  $813 \pm 2$  нм. Причина расхождения данных экспериментальных наблюдений и теоретических расчетов, полученных независимыми методами, до конца неизвестна и в настоящее время является предметом интенсивных дискуссий.

Поскольку в литературе отсутствуют экспериментальные данные о сдвигах высшего порядка атомных уровней в световом поле, нами были проведены теоретические оценки этих величин на примере запрещенного  ${}^{3}\mathrm{P}_{0}$  –  ${}^{1}\mathrm{S}_{0}$ -перехода в атоме Sr. Данные оценки, несмотря на относительно невысокую интенсивность излучения используемых лазерных источников (порядка нескольких десятков киловатт на квадратный сантиметр), принципиально важны, т.к. после взаимной компенсации полевых поправок второго порядка световой сдвиг четвертого порядка, описываемый динамическими гиперполяризуемостями уровней, является одним из основных источников систематических неопределенностей при измерениях частоты часового перехода в оптических стандартах частоты рассматриваемого типа. Таким образом, интерес к поправочному члену  $-(E_0^4/64)\Delta\gamma(e,\omega)$  в формуле (50), определяющему отклонение зависимости светового сдвига частоты от квадратичной, обусловлен потребностями анализа метрологических характеристик оптических стандартов частоты с относительной погрешностью  $10^{-16} - 10^{-18}$ 

В отличие от статического поля, для поля лазерной волны достаточно трудно сформулировать единые критерии оценок вклада высших порядков теории возмущений, поскольку при расчетах динамических гиперполяризуемостей имеет место более сильная зависимость их от частоты поля, чем при расчетах светового сдвига второго порядка. Более того, наряду с обсуждавшимися выше однофотонными резонансами, возникают также двухфотонные резонансы  $\Delta \gamma(e,\omega)$  на промежуточных уровнях той же четности, что и четность рассматриваемого уровня; причем в общем случае число различных резонансов и их дисперсионные свойства существенно зависят от типа поляризации лазерного поля [67].

Общие выражения для динамических гиперполяризуемостей имеют весьма громоздкий вид [67, 68, 75], тем не менее для конкретных состояний их можно записать в виде комбинаций неприводимых компонент тензора чет-

вертого ранга. В частности, для линейно поляризованного поля динамическая гиперполяризуемость определяется тремя инвариантными параметрами, для циркулярно поляризованного — пятью параметрами, причем все они выражаются через редуцированные матричные элементы оператора дипольного момента атома четвертого и второго порядков [67]:

$$R_{J_1J_2J_3}(\omega_1,\omega_2,\omega_3)$$

$$= \langle \beta J \| \boldsymbol{D} G_{J_1}^{E_{\beta J} + \omega_1} \boldsymbol{D} G_{J_2}^{E_{\beta J} + \omega_2} \boldsymbol{D} G_{J_3}^{E_{\beta J} + \omega_3} \boldsymbol{D} \| \beta J \rangle, \tag{65}$$

$$R_{J_1J_2}(\omega) = \langle \beta J || \mathbf{D} G_{J_1}^{E_{\beta J} + \omega} G_{J_1}^{E_{\beta J} + \omega} \mathbf{D} || \beta J \rangle, \tag{66}$$

$$R_{J_1}(\omega) = \langle \beta J \| \mathbf{D} G_{J_1}^{E_{\beta J} + \omega} \mathbf{D} \| \beta J \rangle. \tag{67}$$

Частоты  $\omega_{1-3}$  в (65) удовлетворяют следующим условиям:

$$\omega_1, \omega_3 = \pm \omega, \quad \omega_2 = 0, \pm 2\omega.$$
 (68)

Интегрирование по радиальным переменным в (65)— (67) при использовании разложения Штурма для функции Грина также проводится аналитическими методами, и окончательный результат записывается в виде комбинаций быстро сходящихся рядов, содержащих гипергеометрические функции Гаусса  $_2$ F $_1$  [73]. Выполненные нами расчеты гиперполяризуемостей для линейно поляризованного поля на «магической» длине волны лазерного излучения  $\lambda_0 \approx 800$  нм дают [25]

$$\gamma(^{1}S_{0}) = 6.3 \times 10^{6} \text{ a. e.}, \tag{69}$$

$$\gamma(^{3}P_{0}) = 2.7 \times 10^{8} \text{ a. e.} \tag{70}$$

В частотных единицах при интенсивности поля  $10~{\rm kBt}\times{\rm cm}^{-2}$  поправки четвертого порядка к световому сдвигу уровней [25]

$$\Delta E^{(4)}(^{1}\mathrm{S}_{0}) \approx -5.3 \times 10^{-5} \, \Gamma \mathrm{H},$$
 (71)

$$\Delta E^{(4)}(^{3}P_{0}) \approx -2.3 \times 10^{-3} \Gamma \text{H}.$$
 (72)

Таким образом, после взаимной компенсации полевых поправок второго порядка относительный вклад динамического эффекта Штарка в частоту часового перехода  $^1S_0-^3P_0$  не превышает  $10^{-17}$ .

Для атома Sr нами оценивались также и эффекты, связанные с учетом магнитно-дипольного  $(V_{\mu})$  и электрического квадрупольного  $(V_Q)$  взаимодействий атома с внешним монохроматическим полем. Эти оценки показали, что соотношение между магнитно-дипольной, электрической квадрупольной и электрической дипольной поляризуемостями можно представить в виде [25]

$$\alpha_{\rm M1}(\omega_0) \approx \alpha_{\rm E2}(\omega_0) \approx 10^{-7} \alpha_{\rm E1}(\omega_0) \tag{73}$$

и, следовательно, относительный вклад поправок высшей мультипольности в частоту перехода  $^3P_0-^1S_0$  также не превышает  $10^{-17}$ .

С использованием метода, изложенного в разд.3 и 4, нами были выполнены систематические расчеты динамических поляризуемостей и других атомных систем, представляющих интерес для современных стандартов часто-

ты на холодных атомах. При оценке штарковского сдвига часовых уровней во всех случаях (за исключением атома Mg) интенсивность лазерного поля полагалась равной  $10~\mathrm{kBt/cm^2}$ .

Как отмечалось выше (табл.2 и 3), атом Ү в имеет два стабильных нечетных изотопа –  $^{171}$ Yb и  $^{173}$ Yb, в которых вероятность перехода  ${}^{1}S_{0} - {}^{3}P_{0}$ , индуцированного эффектами сверхтонкой структуры и синглет-триплетным смешиванием  ${}^{3}P_{1}$ - и  ${}^{1}P_{1}$ - уровней, отлична от нуля (табл.3). Время жизни этих атомов составляет десятки секунд, что позволяет рассматривать их в качестве перспективных рабочих сред в оптических стандартах частоты с  $\lambda = 578$ нм [104]. В табл.5 приведены результаты расчетов динамических поляризуемостей для  ${}^{1}S_{0}$ - и  ${}^{3}P_{0}$ -уровней атома Yb как функций длины волны линейно поляризованного лазерного поля. Вычисления в рамках метода модельного потенциала Фьюса для двух валентных электронов атома Yb проводились двумя способами: с помощью формализма функции Грина для промежуточных состояний ( $\alpha^G$ ) и методом прямого суммирования ( $\alpha^{ds}$ ) по спектру промежуточных состояний в пределах заданной точности теоретического расчета  $\sim 10^{-4}$ . Данные табл.5 показывают, что результаты расчетов этими способами хорошо согласуются друг с другом во всем рассматриваемом диапазоне длин волн (в пределах нескольких процентов), а «магическая» длина волны  $\lambda_0$  на переходе  ${}^{1}$ S<sub>0</sub> -  ${}^{3}$ P<sub>0</sub> равна  $\sim$  724 нм.

Табл.5. Динамические поляризуемости для основного ( $(4f^{14})6s^2\,^1S_0$ ) и возбужденного ( $(4f^{14})6s6p\,^3P_0$ ) уровней атома Yb, рассчитанные методом функции Грина модельного потенциала ( $\alpha^G$ ) и методом прямого суммирования ( $\alpha^{ds}$ ) по промежуточным состояниям дискретного спектра (первое слагаемое в правой части (62)).

Длина	$\alpha^G(^1S_0)$	$\alpha^{ds}(^{1}S)$	$\alpha^G(^3P_0)$	$\alpha^{ds}(^3P_0)$
волны (нм)	(a. e.)	(a. e.)	(a. e.)	(a. e.)
650	192.5	191.9	22683.1	22682.3
660	189.2	188.5	1829.2	1828.1
670	186.1	185.4	914.6	913.6
680	183.2	182.5	588.7	587.6
690	180.5	179.9	419.7	418.6
700	178.0	177.4	315.0	314.0
710	175.7	175.1	242.9	241.8
720	173.5	172.9	189.5	188.5
721	173.3	172.7	184.9	183.8
722	173.1	172.5	180.4	179.3
723	172.9	172.3	176.0	174.9
724*	172.7	172.1	171.7	170.6
725	172.5	171.9	167.5	166.5
726	172.3	171.7	163.4	162.4
727	172.1	171.5	159.3	158.3
728	171.9	171.3	155.4	154.4
729	171.7	171.1	151.6	150.6
730	171.5	170.9	147.8	146.8
740	169.6	169.0	113.9	112.9
750	167.8	167.2	85.4	84.3
760	166.1	165.5	60.7	59.7
770	164.5	163.9	38.9	37.9
780	163.0	162.4	19.3	18.3
790	161.6	161.0	1.3	0.3
800	160.3	159.7	-15.4	-16.4

 $\overline{*}$ «магическая» длина волны на переходе  ${}^{1}S_{0} - {}^{3}P_{0}$  в атоме Yb.

2 Квантовая электроника, т.36, № 1

Статические поляризуемости атома Yb в основном состоянии  $\alpha^G(^1S_0)=121.2$  а.е. и  $\alpha^{ds}(^1S_0)=120.6$  а.е. не отличаются от результатов прецизионных хартри-фоковских вычислений в пределах их заявленной точности:  $\alpha^{HF}(^1S_0)=118\pm 45$  а.е. [105]. Однако для возбужденного  $^3P_0$ -уровня отличие достигает 40 %:  $\alpha^G(^3P_0)=351.5$  а.е.,  $\alpha^{ds}(^3P_0)=350.5$  а.е. и  $\alpha^{HF}(^3P_0)=252\pm 25$  а.е. [105].

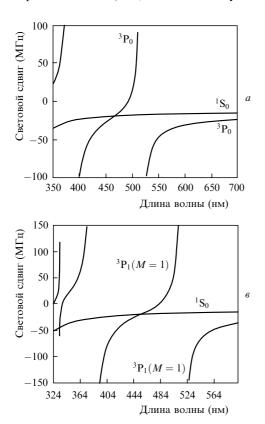
Мы также оценили вклад электронов остова в динамический эффект Штарка в атоме Yb [85, 86]. В рамках метода модельного потенциала Фьюса в многоканальном приближении (фактически являющемся многоканальным аналогом метода квантового дефекта в сложных атомах [106]) нами рассчитывался световой сдвиг  $(4f^{14})6s6p(^3P_0)$ -уровня Yb на  $\lambda=532$  нм. Вычисленный сдвиг  $\Delta E^{(2)}(^{3}P_{0}) \approx -125$  кГц представляет самостоятельный интерес для экспериментальных исследований, проводимых в университете г. Киото (Япония) [107]. Применение метода модельного потенциала в многоканальном варианте для оценки «магической» длины волны на переходе  ${}^{1}S_{0}-{}^{3}P_{0}$  дает  $\lambda_{0}\approx750$  нм, что практически совпадает с данными расчетов работы [57] ( $\lambda_0 \approx 752$ нм). Следует отметить, что, наряду с небольшим изменением «магической» длины волны (750 нм вместо 724 нм), учет вклада электронов оболочки 4f<sup>14</sup> приводит к увеличению поляризуемости и соответственно глубины штарковского потенциала оптической решетки более чем в два раза ( $-200 \, \text{к}\Gamma \text{ц}$  вместо  $-80 \, \text{к}\Gamma \text{ц}$ ) [56, 85, 86].

На рис.4 приведены дисперсионная и поляризационная зависимости светового сдвига частоты для запрещенных оптических переходов в атоме Mg. В отличие от предыдущих расчетов, интенсивность лазерного поля полагалась равной 3.5 МВт/см<sup>2</sup>, что соответствует потреб-

ностям проводимых и планируемых экспериментов в Техническом университете г. Ганновера (Германия) [26].

На рис.4,a показан световой сдвиг для  ${}^{1}S_{0} - {}^{3}P_{0}$ -перехода в диапазоне длин волн 350-700 нм. Как следует из разд.3, вклады <sup>3</sup>S-терма промежуточного спектра в скалярные и тензорные компоненты динамической поляризуемости уровня  ${}^{3}P_{1}$  (M=0) взаимно компенсируются, а резонансные особенности светового сдвига определяются вкладом <sup>3</sup>D-уровней промежуточного спектра. Точка пересечения динамических поляризуемостей располагается между двумя <sup>3</sup>D-резонансами, и соответствующая «магическая» длина волны на этом переходе  $\lambda_0 \approx 312$  нм (рис.4, $\delta$ ). Для  ${}^{1}S_{0} - {}^{3}P_{1}$ -перехода с  $M \neq 0$ , напротив, ситуация существенно иная и точка пересечения динамических поляризуемостей находится в межрезонансной области, образованной <sup>3</sup>S- и <sup>3</sup>D-термами спектра промежуточных состояний (рис.4, $\epsilon$ ). На рис.4, $\epsilon$  представлена дисперсионная зависимость для уровня  ${}^{3}P_{1}$  (M=1) атома Мд для трех типов поляризаций лазерного поля: линейной, круговой правой и круговой левой. Используя формулу (40), можно легко показать, что результаты расчетов динамической поляризуемости для уровня <sup>3</sup>P<sub>1</sub> (M = 1) полностью идентичны приведенным на рис.4, $\epsilon$ результатам для уровня  ${}^{3}P_{1}$  (M=1) с правой круговой поляризацией. Анализ поляризационной зависимости динамической поляризуемости (рис.4,г) показывает, что тип поляризации лазерного поля оказывает заметное влияние как на дисперсионные свойства световых сдвигов атомных уровней, так и на положение точек их пересечения.

Нами проведены также аналогичные расчеты световых сдвигов и для других атомов: He, Be, Ca и Hg.



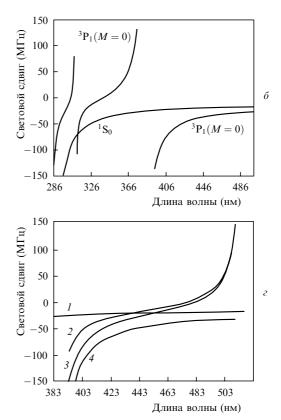


Рис.4. Динамический эффект Штарка для уровней  $^1S_0$  и  $^3P_0$  (a),  $^1S_0$  и  $^3P_1$ (M=0) ( $\delta$ ) и  $^1S_0$  и  $^3P_1$ (M=1) ( $\delta$ ) в атоме Mg для линейно поляризованного лазерного поля, а также поляризационные и дисперсионные зависимости динамических поляризуемостей уровней  $^1S_0$  и  $^3P_1$ (M=1) в интервале длин волн между  $^3S$ -резонансом ( $\delta$  = 517.2 нм) и  $^3D$ -резонансом ( $\delta$  = 383.3 нм) для основного состояния ( $\delta$ ) и уровня  $^3P_1$ ( $\delta$  = 1) при линейной поляризации ( $\delta$ ), правой ( $\delta$ ) и левой ( $\delta$ ) круговых поляризациях ( $\delta$ ).

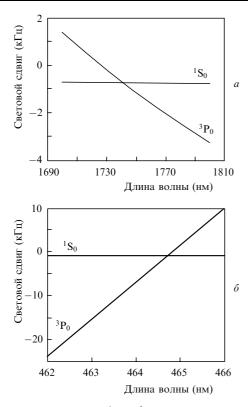


Рис.5. Световые сдвиги для  $^{1}$ S<sub>0</sub>- и  $^{3}$ P<sub>0</sub>-уровней в атоме Не в окрестности «магической» длины волны  $\lambda_{0}=1739$  (*a*) и 465 нм ( $\delta$ ).

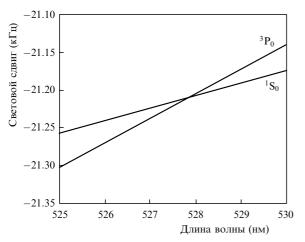


Рис.6. Световой сдвиг для  ${}^1S_0$ - и  ${}^3P_0$ -уровней в атоме Ве.

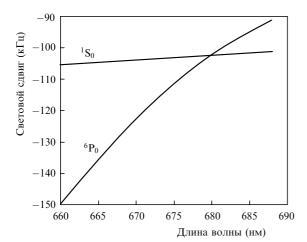


Рис.7. Световой сдвиг для  ${}^{1}S_{0}$ - и  ${}^{3}P_{0}$ -уровней в атоме Са.

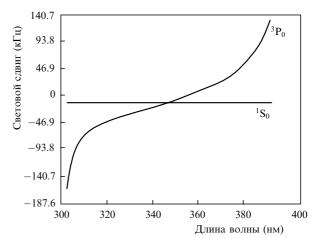


Рис.8. Световой сдвиг для  $^1S_0$ - и  $^3P_0$ -уровней в атоме Hg в окрестности «магической» длины волны  $\lambda_0=342$  нм.

Результаты вычислений приведены на рис.5-8 соответственно.

#### 6. Заключение

Настоящая работа инициирована задачами создания высокостабильных оптических стандартов частоты нового поколения, основанных на применении интеркомбинационных и индуцированных сверхтонким взаимодействием часовых переходов  $^1S_0 - ^3P_J(J=0,1)$  в холодных щелочноземельных атомах. Для оптических стандартов указанного типа теоретически исследован режим «выключенного светового сдвига» (впервые предложенный и реализованный в Токийском университете (Япония) для атома Sr [24, 25, 29 – 31]), при котором осуществляется полная взаимная компенсация квадратичных по полю штарковских сдвигов для основного и возбужденных уровней, плененных в оптической решетке.

Выполнены детальные расчеты световых сдвигов частоты в атомах Не, Ве, Мg, Са, Sr, Yb и Нg как функций частоты, интенсивности и поляризации лазерного поля, формирующего оптическую решетку. При вычислениях использовался метод теории возмущений для квазиэнергетических уровней атомов во внешнем монохроматическом поле с учетом членов второго и четвертого порядков по амплитуде лазерного излучения. При этом основными характеристиками, определяющими изменение атомного спектра в лазерном поле, являлись динамические поляризуемости и гиперполяризуемости уровней, представленные в виде суммы неприводимых тензорных компонент этих величин.

На основе анализа дисперсионных и поляризационных свойств динамических поляризуемостей атомов определены «магические» длины лазерных волн, при которых происходит взаимная компенсация квадратичных штарковских сдвигов начального и конечного состояний. Продемонстрирована также высокая эффективность применения метода функций Грина для модельного потенциала Фыоса как в задачах расчета динамических поляризуемостей, так и для точных оценок эффектов высшего порядка (динамических гиперполяризуемостей, магнитно-дипольных и электрических квадрупольных поправок к дипольной поляризуемости), являющихся одними из основных источников систематических погрешностей в оптических стандартах частоты рассматриваемого типа.

Как следует из представленных результатов расчетов для фермионного изотопа Sr, относительный вклад эффектов высшего порядка на переходе  $5s^2\,^1S_0\,(F=9/2)-5s5p\,^3P_0\,(F=9/2)$  не превышает  $\sim 10^{-17}$  для линейно поляризованного лазерного поля с интенсивностью  $10~\mathrm{kBt}\times\mathrm{cm}^{-2}\,(\lambda_0\approx800~\mathrm{km})$ . Данное обстоятельство, в принципе, позволяет реализовать уникальные метрологические характеристики оптических стандартов частоты на холодных нейтральных атомах (добротность линий  $10^{12}-10^{14}$ , точность и стабильность  $10^{-16}-10^{-18}$ ).

- Jefferts S.R., Meekhof D.M., Heavner T.P., Parker T.E. Metrologia, 39, 321 (2002).
- Weyers S., Hübner U., Schröder R., Tamm Chr., Bauch A. Metrologia, 38, 343 (2001).
- Pereira Dos Santos F., Marion H., Abgrall M., Zhang S., Sortais Y., Bize S., Maksimovic I., Calonico D., Grunert J., Mandache C., Vian C., Rosenbuch P., Lemonde P., Santarelli G., Clairon A. Proc. 2003 IEEE Int. Frequency Control Symp. and PDA Exhibition jointly with the 17th Europ. Frequency and Time Forum (Tampa, USA, 2003, pp 55-67).
- Marion H., Pereira Dos Santos F., Abgrall M., Zhang S., Sortais Y., Bize S., Maksimovic I., Calonico D., Grunert J., Mandache C., Lemonde P., Santarelli G., Laurent P., Clairon A., Salomon C. *Phys. Rev. Lett.*, 90, 150801 (2003).
- Levi F., Lorini L., Calonico D., Godone A. IEEE Trans. Ultrason Ferroelectrics Frequency Control, 51, 1216 (2004).
- Szymaniec K., Chalupczak W., Whilberley P.B., Lea S.N., Henderson D. Metrologia, 42, 49 (2005).
- 7. Vanier J., Audoin C. Metrologia, 42, S31 (2005).
- 8. Bauch A. Metrologia, 42, S43 (2005).
- Domnin Yu., Gaigerov B., Kochelyaevsky N., Poushkin S., Rusin F., Tatarenkov V., Yolkin G. *Metrologia*, 42, S55 (2005).
- 10. Wynands R., Weyers S. Metrologia, 42, S64 (2005).
- 11. Багаев С.Н., Захарьяш В.Ф., Клементьев В.М., Колкер Д.Б., Кузнецов С.А., Матюгин Ю.А., Пивцов В.С., Скворцов М.Н., Чепуров С.В. Квантовая электроника, **31**, 383 (2001).
- Stenger J., Schnatz H., Tamm C., Telle H.R. Phys. Rev. Lett., 88, 073601 (2002).
- 13. Бакланов Е.В., Покасов П.В. *Квантовая электроника*, **33**, 383 (2003)
- 14. Jones R.J., Diels J.C. Phys. Rev. Lett., 86, 3288 (2001).
- Diddams S.A., Jones R.J., Ye J., Cundiff S.T., Hall J.L., Ranka J.K., Windeler R.S., Holzwarth R., Udem T., Hansch T.W. *Phys. Rev. Lett.*, 84, 5102 (2000).
- Багаев С.Н., Денисов В.И., Захарьяш В.Ф., Каширский А.В., Клементьев В.М., Кузнецов С.А., Король И.И., Пивцов В.С. Квантовая электроника, 34, 1096 (2004).
- Hollberg L., Diddams S., Bartels A., Fortier T., Kim K. Metrologia, 42, S105 (2005).
- Reichert J., Niering M., Holzwarth R., Weitz M., Udem Th., Hänsch T.W. Phys. Rev. Lett., 84, 3232 (2000).
- Wilpers G., Binnewies T., Dagenhardt C., Helmcke J., Riehle F. Phys. Rev. Lett., 89, 230801 (2002).
- Gill P., Barwood G.P., Huang G., Klein H.A., Blythe P.J., Hosaka K., Thompson R.C., Webster S.A., Lea S.N., Margolis H.S. *Physica Scripta T*, 112, 63 (2004).
- Yoon T.H., Ye J., Hall J.L., Chartier J.M. Appl. Phys. B, 72, 221 (2001).
- 22. Gill P. Metrologia, 42, S125 (2005).
- 23. Tamm Chr., Schneider T., Peik E., in *Laser Spectroscopy* (Singapore: World Scientific, 2004, Vol. XVI, pp 57-61).
- Katori H., Ido T., Kuwata-Gonokami M. J. Phys. Soc. Jap., 68, 2479 (1999).
- Katori H., Takamoto M., Pal'chikov V.G., Ovsiannikov V.D. *Phys. Rev. Lett.*, 91, 173005 (2003).
- 26. Binnewies T., Wilpers G., Sterr U., Riehle F., Helmcke J., Mehlstäubler T.E., Rasel E.M., Ertmer W. *Phys. Rev. Lett.*, **87**, 123002 (2001).
- Poli N., Drullinger R.E., Ferrari G., Leonard J., Sorrentino F., Tino G.M. *Phys. Rev. A*, 71, 061403(R) (2005).
- Rafac R.J., Young B.C., Beall J.A., Itano W.M., Wineland D.J., Bergquist J.C. Phys. Rev. Lett., 85, 2462 (2000).

- Katori H. Proc. 6th Symp. on Frequency Standards and Metrology (Singapore: World Scientific, 2002, pp 323 – 330).
- Katori H., Ido T., Isoya Y., Kuwata-Gonokami M. *Phys. Rev. Lett.*, 82, 1116 (1999).
- 31. Takamoto M., Katori H. Phys. Rev. Lett., 91, 223001 (2003).
- 32. Летохов В.С. *Письма в ЖЭТФ*, **7**, 348 (1968).
- 33. Dicke R.M. Phys. Rev., 89, 472 (1953).
- Mukaiyama T., Katori H., Ido T., Li Y., Kuwata-Gonokami M. Phys. Rev. Lett., 90, 113002 (2003).
- Собельман И.И. Введение в теорию атомных спектров (М.: Наука, 1977).
- Johnson W.R., Plante D.R., Sapirstein J. Adv. At. Mol. Phys., 35, 255 (1995).
- 37. Savukov I.M., Johnson W.R. Phys. Rev. A, 65, 042503 (2002).
- 38. Derevianko A. Phys. Rev. Lett., 87, 023002 (2001).
- 39. Santra R., Christ K.V., Greene C.H. Phys. Rev. A, 69, 042510 (2004).
- Porsev S.G., Kozlov M.G., Rakhlina Y.G., Derevianko A. *Phys. Rev.* A, 64, 012508 (2001).
- 41. Godone A., Novero C. Phys. Rev. A, 65, 1717 (1992).
- Kwong H.S., Smith P.L., Parkinson W.H. Phys. Rev. A, 25, 2629 (1982).
- 43. Mitchel C.J. J. Phys. B, 8, 25 (1975).
- 44. Husain D., Roberts G.J. J. Chem. Soc. Faraday Trans. 2, 82, 1921 (1986).
- 45. Drozdowski R., Ignasiuk M., Kwela J., Heldt J. Z. Phys. D: At. Mol. Clusters, 41, 125 (1997).
- 46. Whitkop P.G., Wiesenfeld J.R. Chem. Phys. Lett., 80, 321 (1984).
- 47. Husain D., Schifino J. J. Chem. Soc. Faraday Trans. 2, 80, 321 (1984).
- 48. Kelly J.F., Harris M., Gallagher A. Phys. Rev. A, 37, 2354 (1988).
- 49. Jönsson P., Fiescher C.F. J. Phys. B, 30, 5861 (1997).
- 50. Garstang R.G. Astrophys. J., 148, 579 (1967).
- 51. Mizushima M. Phys. Rev. A, 134, 883 (1964).
- 52. Porsev S.G., Derevianko A. Phys. Rev. A, 69, 042506 (2004).
- 53. Bergström H., Levinson C., Lundberg H., Svanberg S., Wahlström C.G., Zhao You Yuan. *Phys. Rev. A*, **33**, 2387 (1986).
- Brage T., Judge P.G., Aboussaid A., Godefroid M.R., Jonsson P., Ynnerman A., Fiescher C.F., Leckrone D.S. *Astrophys. J.*, 500, 507 (1998).
- 55. Garstang R.G. J. Opt. Soc. Am., 37, 845 (1962).
- Pal'chikov V.G. Proc. 15th Europ. Frequency and Time Forum (EFTF-2002) (St.Petersburg, Russia, 2002, pp 132–136).
- Porsev S.G., Derevianko A., Fortson E.N. *Phys. Rev. A*, 69, 021403 (2004).
- 58. Зельдович Я.Б.  $\mathcal{Y}\Phi H$ , **110**, 139 (1973).
- Зельдович Я.Б., Манаков Н.Л., Рапопорт Л.П. УФН, 117, 563 (1975).
- 60. Рапопорт Л.П., Зон Б.А., Манаков Н.Л. *Теория многофотонных процессов в атомах* (М.: Атомиздат, 1978).
- 61. Манаков Н.Л., Файнштейн А.Г. ДАН СССР, **244**, 567 (1979).
- 62. Манаков Н.Л., Файнштейн А.Г. ЖЭТФ, 79, 751 (1980).
- 63. Манаков Н.Л., Преображенский М.А., Рапопорт Л.П., Файнштейн А.Г.  $\mathcal{K}$ ЭTФ, 75, 1243 (1978).
- 64. Манаков Н.Л., Файнштейн А.Г. *Теоретическая и математическая физика*, **78**, 385 (1981).
- 65. Манаков Н.Л., Мармо С.И., Пронин Е.А. ЖЭ $T\Phi$ , **125**, 288 (2004).
- Manakov N.L., Ovsiannikov V.D., Rapoport L.P. Phys. Rep., 141, 319 (1986).
- 67. Davydkin V.A., Ovsiannikov V.D. J. Phys. B, 19, 2071 (1986).
- Болгова И.Л., Овсянников В.Д., Пальчиков В.Г., Магунов А.И., фон Оппен Г. ЖЭТФ, 123, 1145 (2003).
- 69. Варшалович Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К. *Квантовая теория углового момента* (Л.: Наука, 1975).
- 70. Angel J.R.P., Sandars P.G.H. Proc. Roy. Soc. A, 305, 125 (1968).
- 71. Manakov N.L., Ovsiannikov V.D. J. Phys. B, 10, 569 (1977).
- Davydkin V.A., Ovsiannikov V.D., Zon B.A. Laser Phys., 3, 449 (1993).
- Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции. Т. 1 (М.: Наука, 1973).
- 74. Davydkin V.A., Ovsiannikov V.D. J. Phys. B, 17, L207 (1984).
- Derevianko A., Johnson W.R., Ovsiannikov V.D., Pal'chikov V.G., Plante D.R., von Oppen G. *Phys. Rev. A*, 50, 986 (1999).
- 76. Itano W.M., Lewis L.L., Wineland D.J. Phys. Rev. A, 35, 1233 (1982).
- 77. Manakov N.L., Rapoport L.P., Zapryagaev S.A. Phys. Lett. A, 48,

- 145 (1974).
- Micalizio S., Godone A., Colonico D., Levi F., Lorini L. *Phys. Rev. A*, 69, 053401 (2004).
- 79. Pal'chikov V.G. Hyperfine Interaction, 127, 287 (2000).
- 80. Johnson W.R., Cheng R.T. Phys. Rev. A, 53, 1375 (1996).
- Cheng R.T., Chen M.H., Johnson W.R., Sapirstein J. *Phys. Rev. A*, 50, 247 (1994).
- 82. Abarenkov I.V., Heine I. Philos. Mag., 12, 529 (1965).
- 83. Laughlin C., Victor G.A. Adv. Atomic Molecular Phys., 25, 163 (1988).
- 84. Patil S.H. Europhys. J. B, 10, 341 (2000).
- Пальчиков В.Г., Овсянников В.Д. Квантовая электроника, 34, 412 (2004).
- Pal'chikov V.G., Ovsiannikov V.D. Proc. SPIE Int. Soc. Opt. Eng., 5478, 219 (2004).
- 87. Simons G. J. Chem. Phys., 55, 756 (1971).
- 88. Simons G. J. Chem. Phys., 60, 645 (1974).
- 89. Simons G., Martin J. J. Chem. Phys., 62, 4799 (1975).
- Манаков Н.Л., Овсянников В.Д., Рапопорт Л.П. Оптика и спектроскопия, 38, 206 (1975).
- 91. Манаков Н.Л., Мармо С.И., Файнштейн А.Г. *Теоретическая и математическая физика*, **79**, 44 (1984); *ЖЭТФ*, **91**, 51 (1986).
- 92. Крыловецкий А.А., Манаков Н.Л., Мармо С.И. ЖЭТФ, **119**, 45 (2001).
- 93. Manakov N.L., Maquet A., Marmo S.I., Szymanowski C. Phys. Lett.

- A, 237, 234 (1998).
- Деревянко А., Джонсон У.Р., Овсянников В.Д., Пальчиков В.Г., Планте Д.Р., фон Оппен Г. ЖЭТФ, 115, 494 (1999).
- Derevianko A., Johnson W.R., Ovsiannikov V.D., Pal'chikov V.G., Plante D.R., von Oppen G. Proc. Int. Conf on Atomic Phys. (ICAP-98) (Winsor, Canada, 1999, p. 215).
- 96. Seaton M.J. Rep. Prog. Phys., 46, 167 (1983).
- Христенко С.В. Теоретическая и математическая физика, 22, 31 (1975).
- 98. Tachiev G., Froese Fischer C. J. Phys. B, 32, 586 (1999).
- 99. Chang T.N. Phys. Rev. A, 41, 4922 (1990).
- 100. Амусья М.Я., Черепков Н.А., Шапиро С.Г. ЖЭТФ, **63**, 889 (1972).
- Делоне Н.Б., Крайнов В.П., Шепелянский Д.Л. УФН, 140, 355 (1983).
- 102. Делоне Н.Б., Крайнов В.П. Атом в сильном световом поле (М.: Энергоатомиздат, 1984).
- 103. Pal'chikov V.G., Domnin Yu.S., Novoselov A.V. J. Opt. B: Quantum Semiclass., 5, S131 (2003).
- 104. Park C.Y., Yoon T.H. Phys. Rev. A, 68, 055401 (2003).
- 105. Porsev S.G., Rakhlina Yu.G., Kozlov M.G. Phys. Rev. A, 60, 2781 (1999).
- 106. Aymar M., Greene C.H., Lue-Koenig E. Rev. Mod. Phys., 68, 1014 (1996).
- 107. Takahashi Ү. Частное сообщение (2005).