

СВЧ РАДИАЦИОННЫЕ ПЕРЕХОДЫ МЕЖДУ ТРИПЛЕТНЫМИ РИДБЕРГОВСКИМИ СОСТОЯНИЯМИ АТОМОВ ЩЕЛОЧНОЗЕМЕЛЬНО-ПОДОБНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ГРУППЫ IIb (Zn, Cd, Hg) И ИТТЕРБИЯ Yb

А. А. Каменский ^{a*}, И. Л. Глухов ^a, А. С. Корнев ^a, Н. Л. Манаков ^a, В. Д. Овсянников ^{a,b},
В. Г. Пальчиков ^{b,c}

^a Воронежский государственный университет
394018, Воронеж, Россия

^b Федеральное государственное унитарное предприятие «ВНИИФТРИ»
141570, Менделеево, Московская обл., Россия

^c Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ
115409, Москва, Россия

Поступила в редакцию 14 марта 2024 г.,
после переработки 14 марта 2024 г.
Принята к публикации 2 мая 2024 г.

Определены численные значения квантовых дефектов, использованные для расчетов частот и матричных элементов дипольных радиационных переходов СВЧ-диапазона между триплетными ридберговскими состояниями n^3S_1 , n^3P_1 , n^3D_2 и n^3F_3 серий атомов группы IIb с большими значениями главных квантовых чисел $n > 20$. Результаты расчетов в рамках полуэмпирических методов теории квантового дефекта и модельного потенциала Фьюса аппроксимированы квадратичными полиномами. Коэффициенты полиномов табулированы вместе с численными значениями частот и матричных элементов и могут быть использованы для измерения напряженности полей по СВЧ-индуцированному расщеплению резонанса электромагнитно-индуцированной прозрачности, для разработки и планирования исследований характеристик СВЧ-излучения с использованием ридберговских атомов.

Статья представлена в рамках публикации материалов конференции
«Физика ультрахолодных атомов» (ФУХА-2023), Новосибирск, декабрь 2023 г.

DOI: 10.31857/S0044451024100055

1. ВВЕДЕНИЕ

Прецизионное измерение напряженности электрических полей сверхвысокочастотного (СВЧ) излучения на основе измерения спектроскопических характеристик радиационных переходов между ридберговскими состояниями атомов с большими значениями главных квантовых чисел n становится подробно изученной теоретически и детально разработанной экспериментально областью исследований в современной атомной и

молекулярной спектроскопии [1–13]. В этой же СВЧ спектральной области локализуются частоты радиационных переходов между ридберговскими состояниями атомов. Вместе с частотами радиационных переходов быстро убывают пропорционально $n^{-\alpha}$, где $\alpha \geq 3$, и ширины ридберговских уровней энергии [14]. Благодаря практически бесконечному набору ридберговских состояний в любом атоме с отчетливо выраженными сериями одноэлектронных связанных состояний всегда существует возможность найти такие ридберговские уровни, частота перехода между которыми строго совпадает с заданной частотой СВЧ-излучения ω_{Ryd} . Под действием резонансного поля происходит расщепление ридберговских уровней, пропорциональное частоте

* E-mail: san40@bk.ru

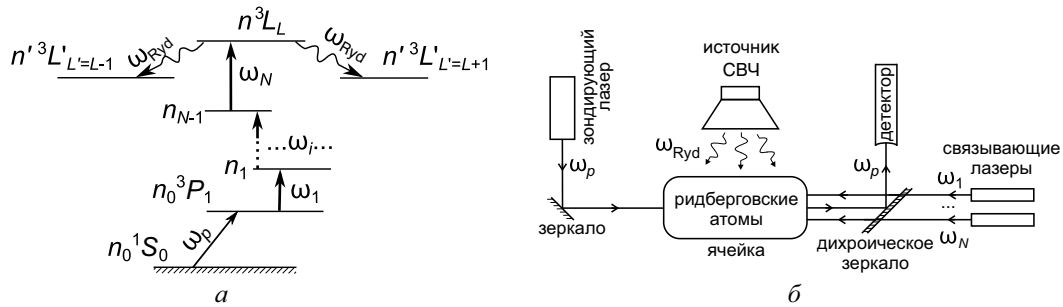


Рис. 1. *a* — Энергетические уровни для N -фотонного возбуждения триплетного ридберговского nL -состояния и расщепления ЭИП-резонанса СВЧ-излучением, резонансным переходу $nL \rightarrow n'L'$ ($L' = L \pm 1$). *б* — Зондирующее лазерное излучение (ω_p), пучки связывающего излучения (на частотах $\omega_1, \dots, \omega_N$) и СВЧ-излучение (ω_{Ryd})

Раби $\Omega = F\mathcal{R}$ — произведению напряженности СВЧ электрического поля F и матричного элемента $\mathcal{R}$ радиационного перехода [10–13, 15]. Такое расщепление, трансформируемое в расщепление резонанса для эффекта электромагнитно-индуцированной прозрачности (ЭИП) сильно поглощаемого излучения, зондирующего резонансный переход из основного в первое возбужденное состояние, может быть измерено с большой точностью (см. рис. 1).

Таким образом, измерение напряженности электрического поля излучения СВЧ-диапазона (микроволнового, миллиметрового, сантиметрового, радиочастотного) может быть основано на измерении расщепления частоты резонанса эффекта ЭИП резонансно поглощаемой атомами волны оптического диапазона. Данный эффект, хорошо изученный и эффективно используемый для метрологии СВЧ-полей в атомах щелочных элементов группы I [1–11], может наблюдаться также и в двухвалентных атомах щелочноземельных и щелочноземельно-подобных элементов групп IIa и IIb. К настоящему времени выполнены подробные расчеты матричных элементов электродипольных радиационных переходов между дублетными состояниями атомов щелочных металлов [10, 11], а также между синглетными состояниями атомов щелочноземельно-подобных элементов [12, 13].

Следует заметить, что рассчитанные наборы частот радиационных переходов во всех атомах из перечисленных выше групп, а также соответствующих матричных элементов предоставляют необходимую информацию не только для выбора, но и для оценки эффективности использования выбранного перехода в конкретной метрологической задаче.

Наряду с синглетными состояниями, все двухвалентные элементы обладают и триплетными состояниями, обеспечивающими дополнительные к син-

глетным наборы частот радиационных переходов в СВЧ-диапазоне [16]. Кроме того, первое возбужденное состояние двухвалентного атома $n_0s n_0p(^3P_1)$, обеспечивающее резонансное поглощение излучения зондирующего лазера на частоте интеркомбинационного перехода из основного состояния $n_0s^2(^1S_0)$, является триплетным. Частота излучения такого частично запрещенного по полному спину электронной оболочки перехода практически во всех атомах групп IIa и IIb примерно в полтора раза ниже частоты полностью разрешенного перехода с возбуждением синглетного состояния $n_0s n_0p(^1P_1)$ (см. последние строки табл. 1). В этой связи результаты численных расчетов частот и амплитуд радиационных переходов между триплетными ридберговскими состояниями атомов группы IIb, представленные в настоящей работе, существенно дополняют полученную в [10–13] информацию, необходимую для разработки оптических методов прецизионного измерения характеристик СВЧ-излучения.

Наряду с задачами метрологии характеристик СВЧ-излучения, рассчитанные значения частот и амплитуд радиационных переходов между ридберговскими состояниями атомов могут быть востребованы и в задачах разработки и оптимизации цифровых информационных и коммуникационных радиочастотных систем на основе ридберговских атомов [7, 9].

Работа построена следующим образом.

В разд. 2 рассчитаны численные значения квантовых дефектов для серий n^3S_1 , n^3P_1 , n^3D_2 , n^3F_3 триплетных ридберговских состояний на основе имеющихся литературных данных для уровней энергий щелочноземельно-подобных атомов элементов группы IIb (Zn, Cd, Hg) и иттербия Yb. Результаты численных расчетов согласуются с имеющимися данными современной литературы.

В разд. 3 представлены таблицы частот дипольных переходов между наиболее близкими по энергии состояниями.

В разд. 4 приводятся аналитические выражения для амплитуд дипольно-разрешенных радиационных переходов между триплетными ридберговскими состояниями через радиальные матричные элементы.

В разд. 5 обсуждаются методы расчета и даются таблицы численных значений радиальных матричных элементов электродипольных переходов между ридберговскими состояниями.

Обсуждение полученных результатов и заключительные замечания представлены в разд. 6.

2. КВАНТОВЫЕ ДЕФЕКТЫ ТРИПЛЕТНЫХ РИДБЕРГОВСКИХ СОСТОЯНИЙ АТОМОВ ГРУППЫ ПЬ И ИТТЕРБИЯ

В настоящее время имеются обширные базы данных, содержащие численные значения энергий атомных состояний [17, 18], необходимые для расчета частот радиационных СВЧ-переходов между ридберговскими уровнями. Современные лазерные установки позволяют получать такие высоковозбужденные состояния методами спектроскопии многофотонных переходов [19, 20]. Состояния n^3F_3 , n^3D_2 , n^3P_1 и n^3S_1 являются наиболее подходящими для наблюдения СВЧ-переходов в атомах щелочноземельно-подобных металлов. В окрестности точки сгущения энергий состояний n^3L_J всегда можно найти такие состояния $n'^3L'_J$, для которых частоты переходов $nL \rightarrow n'L'$ лежат в тера-, гига- и мегагерцевом диапазоне. Они определяются в соответствии с $\omega_{Ryd} = E_{nL} - E_{n'L'}$, где E_{nL} — энергия связи ридберговского состояния n^3L_J , которую удобно представить соотношением [21–23]

$$E_{nL} = I_{pA} - \frac{Ry_A}{(n - \mu_{nL})^2}. \quad (1)$$

Здесь I_{pA} и Ry_A — соответственно энергия ионизации основного состояния атома и постоянная Ридберга, учитывающая конечную массу атома M_A ; $Ry_A = Ry_\infty / (1 + M_A^{-1})$, $Ry_\infty = 109737.315685 \text{ см}^{-1}$ — универсальная постоянная Ридберга (для $M_A = \infty$), μ_{nL} — квантовый дефект состояния n^3L_J . В настоящей работе мы рассматриваем состояния $n^3L_{J=L}$ ($L > 0$) и $n^3S_{J=1}$.

Точность значений энергий серии E_{nL} в базах данных для энергетических уровней [17, 18] ограничена восемью–девятью десятичными знаками. С ростом n расстояние между соседними уровнями

уменьшается пропорционально n^{-3} . Поэтому точность ω_{Ryd} снижается до 3–4 знаков вследствие взаимного уничтожения старших разрядов при вычитании. Для экстраполяции табличных данных указанная проблема решается параметризацией квантового дефекта μ_{nL} формулой Ридберга – Ритца [21–23]

$$\mu_{nL} = \sum_{q=0}^{q_{max}} \frac{\mu_{2q}}{(n - \mu_0)^{2q}}, \quad (2)$$

где константы μ_{2q} получаются интерполяцией значений μ_{nL} , вычисленных из табличных энергий E_{nL} в соответствии с (1). На практике, как правило, $q_{max} \leq 2$.

Определению констант I_{pA} , Ry_A и μ_{2q} посвящено достаточно большое количество теоретических и экспериментальных исследований, предоставляющих энергии связанных состояний щелочноземельно-подобных атомов. В табл. 1 приведены наиболее надежные значения параметров формул (1), (2), рассчитанных из численных значений энергий соответствующих серий триплетных состояний, представленных в базах данных [17, 18]. Квантовые дефекты вычислены по формуле (1), а константы μ_{2q} получены стандартными методами полиномиальной интерполяции. Как следует из численных значений параметров μ_{2q} , при $n > 15$ основной вклад в сумму (2) дают слагаемые с малыми значениями q , главным образом с $q = 0, 1$.

Наряду с энергией ионизации I_{pA} , в последней строке табл. 1 приведены энергии первых возбужденных состояний ЕхсрА: триплетного 3P_1 и синглетного 1P_1 , определяющих частоты резонансно поглощаемых нормальными атомами излучений. Именно эти частоты могут быть выбраны в качестве частот зондирующего (пробного) излучения ω_p для измерения напряженности электрического поля СВЧ-излучения по расщеплению резонанса эффекта ЭИП (см. также рис. 1). При этом более низкие частоты возбуждений триплетных состояний могут оказаться более доступными и удобными для зондирования резонансных переходов, нежели частоты возбуждений состояний синглетных.

3. ЧАСТОТЫ РАДИАЦИОННЫХ СВЧ-ПЕРЕХОДОВ МЕЖДУ ТРИПЛЕТНЫМИ РИДБЕРГОВСКИМИ СОСТОЯНИЯМИ АТОМОВ ГРУППЫ ПЬ И ИТТЕРБИЯ

Данные табл. 1 позволяют рассчитать по формуле (1) частоты резонансных СВЧ-переходов между триплетными ридберговскими состояниями рас-

Таблица 1. Численные значения констант μ_{2q} в формуле Ридберга – Ритца (2) для триплетных ридберговских состояний атомов группы IIb и иттербия. Также указаны значения постоянной Ридберга R_{y_A} для атома A , потенциала ионизации I_{p_A} , энергии возбуждения резонансного 1P_1 и метастабильного 3P_1 состояний Ехср_A

Серия n^3L_J	μ_{2q}	Атом (основное состояние)			
		Zn ($3d^{10}4s^2$)	Cd ($4d^{10}5s^2$)	Hg ($6s^2$)	Yb ($6s^2$)
n^3S_1	μ_0	2.716551	3.65762	4.69743	4.44242
	μ_2	0.052543	0.221535	0.192163	0.249107
	μ_4	3.45004	0.908956	1.77218	1.98376
n^3P_1	μ_0	2.19734	3.1352	4.21193	3.95192
	μ_2	0.18688	0.791835	−1.17647	−2.16689
	μ_4	8.7502	14.1379	43.8889	11.6313
n^3D_2	μ_0	1.09071	2.08441	3.06532	2.75098
	μ_2	−0.246526	−0.081925	−0.939772	−0.70516
	μ_4	3.56537	4.48705	24.1838	37.3111
n^3F_3	μ_0	0.022242	0.0357423	1.08904	1.06520
	μ_2	0.31213	0.154961	−11.0497	0.304355
	μ_4	−9.51844	−7.15522	397.922	7.92697
$R_{y_A}, \text{см}^{-1}$		109736.3949	109736.7802	109737.0156	109736.9677
$I_{p_A}, \text{см}^{-1}$		75769.31	72540.05	84184.15	50443.0704
$\text{Ехср}_A, \text{см}^{-1}$	3P_1	32501.399	30656.087	39412.237	17992.007
	1P_1	46745.4032	43692.384	54068.6829	25068.222

сма триваемых атомов с неограниченно большими значениями главных квантовых чисел. Для частоты перехода $n^3L_J \rightarrow n'^3L'_{J'}$ в соответствии с (1) можно записать зависимость от эффективных главных квантовых чисел начального $\nu_{nL} = n - \mu_{nL}$ и конечного $\nu_{n'L'} = n' - \mu_{n'L'}$ ридберговских состояний в виде

$$\Delta E_{nLL'} \equiv E_{nL} - E_{n'L'} =$$
$$= R_{y_A} \frac{(\nu_{nL} - \nu_{n'L'}) (\nu_{nL} + \nu_{n'L'})}{\nu_{nL}^2 \nu_{n'L'}^2}. \quad (3)$$

Главные квантовые числа n и n' могут совпадать или отличаться друг от друга на одну–две единицы: $n' = n + \delta$, $\delta = 0, \pm 1, \pm 2$ (см. табл. 2 – 5). Значения квантовых дефектов μ_{nL} и $\mu_{n'L'}$ вычисляются в соответствии с (2) по данным из табл. 1.

Частоты некоторых переходов между триплетными ридберговскими состояниями атомов Zn, Cd, Hg и Yb даны в табл. 2 – 5. С помощью полиномиальной интерполяции рассчитанных значений частот можно получить асимптотическую аппроксимационную формулу частоты перехода как функцию

главного квантового числа n в виде

$$\Delta E_n = \frac{d_0}{n^3} \left(1 + \frac{d_1}{n} + \frac{d_2}{n^2} \right). \quad (4)$$

Значения коэффициентов d_0 , d_1 и d_2 , найденные в процессе интерполяции вычисленных частот (3) для переходов между состояниями с $n = 20, 60, 120$, также представлены в табл. 2 – 5.

4. АМПЛИТУДА ДИПОЛЬНОГО
СВЧ-ПЕРЕХОДА МЕЖДУ ТРИПЛЕТНЫМИ
СОСТОЯНИЯМИ ДВУХВАЛЕНТНОГО
АТОМА

Матричный элемент одноэлектронного дипольного перехода между триплетными ридберговскими состояниями $\mathcal{R}_{nL'L}^{(\tau,M)} = \langle n'^3L'_{J'M+\tau} | x_\tau | n^3L_{JM} \rangle$ можно вычислить стандартными методами атомной спектроскопии [24, 25]. Магнитное квантовое число M здесь задает проекцию вектора полного углового момента $\mathbf{J}$ на ось z . Интегрирование по угловым переменным можно провести методами квантовой теории углового момента [24], в результате чего матрич-

Таблица 2. Частоты электродипольных переходов (в ГГц) между триплетными ридберговскими состояниями в атомах цинка: $\Delta E_{nSP} = E_n {}^3S_1 - E_{(n-1)} {}^3P_1$, $\Delta E_{nPS} = E_n {}^3P_1 - E_n {}^3S_1$, $\Delta E_{nPD} = E_{(n+2)} {}^3P_1 - E_n {}^3D_2$, $\Delta E_{nDP} = E_n {}^3D_2 - E_{(n+1)} {}^3P_1$, $\Delta E_{nFD} = E_{(n-1)} {}^3F_3 - E_n {}^3D_2$

n	ΔE_{nSP}	ΔE_{nPS}	ΔE_{nPD}	ΔE_{nDP}	ΔE_{nFD}
20	640.070	632.508	810.333	105.887	64.8614
50	30.3914	31.7879	48.8874	6.02658	3.82946
100	3.46163	3.68087	5.99304	0.726529	0.464693
150	0.995017	1.06362	1.76426	0.212746	0.136290
200	0.413501	0.443158	0.741898	0.0892297	0.0572019
Параметры интерполяционной формулы (4)					
d_0 , ТГц	3171.94	3420.87	5878.12	701.845	450.433
d_1	8.32284	7.09337	1.92939	3.35842	3.19838
d_2	79.2793	49.8018	2.55069	15.6123	-3.17404

Таблица 3. То же, что в табл. 2, но для атомов кадмия: $\Delta E_{nSP} = E_n {}^3S_1 - E_{(n-1)} {}^3P_1$, $\Delta E_{nPS} = E_n {}^3P_1 - E_n {}^3S_1$, $\Delta E_{nPD} = E_{(n+2)} {}^3P_1 - E_n {}^3D_2$, $\Delta E_{nDP} = E_n {}^3D_2 - E_{(n+1)} {}^3P_1$, $\Delta E_{nFD} = E_{(n-2)} {}^3F_3 - E_n {}^3D_2$

n	ΔE_{nSP}	ΔE_{nPS}	ΔE_{nPD}	ΔE_{nDP}	ΔE_{nFD}
20	757.070	748.542	1002.97	61.6292	54.7512
50	32.0868	33.9455	55.1076	3.06556	2.90036
100	3.54073	3.81241	6.55676	0.356898	0.340679
150	1.00761	1.09086	1.91135	0.103396	0.0988761
200	0.416684	0.452312	0.799833	0.0431419	0.0412848
Параметры интерполяционной формулы (4)					
d_0 , ТГц	3165.27	3450.72	6247.51	335.243	320.377
d_1	10.1984	9.39231	4.76317	5.69431	6.08108
d_2	161.409	106.308	18.4637	74.3851	25.2472

Таблица 4. То же, что в табл. 2, но для атомов ртути: $\Delta E_{nSP} = E_n {}^3S_1 - E_{(n-1)} {}^3P_1$, $\Delta E_{nPS} = E_n {}^3P_1 - E_n {}^3S_1$, $\Delta E_{nPD} = E_{(n+2)} {}^3P_1 - E_n {}^3D_2$, $\Delta E_{nDP} = E_n {}^3D_2 - E_{(n+1)} {}^3P_1$, $\Delta E_{nFD} = E_{(n-1)} {}^3F_3 - E_n {}^3D_2$

n	ΔE_{nSP}	ΔE_{nPS}	ΔE_{nPD}	ΔE_{nDP}	ΔE_{nFD}
20	983.938	859.032	1074.09	200.241	1247.37
50	36.9910	33.8576	52.8664	9.36689	60.5000
100	3.94162	3.66356	6.08440	1.06130	6.95468
150	1.10924	1.03623	1.75474	0.304517	2.00584
200	0.456198	0.427252	0.730418	0.126435	0.835038
Параметры интерполяционной формулы (4)					
d_0 , ТГц	3434.87	3232.04	5624.75	967.457	6438.80
d_1	11.8590	10.9580	7.56225	8.82170	7.24673
d_2	279.478	231.357	59.8187	85.8910	74.99121

Таблица 5. То же, что в табл. 2, но для атомов *иттербия*: $\Delta E_{nSP} = E_n {}^3S_1 - E_{(n-1)} {}^3P_1$, $\Delta E_{nPS} = E_n {}^3P_1 - E_n {}^3S_1$, $\Delta E_{nDP} = E_n {}^3D_2 - E_{(n+1)} {}^3P_1$, $\Delta E_{nDF} = E_n {}^3D_2 - E_{(n-2)} {}^3F_3$, $\Delta E_{nFD} = E_{(n-1)} {}^3F_3 - E_n {}^3D_2$

n	ΔE_{nSP}	ΔE_{nPS}	ΔE_{nDP}	ΔE_{nDF}	ΔE_{nFD}
20	916.114	833.140	254.977	418.199	825.765
50	35.9728	33.6656	12.5720	19.8255	41.8361
100	3.87086	3.67235	1.44086	2.25963	4.85389
150	1.09252	1.04147	0.414816	0.649735	1.40338
200	0.449955	0.429974	0.172507	0.270064	0.584881
Параметры интерполяционной формулы (4)					
d_0 , ТГц	3387.35	3261.28	1322.76	2073.50	4517.44
d_1	11.9367	10.4479	8.44738	8.12900	6.98857
d_2	226.710	208.528	47.8908	82.8190	45.1730

ный элемент $\mathcal{R}_{nL'L}^{(\tau,M)}$ будет выражен через радиальный матричный элемент $R_{nLL'} = \langle n'L'|r|nL \rangle$ следующим образом (см. [24], разд. 13.1, формула (40)):

$$\mathcal{R}_{nL'L}^{(\tau,M)} = (-1)^{J+L'} \sqrt{2J+1} C_{JM\ 1\tau}^{J'M+\tau} \times \left\{ \begin{matrix} 1 & L' & L \\ 1 & J & J' \end{matrix} \right\} \langle L' \| C_1 \| L \rangle \langle n'L' | r | nL \rangle. \quad (5)$$

Здесь $\tau = 0$ для π -поляризации, $\tau = \pm 1$ для σ -поляризации излучения СВЧ;

$$\begin{aligned} \langle L' \| C_1 \| L \rangle &= \sqrt{2L+1} C_{L0\ 10}^{L'0} = \\ &= \begin{cases} -\sqrt{L} & \text{при } L' = L-1, \\ \sqrt{L+1} & \text{при } L' = L+1 \end{cases} \end{aligned}$$

— приведенный матричный элемент модифицированной сферической функции [24]

$$C_{q\tau}(\hat{\mathbf{r}}) = \sqrt{\frac{4\pi}{2q+1}} Y_{q\tau}(\hat{\mathbf{r}}), \quad \hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}/r.$$

В формуле (5) использованы стандартные обозначения для коэффициентов Клебша – Гордана и 6j-символов.

Амплитуду СВЧ-перехода (5) удобно представить в виде произведения углового множителя $({}^3L'_{J'M+\tau} | {}^3L_{JM})$ и радиального матричного элемента:

$$\mathcal{R}_{nL'L}^{(\tau,M)} = ({}^3L'_{J'M+\tau} | {}^3L_{JM}) R_{nLL'}. \quad (6)$$

В частности, при $L, L' > 0$, $J = L$, $J' = L'$ в случае π -переходов ($\tau = 0$)

$$\begin{aligned} ({}^3L'_{J'M} | {}^3L_{JM}) &= \\ &= A_{L'L} \sqrt{L'(L'+1) + L(L+1) - 2M^2}; \end{aligned}$$

в случае σ -переходов ($\tau = \pm 1$)

$$\begin{aligned} ({}^3L'_{J'M\pm 1} | {}^3L_{JM}) &= A_{L'L} (L' - L) \times \\ &\times \sqrt{[L' \pm M(L' - L)][L' + 1 \pm M(L' - L)]}. \end{aligned}$$

Здесь

$$A_{L'L} = \frac{L'(L'+1) + L(L+1) - 2}{\sqrt{8L'L(L'+1)(L+1)(2L'+1)(2L+1)}},$$

$$L' = L \pm 1.$$

Однако в случае $L = 0$, $M = 0, \pm 1$, $J' = L' = 1$ результаты различаются только знаками. Для π -переходов

$$({}^3P_{1M} | {}^3S_{1M}) = -\text{sign}(M)/\sqrt{6};$$

для σ -переходов

$$({}^3P_{1M\pm 1} | {}^3S_{1M}) = \pm 1/\sqrt{6}.$$

Отметим, что при $|M| > J$ или при $|M + \tau| > J'$ угловой множитель обращается в нуль.

5. РАДИАЛЬНЫЕ МАТРИЧНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ ЭЛЕКТРОДИПОЛЬНЫХ ПЕРЕХОДОВ МЕЖДУ ТРИПЛЕТНЫМИ РИДБЕРГОВСКИМИ СОСТОЯНИЯМИ АТОМОВ ГРУППЫ ПЬ И ИТТЕРБИЯ

Основной вклад в численное значение радиального матричного элемента $R_{nLL'}$ в амплитуде электродипольного перехода (6) определяется дипольным переходом ридберговского электрона между состояниями с близкими значениями главных квантовых чисел $n' = n + \delta$, $\delta = 0, \pm 1, \pm 2$ и смежными значениями орбитальных квантовых чисел $L' = L \pm 1$.

Таблица 6. Численные значения (в атомных единицах) и коэффициенты аппроксимационного полинома (7) для радиальных матричных элементов электродипольных переходов между триплетными ридберговскими состояниями в атомах цинка. Соответствующие частоты переходов и обозначения представлены в табл. 2

n	R_{nSP}	R_{nPS}	R_{nPD}	R_{nDP}	R_{nFD}
20	320.046	340.454	163.305	528.249	533.487
50	2484.06	2461.60	1134.41	3543.21	3579.62
100	10623.2	10311.1	4695.57	14489.5	14623.8
150	24427.9	23553.4	10685.1	32837.4	33127.3
200	43898.3	42188.4	19102.9	58586.9	59090.2
Коэффициенты аппроксимационного полинома (7)					
a_0	10.5604	4.91810	1.57102	−1.409802	−5.27257
a_1	−7.18628	−4.79438	−1.62659	−3.12398	−2.89512
a_2	1.13312	1.07856	0.485665	1.48033	1.49186

Таблица 7. То же, что в табл. 6, но для атомов кадмия. Соответствующие частоты переходов представлены в табл. 3

n	R_{nSP}	R_{nPS}	R_{nPD}	R_{nDP}	R_{nFD}
20	285.639	304.698	119.400	477.824	477.918
50	2394.24	2356.27	892.355	3432.88	3439.92
100	10458.6	10071.1	3780.19	14340.1	14360.0
150	24210.8	23155.4	8667.56	32724.9	32759.6
200	43650.8	41609.1	15554.5	58587.3	58638.5
Коэффициенты аппроксимационного полинома (7)					
a_0	17.6801	10.8922	4.06868	3.28447	−0.758824
a_1	−9.34697	−6.78693	−2.22971	−6.18416	−5.98064
a_2	1.13756	1.07389	0.399909	1.49552	1.49589

Таблица 8. То же, что в табл. 6, но для атомов ртути. Соответствующие частоты переходов представлены в табл. 4

n	R_{nSP}	R_{nPS}	R_{nPD}	R_{nDP}	R_{nFD}
20	239.404	277.727	147.26	419.321	121.457
50	2181.12	2356.78	1181.69	3226.76	860.164
100	9758.54	10328.6	5101.37	13757.7	3532.73
150	22762.9	23933.2	11765.3	31603.4	8003.65
200	41194.1	43170.7	21173.4	56763.9	14272.8
Коэффициенты аппроксимационного полинома (7)					
a_0	30.6019	17.8696	6.24588	10.6045	−14.0383
a_1	−11.2587	−9.55068	−3.93331	−8.82462	−0.499583
a_2	1.08538	1.12658	0.548845	1.46295	0.359672

Таблица 9. То же, что в табл. 6, но для атомов иттербия. Соответствующие частоты переходов представлены в табл. 5

n	R_{nSP}	R_{nPS}	R_{nDP}	R_{nDF}	R_{nFD}
20	251.340	283.722	427.376	365.051	282.489
50	2222.69	2367.39	3202.00	2903.13	1936.43
100	9878.76	10318.7	13550.1	12473.0	7974.70
150	22997.8	23868.0	31052.8	28717.4	18115.45
200	41579.7	43015.1	55710.2	51636.4	32358.7
Коэффициенты аппроксимационного полинома (7)					
a_0	29.5584	13.9154	8.51495	7.89387	0.634271
a_1	-10.7667	-8.90942	-7.67661	-8.84123	-2.30882
a_2	1.09259	1.11958	1.43092	1.33492	0.820495

Для описания начального и конечного состояний ридберговского электрона наиболее эффективными и удобными являются кулоноподобные волновые функции теории квантового дефекта (ТКД) [21], а также волновые функции одноэлектронного модельного потенциала Фьюса (МПФ) [26]. В этих методах радиальные волновые функции выражаются через полиномы от радиальной переменной ридберговского электрона. Аналитические выражения для волновых функций и радиальных матричных элементов $R_{nLL'}$ в ТКД и МПФ подходах приведены в работе [11]. Различие результатов численных расчетов с использованием волновых функций ТКД и МПФ при $20 < n < 50$ не превышает 1 – 3%, что не выходит за рамки погрешностей полуэмпирических методов ТКД и МПФ, основанных на использовании численных значений энергий атомных уровней. С ростом главных квантовых чисел различие результатов ТКД и МПФ быстро уменьшается, доходя до 0.1% при $n > 150$.

Численные значения радиальных матричных элементов дипольных СВЧ-переходов $R_{nLL'}$, найденные с использованием волновых функций ТКД, для атомов цинка, кадмия, ртути и иттербия приведены в табл. 6 – 9 в диапазоне изменения главных квантовых чисел n от 20 до 200. Зависимость $R_{nLL'}$ от n можно аппроксимировать квадратичным полиномом вида

$$R_{nLL'} = a_0 + a_1n + a_2n^2. \tag{7}$$

Коэффициенты a_0 , a_1 и a_2 этого полинома, полученные методом полиномиальной интерполяции рассчитанных значений матричного элемента $R_{nLL'}$ при $n = 50, 100, 150$, также приведены в табл. 6 – 9.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассчитанные значения частот радиационных переходов между триплетными ридберговскими состояниями атомов щелочноземельно-подобных элементов группы IIb и иттербия существенно расширяют базу данных о ридберговских атомах. Таблицы 2 – 5 для частот радиационных переходов предоставляют новую информацию о возможностях практического использования ридберговских атомов для исследований, направленных на разработку новых методов метрологии полей радиочастотного и микроволнового диапазонов.

Результаты выполненных в настоящей работе расчетов частот и амплитуд радиационных переходов между триплетными ридберговскими состояниями атомов щелочноземельно-подобных элементов группы IIb и иттербия предоставляют новую информацию о спектрах ридберговских состояний этих атомов. Эта информация может быть полезна для будущего использования ридберговских атомов не только в метрологии СВЧ-излучения, но и для создания новых информационно-коммуникационных систем на основе источников микрометрового, миллиметрового и сантиметрового излучения, работающих на частотах радиационных переходов между ридберговскими состояниями атомов. Для оценки эффективности таких переходов может быть использовано выражение (7) с коэффициентами a_0 , a_1 и a_2 из табл. 6 – 9, которое воспроизводит численные значения радиальных матричных элементов радиационных переходов в области главных квантовых чисел n от 15 до 500 с относительной погрешностью не более 0.1%.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках Госзадания по проекту FZGU-2023-0007.

ЛИТЕРАТУРА

1. J. A. Sedlacek, A. Schwettmann, H. Kübler, R. Löw, T. Pfau, and J. P. Shaffer, *Microwave Electrometry with Rydberg Atoms in a Vapour Cell Using Bright Atomic Resonances*, Nat. Phys. **8**, 819 (2012).
2. C. L. Holloway, J. A. Gordon, S. Jefferts, A. Schwarzkopf, D. A. Anderson, S. A. Miller, N. Thaicharoen, and G. Raithel, *Broadband Rydberg Atom-Based Electric-Field Probe for SI-Traceable, Self-Calibrated Measurements*, IEEE Trans. Antennas Propag. **62**, 6169 (2014).
3. H. Fan, S. Kumar, J. Sedlacek, H. Kübler, Sh. Karimkashi, and J. P. Shaffer, *Atom Based RF Electric Field Sensing*, J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **48**, 202001 (2015).
4. C. L. Holloway, M. T. Simons, J. A. Gordon, J. A. Gordon, P. F. Wilson, C. M. Cooke, D. A. Anderson, and G. Raithel, *Atom-Based RF Electric Field Metrology: from Self-Calibrated Measurements to Subwavelength and Near-Field Imaging*, IEEE Trans. Electromagn. Compat. **59**, 717 (2017).
5. D. A. Anderson and G. Raithel, *Continuous-Frequency Measurements of High-Intensity Microwave Electric Fields with Atomic Vapor Cells*, Appl. Phys. Lett. **111**, 053504 (2017).
6. Y. Jiao, L. Hao, X. Han, S. Bai, G. Raithel, J. Zhao, and S. Jia, *Atom-Based Radio-Frequency Field Calibration and Polarization Measurement Using Cesium nD_J Floquet States*, Phys. Rev. Appl. **8**, 014028 (2017).
7. Z. Song, Z. Feng, X. Liu, D. Li, H. Zhang, J. Liu, and L. Zhang, *Quantum-Based Determination of Antenna Finite Range Gain by Using Rydberg Atoms*, IEEE Antennas Wireless Propag. Lett. **16**, 1589 (2017).
8. M. T. Simons, J. A. Gordon, and C. L. Holloway, *Fiber-Coupled Vapor Cell for a Portable Rydberg Atom-Based Radio Frequency Electric Field Sensor*, Appl. Opt. **57**, 6456 (2018).
9. Z. Song, H. Liu, X. Liu, W. Zhang, H. Zou, J. Zhang, and J. Qu, *Rydberg-Atom-Based Digital Communication Using a Continuously Tunable Radio-Frequency Carrier*, Opt. Express **27**, 8848 (2019).
10. Е. Ф. Стельмашенко, О. А. Клезович, В. Н. Барышев, В. А. Тищенко, И. Ю. Блинов, В. Г. Пальчиков, В. Д. Овсянников, *Измерение напряженности электрического поля СВЧ-излучения на частоте радиационного перехода между ридберговскими состояниями атомов ^{85}Rb* , Опт. и спектр. **128**, 1063 (2020) [E. F. Stelmashenko, O. A. Klezovich, V. N. Baryshev, V. A. Tishchenko, I. Yu. Blinov, V. G. Palchikov, and V. D. Ovsyannikov, *Measuring the Electric Field Strength of Microwave Radiation at the Frequency of the Radiation Transition between Rydberg States of Atoms ^{85}Rb* , Opt. Spectrosc. **128**, 1067 (2020)].
11. V. D. Ovsyannikov, V. G. Palchikov, and I. L. Glukhov, *Microwave Field Metrology Based on Rydberg States of Alkali-Metal Atoms*, Photonics **9**, 635 (2022).
12. И. Л. Глухов, А. А. Каменский, В. Д. Овсянников, В. Г. Пальчиков, *Прецизионная спектроскопия ридберговских состояний щелочно-земельных атомов для измерения характеристик СВЧ-излучения*, ЖЭТФ **164**, 193 (2023) [I. L. Glukhov, A. A. Kamenski, V. D. Ovsyannikov, and V. G. Pal'chikov, *Precision Spectroscopy of Rydberg States in Alkaline Earth Atoms for Millimeter-Wave Radiation Measurement*, ЖЭТФ **137**, 169 (2023)].
13. I. L. Glukhov, A. A. Kamenski, V. D. Ovsyannikov, and V. G. Palchikov, *Precision Spectroscopy of Radiation Transitions between Singlet Rydberg States of the Group IIb and Yb Atoms*, Photonics **10**, 1153 (2023).
14. Г. Бете, Э. Солпитер, *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами*, ГИФМЛ, Москва (1960) [H. A. Bethe and E. E. Salpeter, *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms*, Springer-Verlag, Berlin – Göttingen – Heidelberg, Germany (1957)].
15. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика (нерелятивистская теория)*, Физматлит, Москва (2021), §§ 39, 40 [L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics, Nonrelativistic Theory*, Pergamon Press, Oxford, UK (1989), Secs. 39, 40].
16. Y.-Li. Zhou, D. Yan, and W. Li, *Rydberg Electromagnetically Induced Transparency and Absorption of Strontium Triplet States in a Weak Microwave Field*, Phys. Rev. A **105**, 053714 (2022).
17. A. Kramida, Yu. Ralchenko, J. Reader, and NIST ASD Team (2023). NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.11), [Online]. Available:

- <https://physics.nist.gov/asd> [2024, February 16]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.
18. V. V. Kazakov, V. G. Kazakov, V. S. Kovalev, O. I. Meshkov, and A. S. Yatsenko, *Electronic Structure of Atoms: Atomic Spectroscopy Information System*, Phys. Scripta **92**, 105002 (2017).
 19. A. K. Mohapatra, T. R. Jackson, and C. S. Adams, *Coherent Optical Detection of Highly Excited Rydberg States Using Electromagnetically Induced Transparency*, Phys. Rev. Lett. **98**, 113003 (2007).
 20. F. B. Dunning, T. C. Killian, S. Yoshida, and J. Burgdörfer, *Recent Advances in Rydberg Physics Using Alkaline-Earth Atoms*, J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **49**, 112003 (2016).
 21. M. J. Seaton, *Quantum Defect Theory*, Rep. Prog. Phys. **46**, 167 (1983).
 22. W. C. Martin, *Series Formulas for the Spectrum of Atomic Sodium* (Na I), J. Opt. Soc. Amer. **70**, 784 (1980).
 23. F. Robicheaux, *Calculations of Long Range Interactions for ^{87}Sr Rydberg States*, J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **52**, 244001 (2019).
 24. Д. А. Варшалович, А. Н. Москалев, В. К. Херсонский, *Квантовая теория углового момента*, Наука, Ленинград (1975) [D. A. Varshalovich, A. N. Moskalev, and V. K. Khersonskii, *Quantum Theory of Angular Momentum: Irreducible Tensors, Spherical Harmonics, Vector Coupling Coefficients, 3nj Symbols*, World Scientific, Singapore (1988)].
 25. И. И. Собельман, *Введение в теорию атомных спектров*, ГИФМЛ, Москва (1963) [I. I. Sobelman, *An Introduction to the Theory of Atomic Spectra*, Pergamon Press, London, UK (1972)].
 26. N. L. Manakov, V. D. Ovsiannikov, and L. P. Rapoport, *Atoms in a Laser Field*, Phys. Rep. **141**, 320 (1986).