

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
"ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ"

На правах рукописи

Никитина Елизавета Андреевна

**Оптические свойства ридберговских ионов
щелочноземельных элементов**

01.04.02 – Теоретическая физика

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Научный руководитель

д. ф.-м. н., проф.

Овсянников Виталий Дмитриевич

Воронеж – 2016

Оглавление

Список основных обозначений и аббревиатур	4
Введение	5
Глава 1. Влияние теплового излучения на возбужденное энергетическое состояние иона	15
1.1. Естественная ширина и время жизни возбужденного уровня	16
1.2. Тепловой сдвиг и уширение уровня	18
1.3. Выводы к первой главе	24
Глава 2. Полуэмпирические методы численных расчетов амплитуд радиационных переходов в ионах группы IIa	26
2.1. Метод квантового дефекта	28
2.2. Теория псевдопотенциала	34
2.3. Метод модельного потенциала Фьюса	37
2.4. Суммы сил осцилляторов и первых моментов сил осцилляторов	40
2.5. Результаты численных расчетов времен жизни энергетических уровней ионов группы IIa	46
2.6. Выводы ко второй главе	59
Глава 3. Асимптотические аппроксимации для спонтанных и термоиндуцированных уширений и сдвигов ридберговских уровней энергии ионов группы IIa	60
3.1. Сравнение скоростей спонтанных и термоиндуцированных переходов	60
3.2. Полное уширение высоковозбужденных уровней	74
3.2.1. Аппроксимации для естественного времени жизни высоковозбужденного уровня	75

3.2.2.	Относительные скорости термоиндуцированных распадов и возбуждений ридберговских состояний	77
3.2.3.	Ионизационное уширение ридберговских уровней тепловым излучением	82
3.2.4.	Полная ширина ридберговского уровня	87
3.3.	Термоиндуцированный сдвиг ридберговских уровней энергии .	88
3.4.	Выводы к третьей главе	98
Заключение		99
Список литературы		101

Список основных обозначений и аббревиатур

МКД	—	метод квантового дефекта
МПФ	—	модельный потенциал Фьюса
α_{nl}^s	—	скалярная часть дипольной динамической поляризуемости
$g_l(E; r, r')$	—	радиальная функция Грина оптического электрона в подпространстве орбитального параметра l
n, ν_{nl}	—	главное квантовое число, эффективное главное квантовое число
l, λ	—	орбитальный момент, эффективный орбитальный момент
μ_{nl}	—	квантовый дефект
Γ_{nl}	—	полная ширина уровня
τ_{nl}	—	полное время жизни уровня
ε_{nl}	—	тепловой штарковский сдвиг уровня
Γ_{nl}^{BBR}	—	тепловое уширение уровня

Численные значения основных физических констант, использованных в диссертации

$$\alpha = 1/137.036 \quad \text{— постоянная тонкой структуры}$$

В диссертации использована атомная система единиц $e = \hbar = m = 1$

$$c = 137.036 \quad \text{— скорость света в вакууме}$$

$$T_a = 315776 \text{ K} \quad \text{— атомная единица температуры}$$

$$k = 3.1668 \cdot 10^{-6} \text{ ат.ед./K} \quad \text{— постоянная Больцмана}$$

Введение

Актуальность работы. В последние годы многие международные исследовательские группы проявляют интерес к изучению оптических характеристик ионов групп IIa и IIb. Атомы и ионы щелочноземельных элементов являются подходящими объектами для создания новых стандартов частоты и времени, активно используются в экспериментах с квантовыми затворами, а также играют большую роль в астрофизических исследованиях, а структура энергетического спектра щелочноземельных ионов позволяет выполнить аналитический расчет оптических характеристик и провести оценку влияния внешних полей на эти характеристики [1]-[5].

Кроме того, щелочноземельные ионы достаточно удобны для теоретических исследований: ионы группы IIa содержат только один электрон на внешней оболочке, что позволяет значительно упростить расчеты и применять для вычислений водородоподобные волновые функции. Наличие метастабильных *D*-уровней в энергетическом спектре ионов Ca^+ , Sr^+ , Ba^+ дает возможность использовать эти ионы при создании новейших стандартов частоты-времени в ионных ловушках.

Особое место как в атомной физике в целом, так и в экспериментах с щелочноземельными ионами в частности, занимают исследования высоковозбужденных, ридберговских уровней, что обусловлено некоторыми присущими им специфическими свойствами: высокой чувствительностью к внешним полям и большими амплитудами поляризационного взаимодействия с окружающими частицами. Благодаря этим свойствам появляются уникальные особенности, отсутствующие в процессах взаимодействия низковозбужденных частиц - квантовая спутанность и дипольная ридберговская блокада, лавинное тушение ридберговских электронов. Кроме того, высоковозбужденные состояния обладают большими временами жизни, что создает определенные преимущества по сравнению с низковозбужденными состояниями.

В настоящее время рассматривается несколько основных направлений применения и исследования ридберговских атомов и ионов, в том числе ионов щелочноземельных элементов в высоковозбужденных состояниях:

1. *Конструирование квантовых логических устройств.* Идея использования ридберговских атомов и ионов в качестве материала для создания квантовых логических устройств не нова, однако реализация этого замысла стала возможной только после создания атомных и ионных ловушек, позволяющих манипулировать одиночными квантовыми объектами. Еще в 1985 году Д. Дойч [6] предсказал огромные преимущества в мощности и быстродействии квантового компьютера над классической ЭВМ, но предлагаемые механизмы все еще не позволяют получить необходимую точность при выполнении вычислительных операций. В результате многочисленных исследований было сформулировано несколько вариантов реализации основных элементов квантового компьютера, кубитов, представляющих собой физические носители квантовых состояний: фазовые переходы в сверхпроводниках, включения атом-полость в кристаллах, атомные спины в макромолекулах, атомы в оптической ловушке [7], [8],[9] ионы в ионной ловушке[10], [11],[12], [13]. Применительно к данной работе, рассмотрим последний и предпоследний механизмы реализации кубитов. Ввиду увеличения геометрических размеров ридберговских атомов в n^2 раз, существенно увеличивается и межатомное взаимодействие, что приводит к смещению энергетических уровней. Так, если ансамбль атомов находится в среде, где испускаются фотоны с фиксированной частотой, первый атом поглотит этот фотон, и его электрон займет определенный ридберговский уровень, однако для других атомов этот уровень будет заблокирован ввиду энергетического смещения [14]. Такое явление называется дипольной ридберговской блокадой, оно лежит в основе реализации квантового вентиля CNOT на атомах

или ионах в оптической ловушке. В работах [11],[12], [13], [15] эксперименты, осуществляющие квантовое кодирование информации, проводились с использованием ионов щелочноземельных элементов Mg^+ , Ca^+ , Sr^+ .

2. *Прецизионное измерение температуры внутри ионной ловушки.* Ионы второй группы могут быть использованы и как вспомогательные квантовые объекты при конструировании современного стандарта частоты-времени, а именно для прецизионного измерения температуры внутри ионной ловушки (для создания так называемого «ридберговского термометра»). В настоящее время ожидаемая точность измерения частоты стандарта на ионах Sr^+ и Al^+ в оптических ловушках составляет 10^{-18} с. Подобная точность требует последовательного учета всех погрешностей, вносимых как внешними полями, так и самой установкой. Существенный вклад в неопределенность измерений вносит тепловое излучение внутри ловушки, температуру которого невозможно определить стандартными методами. В работе [16] предлагается оценивать температуру теплового излучения по штарковским сдвигам и уширениям энергетических уровней ионов, находящихся в оптической ловушке. Целесообразным представляется использование именно ридберговских уровней щелочноземельных ионов; это связано с высокой чувствительностью высоковозбужденных уровней к воздействию внешних полей. Поскольку щелочноземельные ионы активно применяются на этапе симпатического охлаждения контрольных ионов в ловушках при конструировании стандартов на основе Sr^+ и Al^+ , позиционируемых как наиболее перспективные и высокоточные частотно-временные стандарты нового поколения, востребовано измерение температуры именно с использованием этих ионов.

3. *Создание мазеров на основе процессов тушения ридберговских электронов.* В работах [17], [18] было показано, что мазер может быть сконструирован не только на основе процессов вынужденного излучения в атомах, но и при использовании спонтанного излучения когерентных излучателей. Сверхизлучение, возникающее в результате одновременного спонтанного распада состояний синхронизированных излучателей с генерацией когерентной компоненты излучения было предсказано и теоретически обосновано Р. Г. Дикке в 1954 г. [19], однако обнаружить излучение экспериментально удалось лишь в 1974 г., после создания лазера. Излучение Дикке индуцируется самопроизвольными корреляциями между излучающими атомами или ионами, условиями возникновения которых являются доминирование коллективных процессов над спонтанными, а также сильное взаимодействие между частицами. Одним из способов генерации сверхизлучения в микроволновом диапазоне является создание активной среды из ридберговских сильно взаимодействующих объектов. Ввиду того, что ридберговские состояния характеризуются большими главными квантовыми числами $n \gg 1$ и, как следствие, геометрические размеры ридберговских атомов и ионов велики по сравнению с частицами в низковозбужденных состояниях, а ван-дер-ваальсово взаимодействие пропорционально $n^{11}R^{-6}$ [20], где R – межатомное расстояние, связь ридберговских объектов сильна даже в разреженной среде. Длительные времена жизни высоковозбужденных состояний способствуют более быстрому протеканию коллективных процессов по сравнению со спонтанными процессами в отдельных атомах. Использование ридберговских атомов в качестве среды для мазеров может быть востребовано для детектирования излучения микрообъектов с размерами, не превышающими характерных атомных длин волн. Кроме того, воздействие теплового поля на излучающую систему при определенных условиях приводит к увеличению интенсивности сверхизлуче-

ния, что может быть использовано для конструирования усилителя излучения черного тела. Дополнительное усиление сверхизлучения может быть получено при замене нейтральных атомов ионами вследствие усиления взаимодействия между частицами – в работе [21] исследование сверхизлучения проводилось на однократных ионах бария в микроловушке.

4. *Исследование химического состава космических объектов.*

Оптические свойства однократно ионизированных бериллия, стронция, бария привлекают внимание исследователей астрофизической и лабораторной плазмы, поскольку эти свойства позволяют получить информацию о разнообразных характеристиках звезд солнечного типа, а также звезд *A*-, *B*- и *S*-классов. Возможность отделить столкновительное уширение уровней ионов от теплового уширения является неотъемлемой частью экспериментов по моделированию хромосфер, исследованию химического состава и моделированию эволюции звезд [22],[23].

5. *Моделирование квантовых процессов в атомах и ионах.*

Поскольку атомы и ионы с одним валентным электроном в ридберговском состоянии с хорошей точностью можно рассматривать как водородоподобные объекты и не вводить в рассмотрение многочастичные эффекты, характерные для описания низких энергетических уровней, в некоторых случаях удастся получить аналитические выражения и простые оценки для оптических свойств высоковозбужденных уровней, произвести качественную оценку внутриатомных процессов, а также развить и дополнить существующие методы моделирования атомных и межатомных взаимодействий; в данной работе при исследовании термоиндуцированного комплексного штарковского сдвига ридберговских уровней выявлены пределы применимости модельного потенциала Фью-

са.

Таким образом, оптические характеристики щелочноземельных ионов могут быть востребованы при изучении широкого спектра процессов атомной физики, квантовой физики и астрофизики, поэтому необходимо не только подобрать наиболее достоверные методы расчетов этих характеристик и оценить их точность, но и получить простые оценочные зависимости, позволяющие выбрать наиболее подходящий ион и соответствующий энергетический уровень для эксперимента.

Цель диссертационной работы – теоретическое исследование влияния теплового излучения на оптические свойства ионов группы IIa периодической системы элементов; численные расчеты и построение асимптотических формул для достоверных оценок спонтанных ширин и термоиндуцированных сдвигов и уширений ридберговских уровней энергии ионов. Для достижения поставленной цели проведены следующие исследования:

1. Выполнено сравнение эффективности методов квантового дефекта (МКД) и модельного потенциала Фьюса (МПФ) в расчетах одноэлектронных амплитуд радиационных переходов.
2. Выявлено нарушение правила Томаса-Райхе-Куна [24] в расчетах сумм сил осцилляторов одноэлектронных радиационных переходов, приводящее к некорректности оценок количественных характеристик термоиндуцированных процессов в формализме МПФ, определены области эквивалентности и границы применимости МКД и МПФ.
3. Проведены численные расчеты естественных времен жизни, а также термоиндуцированных сдвига и уширения для уровней щелочноземельных ионов в широком диапазоне главных квантовых чисел n при температуре теплового излучения $T = 100 - 2000$ К.

4. Построены простые аппроксимационные формулы для определения естественных ширин уровней щелочноземельных ионов, определена зависимость времени жизни уровней ионов от главного квантового числа n , орбитального момента l , температуры окружающей среды T .

Научная новизна. В диссертационной работе и публикациях по теме диссертации впервые представлены расчеты времен жизни, термоиндуцированных сдвигов и уширений для большого числа возбужденных состояний, в том числе ридберговских, ионов группы IIa ; для всех оптических характеристик выявлены и построены простые аппроксимационные зависимости свойств от главного квантового числа и температуры, предложен простой способ оценки вкладов процессов ионизации в штарковский сдвиг и уширение.

В процессе исследования выявлены пределы применимости метода квантового дефекта и метода модельного потенциала Фьюса для расчета оптических свойств энергетических состояний.

Практическая значимость. Результаты, полученные в работе, представляют интерес для экспериментов, при проведении которых нужна одновременная оценка оптических характеристик большого количества уровней, например, при выборе вспомогательных объектов, в частности, для построения стандарта частоты-времени на ионах в ловушках, прецизионных измерений слабых остаточных полей при конструировании мазеров в среде ридберговских ионов. Оценка времени жизни и термоиндуцированных эффектов может быть полезна при выборе наиболее долгоживущих, но при этом наименее подверженных влиянию внешних полей состояний, например, в процессе проектирования квантовых логических устройств.

Исследование ридберговских состояний, не затрудненное решением многочастичных задач, способствует усовершенствованию моделей внутриатомных потенциалов и межатомных взаимодействий.

На защиту выносятся следующие основные результаты и положения:

1. Определение границ применимости модельного потенциала Фьюса в расчетах спонтанных и термоиндуцированных радиационных переходов в ионах щелочноземельных элементов.
2. Зависимость результатов расчета сумм сил осцилляторов от параметров модельного потенциала Фьюса.
3. Использование правила суммирования сил осцилляторов для оценки вклада состояний континуума в штарковские сдвиг и уширение высоковозбужденных энергетических уровней.
4. Асимптотические формулы для достоверной оценки скоростей термоиндуцированных переходов из ридберговских состояний ионов щелочноземельных элементов.
5. Асимптотические аппроксимации для термоиндуцированных энергетических сдвигов.

Апробация работы.

Основные результаты диссертации докладывались на следующих конференциях:

1. ICOM 2012. The 3d Int. Conf. On the Physics of Optical Materials and Devices. Belgrade, Serbia.
2. 6-й Международный симпозиум «Метрология времени и пространства». Россия, Менделеево, 17-19 сентября 2012.
3. ICONO/LAT , June 18-22, 2013, Russia, Moscow.
4. 11th International Colloquium on Atomic Spectra and Oscillator Strengths for Astrophysical and Laboratory Plasma, August 5-9, 2013, Mons Belgium.

5. XX Конференция по фундаментальной атомной спектроскопии (ФАС-XX), 23 – 27 сентября, 2013, Россия, Воронеж.
6. Совецание по прецизионной физике и фундаментальным физическим константам, 7-11 октября 2013, Санкт-Петербург, Пулковое.
7. 6th Conference on Elementary Processes in Atomic Systems – CEPAS 2014, Bratislava, Slovakia.
8. IFCS-EFTF Joint Conference of the IEEE International Frequency Control Symposium and European Frequency and Time Forum, April 12-16, 2015, USA, Denver, Colorado.

Публикации.

Материалы диссертации опубликованы в 14 печатных работах, из них 5 статей в рецензируемых журналах [25],[26],[27],[28],[29] и 9 тезисов докладов [30]-[38].

Личный вклад автора.

Определение основной концепции, целей и задач исследования осуществлялось научным руководителем Овсянниковым В. Д. Анализ методов и интерпретация результатов проведены автором совместно с научным руководителем. Практически все представленные в диссертации результаты численных расчетов и алгоритмы их реализации получены лично автором независимо от соавторов публикаций. Подготовка к публикации полученных результатов проводилась совместно с соавторами, причем вклад диссертанта был существенным. Содержание диссертации отражает персональный вклад автора в опубликованные работы.

Структура и объем диссертации.

Диссертация состоит из введения, 3 глав, заключения, библиографии и приложений. Общий объем диссертации 111 страниц, из них 22 таблицы, 4 рисунка. Библиография включает 96 наименований.

В первой главе введены основные оптические характеристики энергетических состояний ионов, исследовано влияние теплового излучения на атомные и ионные энергетические уровни.

Во второй главе исследованы методы моделирования атомного потенциала, которые позволяют получить аналитические выражения для радиальных матричных элементов дискретно-дискретных и дискретно-непрерывных радиационных переходов; соответствующие аналитические зависимости необходимы для расчетов всех оптических свойств уровней, выражающихся через матричные элементы.

В третьей главе представлены непосредственно расчеты оптических свойств щелочноземельных ионов, получены аппроксимационные зависимости для характеристик ридберговских уровней.

В Заключении сформулированы основные результаты диссертации, а также обсуждается применимость полученных численных данных и найденных качественных закономерностей в дальнейших практических и теоретических исследованиях взаимодействия ридберговских объектов с полем теплового излучения.

Глава 1

Влияние теплового излучения на возбужденное энергетическое состояние иона

При проведении высокоточных экспериментов с атомами, молекулами и ионами необходимо учитывать влияние теплового поля на энергетические состояния, поскольку излучение черного тела существенно влияет на внутриатомные процессы. Даже в установке, максимально изолированной от внешних полей, не удастся избавиться от воздействия реликтового излучения, имеющего температуру $2,72548 \pm 0,00057K$. В установках, участвующих в стандартизации частоты-времени, необходимо учитывать все неопределенности, порождаемые полями, наведенными самой установкой, а также гравитационным, тепловым полями, и т.д. Относительный вклад индуцированной тепловым излучением неопределенности в общий бюджет неопределенностей частоты стандарта достаточно весомый ($\sim 10^{-17}$ [39]), поэтому учет радиационных процессов, порождаемых тепловым излучением, должен быть как можно более точным.

Для высоковозбужденных уровней эффекты, индуцированные тепловым излучением, могут быть весьма существенны ввиду высокой чувствительности ридберговских уровней к внешним полям, поэтому в ряде исследований ридберговские состояния атомов и ионов предлагается использовать как высокоточные сенсоры, фиксирующие тепловое поле [16].

Расчеты изменений характеристик энергетических уровней в тепловом поле неинформативны без достоверных данных о спонтанных процессах в атомах и ионах, то есть процессах, происходящих без воздействия внешних полей, обусловленных только внутренней структурой квантового объекта и законами квантовой механики. В диссертационной работе представлены расчеты таких характеристик: естественной ширины уровня, скоростей перехо-

дов между состояниями с фиксированными главными квантовыми числами n, n' , естественного времени жизни энергетического состояния.

1.1. Естественная ширина и время жизни возбужденного уровня

Важнейшими характеристиками энергетических состояний атомов и ионов, определяемыми вероятностями разрешенных переходов $P_{nn'}$ во все энергетически доступные состояния, являются скорость распада связанного состояния $|nl\rangle$ $P_{nl} = \sum P_{nn'}$, определяющая ширину уровня $\Gamma_{nl} = P_{nl}$, и время жизни уровня $\tau_{nl} = 1/\Gamma_{nl}$.

Поскольку число частиц в возбужденном состоянии изменяется с течением времени по экспоненциальному закону [40]:

$$N = N_0 e^{-\Gamma_{nl} t}, \quad (1.1)$$

то время жизни τ_{nl} , обратно пропорциональное полной вероятности распада состояния, может быть определено как время, за которое число частиц, находящихся в этом состоянии, уменьшается в e раз. В случае, когда в возбужденном состоянии находится одна частица, время жизни состояния показывает, за какое время вероятность нахождения в этом состоянии уменьшается в e раз.

Существуют энергетические уровни, для которых суммарная вероятность перехода во все возможные состояния очень мала, а время жизни очень велико по атомным меркам. Такие состояния принято называть метастабильными. Долгоживущие метастабильные уровни широко применяются как при создании частотного стандарта, так и в установках, осуществляющих квантовое кодирование информации [12], [13].

Время жизни энергетического уровня исследуется не только как характеристика, позволяющая выбрать наиболее долгоживущий уровень, подходя-

щий для эксперимента, но и как величина, с помощью которой можно оценить влияние внешних полей на энергетическое состояние. Спонтанное время жизни τ_{nl}^{sp} также определяет естественную ширину уровня $\Gamma_{nl}^{sp} = 1/\tau_{nl}^{sp}$ – характеристику, показывающую, с какой точностью может быть определена энергия состояния с учетом спонтанных процессов распада.

Поскольку вклад магнитного дипольного и квадрупольного излучений пренебрежимо мал во всех исследуемых в данной работе случаях (исключения составляют лишь метастабильные состояния, отдельно не исследуемые в работе), будем рассматривать необходимые характеристики уровней в приближении электрического дипольного излучения. В этом случае естественная ширина уровня может быть определена через суммарную вероятность перехода в состояния с $E_{n'l'j'} < E_{nlj}$ следующим образом [41]:

$$\Gamma_{nl} = \frac{4}{3c^3} \sum_{n', l'=l\pm 1} \omega_{nn'}^3 |M_{nn'}|^2, \quad (1.2)$$

где $\omega_{nn'} = E_{nlj} - E_{n'l'j'}$ – частота радиационного перехода, $M_{nn'} = \langle nlj | \mathbf{D} | n'l'j' \rangle$ – дипольный матричный элемент разрешенного радиационного перехода.

Для того, чтобы представить матричный элемент, входящий в выражение (1.2) в аналитической форме, в диссертационной работе использовано одноэлектронное приближение, применимое ввиду относительно простой структуры ионных уровней с единственным оптическим электроном на внешней оболочке. Поскольку и метод квантового дефекта, и метод модельного потенциала Фьюса позволяют факторизовать волновую функцию, квадрат модуля дипольного матричного элемента может быть представлен следующим образом [26], [42]:

$$|M_{nn'}|^2 = |\langle n'l'j' | r | nlj \rangle|^2 |\langle l'j' | \mathbf{n} | lj \rangle|^2. \quad (1.3)$$

В некоторых случаях тонкой структурой одноэлектронных состояний, а следовательно, и зависимостью дипольного матричного элемента от полных моментов j, j' можно пренебречь. В этом случае выражение для дипольного

матричного элемента может быть факторизована следующим образом:

$$|M_{nn'}|^2 = |\langle n'l' | r | nl \rangle|^2 |\langle l' | \mathbf{n} | l \rangle|^2. \quad (1.4)$$

Применяя теорему Вигнера-Эккарта и используя стандартные методы теории углового момента [43], для интеграла по угловым переменным получаем выражение:

$$|\langle l' | \mathbf{n} | l \rangle|^2 = \frac{1}{2l+1} |\langle l' || n || l \rangle|^2, \quad (1.5)$$

$$\langle l' || n || l \rangle = \delta_{l-1,l'} \sqrt{l} + \delta_{l+1,l'} \sqrt{l+1}. \quad (1.6)$$

Таким образом, выражение (1.2) принимает вид:

$$\Gamma_{nl} = \frac{4}{3(2l+1)c^3} \sum_{n',l'=l\pm 1} l_{>} \omega_{nn'}^3 |\langle n'l' | r | nl \rangle|^2, \quad (1.7)$$

где $l_{>} = (l + l' + 1)/2$ – больший из двух орбитальных моментов l и l' .

Зависимость (1.7) получена без учета тонкого расщепления и применима для расчета характеристик относительно легких ионов щелочноземельной группы, однако для описания более сложных квантовых систем, таких как Ca^+ , Sr^+ , Ba^+ , выражение следует обобщить следующим образом [43]:

$$|M_{nn'}|^2 = l_{>} (2j' + 1) \left\{ \begin{matrix} 1 & l & l' \\ S & j & j' \end{matrix} \right\}^2 |\langle n'l'j' | r | nlj \rangle|^2, \quad (1.8)$$

где квантовое число S – полный спин.

1.2. Тепловой сдвиг и уширение уровня

Взаимодействие равновесного теплового излучения с энергетическим уровнем атома или иона порождает одновременно два независимых квантовых эффекта:

- штарковский энергетический сдвиг уровня, приводящий к "смещению центра тяжести" энергетического состояния и относительному смещению подуровней тонкой структуры;

- штарковское тепловое уширение, увеличивающее суммарную вероятность распада в основном за счет переходов на уровни с близкими главными квантовыми числами и приводящее к сокращению общего времени жизни состояния.

И первый, и второй процессы определяются матричными элементами дискретно-дискретных и дискретно-непрерывных разрешенных радиационных переходов. Подобные переходы могут быть разделены на три типа с учетом различия в форме взаимодействия с переносчиками электромагнитного поля и имеющими определенную асимптотику при различных главных квантовых числах n и температуре T :

- переходы в дискретные состояния с энергией $E_{n'l'} < E_{nl}$ с испусканием фотона (распады);
- переходы в дискретные состояния с энергией $E_{n'l'} > E_{nl}$ с поглощением теплового фотона (возбуждения);
- переходы в состояния непрерывного спектра (ионизация).

В формализме квантовой теории термоиндуцированные сдвиг и уширение могут быть описаны единообразно с помощью комплексного энергетического сдвига:

$$\Delta E = \text{Re}(\Delta E) + i \text{Im}(\Delta E). \quad (1.9)$$

Представим волновую функцию квазистационарного состояния в виде [44]:

$$\psi = \psi_0 e^{-i(E+\Delta E)t}, \quad (1.10)$$

тогда вероятность нахождения частицы в этом состоянии зависит от времени следующим образом:

$$w = |\psi|^2 = |\psi_0|^2 e^{2\text{Im}(\Delta E)t} = w_0 e^{2\text{Im}(\Delta E)t}. \quad (1.11)$$

Для квазистационарных состояний [45] выражение (1.11) тождественно равенству

$$w = w_0 e^{-\Gamma t}, \quad (1.12)$$

где Γ – ширина уровня. Следовательно, ширина уровня и мнимая часть энергетического сдвига связаны следующим образом:

$$Im\Delta E = -\frac{\Gamma}{2}. \quad (1.13)$$

Термоиндуцированные сдвиги и уширения ридберговских уровней с главными квантовыми числами $n < 2000$ малы по сравнению с энергиями переходов в состояния с $n' = n \pm 1$ вплоть до температур $T \leq 3000$ К. Поэтому в расчетах термоиндуцированных переходов применима теория возмущений для невырожденных состояний [45],[46].

Формально, равновесное тепловое излучение содержит фотоны всевозможных энергий и, соответственно, частот, однако спектральное распределение концентрации фотонов $N_p(\omega, T)$ существенно зависит от температуры и, согласно формуле Планка, определяется выражением:

$$N_p(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3 (e^{\omega/kT} - 1)}. \quad (1.14)$$

Следовательно, спектральное распределение квадрата электрической напряженности выглядит следующим образом:

$$F^2(\omega, T) = \frac{8\omega^3}{\pi c^3 (e^{\omega/kT} - 1)}. \quad (1.15)$$

Нахождением экстремума функции (1.15), получаем, что максимум спектральной плотности квадрата напряженности достигается на частоте перехода $\omega_{max} = 2.8214kT$. Вклад во взаимодействие теплового излучения с энергетическим состоянием вносят фотоны всех возможных частот, однако практически все фотоны сосредоточены в диапазоне частот $[\frac{\omega_{max}}{30}, 30\omega_{max}]$, вне этого отрезка находится лишь пренебрежимо малая доля энергии теплового излучения.

Комплексный штарковский сдвиг, индуцированный тепловым излучением, может быть представлен в виде [45],[47]:

$$\Delta E_{nl}(T) = -\frac{1}{4} \int_0^{\infty} \alpha_{nl}^s F^2(\omega, T) d\omega, \quad (1.16)$$

где α_{nl}^s – скалярная часть дипольной динамической поляризуемости, которая может быть представлена в виде

$$\alpha_{nl}^s(\omega) = \frac{1}{3(2l+1)} \sum_{l'=\pm 1} l' \langle nl|r' \left[g_{l'}^{E_{nl}+\omega+i0}(r', r) + g_{l'}^{E_{nl}-\omega+i0}(r', r) \right] r|nl \rangle, \quad (1.17)$$

где $g_{l'}^{E_{nl}\pm\omega+i0}(r', r)$ – радиальная часть функции Грина для квазиэнергетических состояний, которая может быть представлена в виде спектрального разложения [45],[47]:

$$\begin{aligned} g_{l'}^{E_{nl}\pm\omega+i0}(r', r) &= \sum_{n'} \langle r'|n'l' \rangle \langle n'l'|r \rangle \times \\ &\times \left[\mathcal{P} \left(\frac{1}{E_{n'l'} - E_{nl} \mp \omega} \right) + i\pi \delta(E_{n'l'} - E_{nl} \mp \omega) \right] \\ &+ \int_0^{\infty} \langle r'|\varepsilon l' \rangle \langle \varepsilon l'|r \rangle \left[\mathcal{P} \left(\frac{1}{\varepsilon - E_{nl} \mp \omega} \right) + i\pi \delta(\varepsilon - E_{nl} \mp \omega) \right] d\varepsilon, \end{aligned} \quad (1.18)$$

где $\mathcal{P}(x)$ – символ интеграла в смысле главного значения, $\delta(x)$ – дельта-функция Дирака.

После подстановки (1.15, 1.17, 1.18) в (1.16) получим выражение для комплексного штарковского сдвига, в котором можно будет явно отделить действительную часть от мнимой части:

$$\begin{aligned}
\Delta E_{nl}(T) = & -\frac{2}{3(2l+1)\pi^2 c^3} \int_0^\infty \frac{\omega^3}{e^{\omega/kT} - 1} \sum_{l'=l\pm 1} l_{>} \langle nl|r'(g^{E_{nl}+\omega+i_0}(r, r') \\
& + g^{E_{nl}-\omega+i_0}(r, r'))r|nl\rangle d\omega = -\frac{2}{3(2l+1)\pi^2 c^3} \int_0^\infty \frac{\omega^3}{e^{\omega/kT} - 1} \sum_{l'=l\pm 1} l_{>} \langle nl|r' \times \\
& \times \left(\sum_{n'} \langle r'|n'l'\rangle \langle n'l'|r\rangle \left[\mathcal{P} \left(\frac{1}{\omega_{n'l'nl} - \omega} \right) + i\pi\delta(\omega_{nn'} - \omega) + \right. \right. \\
& \left. \left. \mathcal{P} \left(\frac{1}{\omega_{nn'} + \omega} \right) + i\pi\delta(\omega_{nn'} + \omega) \right] + \int_0^\infty \langle r'|\varepsilon l'\rangle \langle \varepsilon l'|r\rangle \times \right. \quad (1.19)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times \left\{ \mathcal{P} \left(\frac{1}{\varepsilon - E_{nl} - \omega} \right) + \mathcal{P} \left(\frac{1}{\varepsilon - E_{nl} + \omega} \right) + i\pi\delta(\omega - (\varepsilon - E_{nl})) + \right. \\
& \left. + i\pi\delta(\omega + (\varepsilon - E_{nl})) \right\} d\varepsilon r|nl\rangle d\omega. \quad (1.20)
\end{aligned}$$

Выделим действительную и мнимую части штарковского сдвига и выполним соответствующие преобразования:

$$\begin{aligned}
Re \{ \Delta E_{nl}(T) \} = & -\frac{2}{3(2l+1)\pi^2 c^3} \sum_{l'=l\pm 1} l_{>} \int_0^\infty \frac{\omega^3}{e^{\omega/kT} - 1} \times \\
& \times \left\{ \sum_{n'} |\langle n'l'|r|nl\rangle|^2 \left(\mathcal{P} \left[\frac{1}{\omega_{nn'} - \omega} \right] + \mathcal{P} \left[\frac{1}{\omega_{nn'} + \omega} \right] \right) + \int_0^\infty |\langle \varepsilon l'|r|nl\rangle|^2 \times \right. \\
& \times \left[\mathcal{P} \left(\frac{1}{\varepsilon - E_{nl} - \omega} \right) + \mathcal{P} \left(\frac{1}{\varepsilon - E_{nl} + \omega} \right) \right] d\varepsilon \left. \right\} = \\
& = -\frac{2}{3(2l+1)\pi^2 c^3} \sum_{l'=l\pm 1} l_{>} \mathcal{P} \int_0^\infty \frac{\omega^3}{e^{\omega/kT} - 1} \left\{ \sum_{n'} \frac{2\omega_{nn'} |\langle n'l'|r|nl\rangle|^2}{\omega_{nn'}^2 - \omega^2} + \right. \\
& \left. + \int_0^\infty \frac{2(\varepsilon + |E_{nl}|) |\langle \varepsilon l'|r|nl\rangle|^2}{(\varepsilon + |E_{nl}|)^2 - \omega^2} d\varepsilon \right\} d\omega. \quad (1.21)
\end{aligned}$$

В работе Фарлея и Винга [48] было предложено унифицировать вычисление интеграла по частоте с помощью функции:

$$F(z) = -2z\mathcal{P} \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{(x^2 - z^2)(e^x - 1)}. \quad (1.22)$$

С учетом равенства (1.22), преобразуем (1.21) к виду:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \{ \Delta E_{nl}(T) \} = & -\frac{2(kT)^3}{3\pi c^3(2l+1)} \sum_{l'=l\pm 1} l_{>} \left\{ \sum_{n'} |\langle n'l'|r|nl \rangle|^2 F\left(\frac{\omega_{nn'}}{kT}\right) + \right. \\ & \left. + \int_0^\infty |\langle \varepsilon l'|r|nl \rangle|^2 F\left(\frac{\varepsilon + |E_{nl}|}{kT}\right) d\varepsilon \right\}. \end{aligned} \quad (1.23)$$

Аналогично, для мнимой части сдвига получаем выражение:

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} \{ \Delta E_{nl}(T) \} = & -\frac{2}{3c^3(2l+1)} \int_0^\infty \frac{\omega^3}{e^{\omega/kT} - 1} \sum_{l'=l\pm 1} l_{>} \langle nl|r' \left(\sum_{n'} \langle r'|n'l' \rangle \times \right. \\ & \left. \times \langle n'l'|r \rangle [\delta(\omega_{nn'} - \omega) + \delta(\omega_{n'l'nl} + \omega)] + \right. \\ & \left. + \int_0^\infty \langle r'|\varepsilon l' \rangle \langle \varepsilon l'|r \rangle \{ \delta(\omega - (\varepsilon - E_{nl})) + \delta(\omega - (\varepsilon - E_{nl})) \} d\varepsilon \cdot r|nl \rangle \right) d\omega = \\ = & -\frac{2}{3c^3(2l+1)} \sum_{l'=l\pm 1} l_{>} \left\{ \sum_{n'} \frac{|\omega_{nn'}|^3 |\langle n'l'|r|nl \rangle|^2}{e^{\omega_{nn'}/kT} - 1} + \right. \\ & \left. + \int_0^\infty \frac{|\langle \varepsilon l'|r|nl \rangle|^2 (\varepsilon + |E_{nl}|)^3}{e^{(\varepsilon + |E_{nl}|)/kT} - 1} d\varepsilon \right\}. \end{aligned} \quad (1.24)$$

Представим комплексный штарковский сдвиг в виде:

$$\Delta E_{nl}(T) = \varepsilon_{nl}^{BBR}(T) - i \frac{\Gamma_{nl}^{BBR}(T)}{2}. \quad (1.25)$$

Тогда, согласно (1.24, 1.21), термоиндуцированный энергетический сдвиг может быть определен следующим образом:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{nl}^{BBR}(T) = & -\frac{2(kT)^3}{3\pi c^3(2l+1)} \sum_{l'=l\pm 1} l_{>} \left\{ \sum_{n'} |\langle n'l'|r|nl \rangle|^2 F\left(\frac{\omega_{nn'}}{kT}\right) + \right. \\ & \left. + \int_0^\infty |\langle \varepsilon l'|r|nl \rangle|^2 F\left(\frac{\varepsilon + |E_{nl}|}{kT}\right) d\varepsilon \right\}, \end{aligned} \quad (1.26)$$

а значение теплового уширения может быть выражено как

$$\Gamma_{nl}^{BBR}(T) = \frac{4}{3c^3(2l+1)} \sum_{l'=l\pm 1} l' \left\{ \sum_{n'} \frac{|\omega_{nn'}|^3 |\langle n'l'|r|nl\rangle|^2}{e^{\omega_{nn'}/kT} - 1} + \int_0^\infty \frac{|\langle \varepsilon l'|r|nl\rangle|^2 (\varepsilon + |E_{nl}|)^3}{e^{(\varepsilon+|E_{nl}|)/kT} - 1} d\varepsilon \right\} \quad (1.27)$$

Термоиндуцированный сдвиг $\varepsilon_{nl}^{BBR}(T)$ определяет смещение положения энергетического уровня, а уширение уровня $\Gamma_{nl}^{BBR}(T)$ обуславливает сокращение естественного времени жизни τ_{nl} , происходящее за счет роста скорости распада в поле теплового излучения.

Для того, чтобы выявить асимптотические зависимости тепловых сдвига и уширения, а также полного времени жизни высоковозбужденного уровня от главного квантового числа и температуры, необходимо выполнить расчеты этих характеристик для большого числа уровней. Высокоточные методы расчетов, применяемые для описания характеристик низковозбужденных состояний, не позволяют выполнить расчет характеристик большого массива уровней, так как в формализме этих методов радиальные матричные элементы не представимы аналитически, в связи с этим целесообразно рассмотреть полуэмпирические методы, с помощью которых можно получить аналитические выражения для радиальной волновой функции.

1.3. Выводы к первой главе

В первой главе дано краткое описание влияния теплового излучения на внутриатомные процессы, введены основные оптические характеристики, рассчитываемые и анализируемые в работе – естественное время жизни, термоиндуцированные сдвиг и уширение энергетического состояния иона; выявлена специфика описания свойств высоковозбужденных ионов, сформулирована задача дальнейшего исследования – подбор и анализ моделируемого потенциала атома, позволяющего получить аналитические выражения для

матричных элементов переходов и определяемых ими оптических свойств и построить простые асимптотические зависимости оптических характеристик ридберговских уровней от квантовых чисел уровня и температуры излучения.

Глава 2

Полуэмпирические методы численных расчетов амплитуд радиационных переходов в ионах группы IIa

Наиболее точное описание оптических свойств энергетических состояний атомов и ионов может быть получено при рассмотрении спонтанных и индуцированных внешними полями процессов в формализме квантовой теории. Основной характеристикой, определяющей квантовые состояния объектов микромира, таких как атомы и ионы, является волновая функция $\psi(r)$, удовлетворяющая стационарному уравнению Шредингера. Поскольку объектами исследования данной работы являются щелочноземельные ионы, имеющие единственный электрон на внешней оболочке, целесообразно использование для расчетов одноэлектронного приближения, основывающегося на том, что наиболее существенное взаимодействие с внешними полями происходит за счет валентного внешнего электрона, воздействие же на внутренние электроны рассматривается как коллективное и учитывается посредством изменения некоторых параметров потенциала атома. Одноэлектронное приближение базируется на том факте, что основное количество электронов в многоэлектронном атоме находится в составе замкнутых оболочек, а сравнительно небольшое число являются валентными (не входят в состав замкнутых оболочек). Оптические свойства атома или иона практически полностью определяются валентными электронами, поэтому для описания этих свойств в абсолютном большинстве случаев достаточно информации о состоянии валентных электронов (в случае одноэлектронного приближения такой электрон один).

В одноэлектронном приближении уравнение Шредингера имеет вид [46]:

$$-\frac{\nabla^2}{2}\psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (2.1)$$

Так как исследуемые системы являются центральносимметричными, решение уравнения Шредингера будет наиболее простым в сферических координатах, где оператор Лапласа может быть представлен в виде [43]:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \quad (2.2)$$

Потенциал взаимодействия $V(\mathbf{r})$ имеет наиболее простой вид в случае атома водорода и водородоподобных ионов

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{Z}{r}, \quad (2.3)$$

однако для систем с большим количеством электронов потенциал не может быть описан точно и единообразно для всей области значений \mathbf{r} , поэтому применяется моделирование потенциала, базирующееся на общих закономерностях поведения волновой функции при различных расстояниях от центра атома \mathbf{r} и физических свойствах атомной системы.

Наиболее точный расчет характеристик энергетических уровней атомов и ионов можно выполнить с помощью многоэлектронных функций метода Хартри-Фока и его модификаций [49], [50]. Однако использование данного метода не предполагает получения аналитического решения для волновой функции. Как следствие, расчет характеристик высоковозбужденных состояний сопряжен с существенными вычислительными трудностями и значительными неточностями, связанными с неправильными численными значениями волновых функций на больших расстояниях от ядра, дающих основной вклад в характеристики взаимодействия атома с внешними полями.

Более простым и надежным является использование решения одноэлектронного уравнения Шредингера с помощью модельного потенциала, правильно отражающего действие атомного ядра и внутренних электронов на волновые функции внешнего электрона и позволяющего решить уравнение (2.1) в аналитическом виде.

В настоящей работе используются два метода, основанных на кулоновской асимптотике одноэлектронного потенциала: метод квантового дефекта

(МКД) и метод модельного потенциала Фьюса (МПФ). Оба метода позволяют получить аналитические радиальные волновые функции для электронов как в связанном, с $E < 0$ состоянии, так и в свободном состоянии с $E > 0$ и, как следствие, дают возможность представить в аналитическом виде выражения для радиальных матричных элементов дискретно-дискретных и дискретно-непрерывных переходов, необходимых для расчетов вероятностей как естественных, так и термоиндуцированных распадов. Однако и МПФ, и МКД адекватно описывают только определенные группы атомов и ионов, и прогнозируемая точность этих методов отличается в зависимости от группы объектов, характеристики которых определяются в рамках этих методов. Так, например, в формализме стандартного МКД нельзя произвести расчеты оптических характеристик с низкой энергией и высоким орбитальным моментом, не прибегая к модификации волновых функций, матричных элементов и процедуры численных расчетов, а в МПФ подобных ограничений нет. Кроме того, применимость двух полуэмпирических методов к расчетам термоиндуцированных переходов существенно различается в связи с различием в суммах сил осцилляторов и первых моментов сил осцилляторов, как будет показано ниже в параграфе 2.4.

2.1. Метод квантового дефекта

Метод квантового дефекта (МКД) был впервые предложен для расчетов однофотонных переходов в работах [51], [52]. В дальнейшем метод успешно применялся для определения разнообразных оптических свойств атомов, ионов, полярных молекул [53], [54], [55]. Метод квантового дефекта базируется на предположении, что наибольший вклад в матричные элементы оператора дипольного момента вносят области, далекие от ядра, где потенциал, в котором движется оптический электрон, можно считать кулоновским. Очевидно, что такое упрощение накладывает определенные ограничения на

применение метода: рассматриваются, в основном, системы с одним оптическим электроном, кроме того, при расчете характеристик низколежащих состояний, особенно основного состояния, не всегда удается получить необходимую точность. Тем не менее, применение МКД может быть востребовано для расчета времени жизни, теплового сдвига и уширения высоковозбужденных состояний. То обстоятельство, что кулоновский потенциал, используемый в МКД, коммутирует с оператором дипольного момента, сохраняя правильное значение суммы сил осцилляторов, немаловажно при вычислении переходов в вышележащие уровни, встречающихся в расчетах термоиндуцированных сдвигов и уширений энергетических уровней.

В методе квантового дефекта потенциал остова на расстояниях больших радиуса кора $r > r_c$ считается водородоподобным, $V(\mathbf{r}) = -\frac{Z}{r}$; для того, чтобы учесть влияние ядра и внутренних электронов на оптический электрон, используется информация об энергетическом спектре. Энергия в МКД подчиняется соотношению:

$$E_{nl} = -\frac{Z^2}{2\nu_{nl}^2}, \quad (2.4)$$

где ν_{nl} – эффективное главное квантовое число.

Замена главного квантового числа на эффективное главное квантовое число в выражении для энергии справедлива ввиду того, что к высоковозбужденным состояниям атомов и ионов может быть применено квазиклассическое приближение, и, следовательно, правило квантования Бора-Зоммерфельда, имеющее вид [46]:

$$\oint p_i dq_i = 2\pi\hbar(n_i + \gamma_i). \quad (2.5)$$

Отклонение потенциала от кулоновского внутри кора можно учесть изменив граничное условие для волновой функции при $r \rightarrow 0$, что приведет к переопределению константы квантования γ_i , изменение которой фактически будет соответствовать замене главного квантового числа n на эффективное главное квантовое число ν_{nl} , определяемое спектром состояний валентного

электрона. Квантовый дефект, давший название методу, определяется следующим соотношением:

$$\mu_{nl} + \nu_{nl} = n. \quad (2.6)$$

С ростом n квантовый дефект μ_{nl} приближается к постоянному асимптотическому значению. Для состояний с произвольными n квантовый дефект может быть определен, например, следующим образом [56]:

$$\mu_{nl} = a_l + \frac{b_l}{(n - n_0 + 1)^2} + \frac{c_l}{(n - n_0 + 1)^4} + \frac{d_l}{(n - n_0 + 1)^6}, \quad (2.7)$$

где n_0 – главное квантовое число самого низкого состояния валентного электрона в данной серии состояний с орбитальным моментом l , а коэффициенты a_l, b_l, c_l, d_l подбираются с учетом известных значений энергий уровней.

Очевидно, что для $n \gg 1$ квантовый дефект $\mu_{nl} \rightarrow a_l$ перестает зависеть от главного квантового числа n , что позволяет получить асимптотические закономерности для характеристик таких состояний.

Для достаточно тяжелых атомов и ионов (в группе щелочноземельных ионов – $\text{Ca}^+, \text{Sr}^+, \text{Ba}^+$) оптические характеристики состояний с одинаковыми n, l и разными j могут различаться существенно, поэтому и энергия, и квантовый дефект описываются отдельно для каждого из состояний тонкой структуры.

$$E_{nlj} = -\frac{Z^2}{2(n - \mu_{nlj})^2} \quad (2.8)$$

В методе квантового дефекта непосредственно измеряемые значения энергетических уровней являются полюсами радиальной функции Грина [45]. В приближении центрального поля радиальная функция Грина $g_l(E; r, r')$ валентного электрона в потенциале атомного остатка после отделения угловых переменных $G_l(r, r') = \sum_{l,m} g_l(E; r, r') Y_l^m(r_0) Y_l^{m*}(r'_0)$ определяется уравнением:

$$\left[\frac{1}{2r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{2r^2} + \frac{Z}{r} + E \right] g_l(E; r, r') = \frac{1}{rr'} \delta(r - r') \quad (2.9)$$

Уравнение (2.9) неоднородно, поэтому его решение может быть получено суммированием частного решения неоднородного уравнения и общего решения

однородного уравнения [45]:

$$g_l(E; r, r') = \frac{\nu Z \Gamma(l+1-\nu)}{rr' \Gamma(2l+2)} \mathcal{M}_{\nu, l+\frac{1}{2}} \left(\frac{2Zr_{<}}{\nu} \right) \mathcal{W}_{\nu, l+\frac{1}{2}} \left(\frac{2Zr_{>}}{\nu} \right) + A \frac{\nu Z}{rr'} \mathcal{W}_{\nu, l+\frac{1}{2}} \left(\frac{2Zr}{\nu} \right) \mathcal{W}_{\nu, l+\frac{1}{2}} \left(\frac{2Zr'}{\nu} \right), \quad (2.10)$$

где \mathcal{M}, \mathcal{W} – функции Уиттекера [57].

Первое слагаемое в уравнении (2.10) совпадает с функцией Грина для атома водорода, слагаемое, содержащее произведения функций \mathcal{M} , формально являющееся общим решением однородного уравнения, не включено в (2.10) в силу требования регулярности функции Грина при $r \rightarrow \infty$. Очевидно, что для атома водорода $A = 0$, так как при $r \rightarrow 0$ водородная функция Грина должна быть конечна. Так как для более сложных атомов и ионов поведение функции в области $r < r_c$ не определено, константу A находят из асимптотических значений свободных состояний $E > 0$, учитывая связь квантового дефекта μ_l , доопределенного в области положительных значений энергий и фазы рассеяния δ_l , изначально определенную Ситоном как

$$\cot \delta_l = \cot \pi \mu_l, \quad (2.11)$$

а в дальнейшем видоизмененную для описания более широких областей энергий E

$$\cot \delta_l = \left(1 - e^{-\frac{2\pi Z}{\chi}} \right) \cot \pi \mu_l, \quad (2.12)$$

где $\chi = \sqrt{2E}$, ($E > 0$). В работе [58] получена модификация выражения [59], описывающая аналитическое продолжение (2.12) на область отрицательных энергий:

$$\operatorname{ctg} \delta_l(E > 0) \rightarrow (1 - e^{2\pi i \nu}) \cot \pi \mu_l(E < 0) - ie^{2\pi i \nu}, \quad (2.13)$$

где $\nu = \frac{iZ}{\chi}$.

С учетом асимптотического поведения функции Грина при $r, r' \rightarrow \infty$ и соответствующего разложения для функций Уиттекера можно определить

коэффициент A в области $E > 0$ [45] :

$$A = e^{i(2\sigma_l + \pi(\nu - l))} (e^{2i\delta_l} - 1), \quad (2.14)$$

где $\sigma_l = \arg\Gamma(l + 1 - \nu)$,

и в области $E < 0$

$$A = \frac{\Gamma(l + 1 - \nu) \sin(\mu_l + l)}{\Gamma(l + 1 + \nu) \sin \pi(\mu_l + \nu)}. \quad (2.15)$$

Функция Грина для состояний дискретного спектра с учетом (2.15) принимает вид:

$$g_l(E; r, r') = \frac{\nu Z \Gamma(l + 1 - \nu)}{rr' \Gamma(l + 1 + \nu)} \mathcal{W}_{\nu, l + \frac{1}{2}} \left(\frac{2Zr_{>}}{\nu} \right) \times \\ \times \left[\frac{\Gamma(l + 1 + \nu)}{\Gamma(2l + 2)} \mathcal{M}_{\nu, l + \frac{1}{2}} \left(\frac{2Zr_{<}}{\nu} \right) + \frac{\sin \pi(\mu_l + l)}{\sin \pi(\mu_l + \nu)} \mathcal{W}_{\nu, l + \frac{1}{2}} \left(\frac{2Zr_{<}}{\nu} \right) \right]. \quad (2.16)$$

Полюса функции (2.16) находятся в точках $\mu_l + \nu = n$, которые задают спектр атома. В работе [45] показано, что функция Грина в виде (2.16) не имеет иных полюсов, в том числе, кулоновских. Далее, представив волновую функцию в сферических координатах $\psi = R(r)Y(\theta, \phi)$ и используя лапласиан для сферических координат (2.2) можно получить уравнение Шредингера на радиальную волновую функцию:

$$\left(\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{Z}{r} - \frac{l(l+1)}{2r^2} + E \right) rR(r) = 0, \quad (2.17)$$

решением которого являются кулоновские функции:

$$R_{nl}(r) = \left(\frac{Z}{\Gamma(\nu_{nl} + l + 1)\Gamma(\nu_{nl} - l)} \right)^{\frac{1}{2}} \left(1 + \frac{\partial \mu}{\partial \nu} \right)^{-\frac{1}{2}} \frac{\mathcal{W}_{\nu_{nl}, l + \frac{1}{2}} \left(\frac{2Zr}{\nu_{nl}} \right)}{\nu_{nl} r}, \quad (2.18)$$

произведение которых совпадает с вычетами в полюсах функции Грина (2.16):

$$\text{Res } g_l(E; r, r') = \lim_{E \rightarrow E_{nl}} (E_{nl} - E) g_l(E; r, r') = \\ = \frac{Z \mathcal{W}_{\nu_{nl}, l + \frac{1}{2}} \left(\frac{2Zr}{\nu_{nl}} \right) \mathcal{W}_{\nu_{nl}, l + \frac{1}{2}} \left(\frac{2Zr'}{\nu_{nl}} \right)}{rr' \nu_{nl}^2 \left(1 + \frac{\partial \mu}{\partial \nu} \right) \Gamma(\nu_{nl} - l) \Gamma(\nu_{nl} + l + 1)}. \quad (2.19)$$

Для устранения неопределенности при $r \rightarrow 0$ используется разложение функции Уиттекера в асимптотический ряд, оборванный на $[\nu_{nl}]$ -м члене, где $[\nu_{nl}]$ -целая часть от ν_{nl} :

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_{\nu_{nl}, l+\frac{1}{2}} \left(\frac{2Zr}{\nu_{nl}} \right) &= e^{-\left(\frac{Zr}{\nu_{nl}}\right)} \left(\frac{2Zr}{\nu_{nl}} \right)^{\nu_{nl}} \times \\ &\times \left[1 + \sum_{k=1}^{[\nu_{nl}]} \left(\frac{\nu_{nl}}{2Zr} \right)^k \frac{\left\{ \left(l + \frac{1}{2} \right)^2 - \left(\nu_{nl} - \frac{1}{2} \right)^2 \right\} \dots \left\{ \left(l + \frac{1}{2} \right)^2 - \left(\nu_{nl} + \frac{1}{2} - k \right)^2 \right\}}{k!} \right], \end{aligned} \quad (2.20)$$

таким образом обеспечивается выполнение условия $W_{\nu_{nl}, l+\frac{1}{2}} \left(\frac{2Zr}{\nu_{nl}} \right) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow 0$.

Заметим, что радиальная волновая функция в методе квантового деф-фекта имеет некоторые ограничения: областью ее применения являются состояния, эффективные главные числа и орбитальные моменты которых удовлетворяют соотношению: $\nu_{nl} > l$; для устранения этого ограничения в работе [54] было предложено модифицировать радиальную волновую функцию введя дополнительный множитель $\left(\frac{\Xi_l(E_{nl})}{\Pi_l(\nu_{nl})} \right)^{\frac{1}{2}}$.

После подстановки (2.20) в (2.18) и последующего преобразования радиальной волновой функции радиальный матричный элемент дискретно-дискретного радиационного перехода может быть представлен в виде [60]

$$\begin{aligned} \langle n'l'|r|nl \rangle &= \frac{1}{4Z} \left(\frac{2\nu'_{n'l'}}{\nu'_{n'l'} + \nu_{nl}} \right)^{\nu_{nl}+1} \left(\frac{2\nu_{nl}}{\nu'_{n'l'} + \nu_{nl}} \right)^{\nu'_{n'l'}+1} \frac{1}{\sqrt{\Gamma(\nu'_{n'l'} + l' + 1)}} \times \\ &\times \frac{1}{\sqrt{\Gamma(\nu_{nl} + l + 1)\Gamma(\nu'_{n'l'} - l')\Gamma(\nu_{nl} - l)}} \sum_{k_1=0}^{[\nu_{nl}]} \frac{(-1)^{k_1} (l - \nu_{nl} + 1)_{k_1} (-l - \nu_{nl})_{k_1}}{k_1!} \times \\ &\times \left(\frac{\nu_{nl} + \nu'_{n'l'}}{2\nu'_{n'l'}} \right)^{k_1} \sum_{k_2=0}^{[\nu'_{n'l'}]} \frac{(-1)^{k_2} (l - \nu'_{n'l'} + 1)_{k_2} (-l - \nu'_{n'l'})_{k_2}}{k_2!} \left(\frac{\nu_{nl} + \nu'_{n'l'}}{2\nu_{nl}} \right)^{k_2} \times \\ &\times \Gamma(\nu_{nl} + \nu'_{n'l'} + 2 - k_1 - k_2). \end{aligned} \quad (2.21)$$

2.2. Теория псевдопотенциала

Очевидно, что применимость метода квантового дефекта ограничена в связи с некорректным описанием взаимодействия валентного электрона с ядром и внутренними электронами в области кора. Ввиду того, что в МКД не учитывается эффективное выталкивание электрона из кора при $r < r_c$, вычисления оптических характеристик основного и нескольких нижних состояний в рамках метода недостаточно надежны, поэтому некоторые группы исследователей предлагают следующий метод: волновые функции основного и нескольких нижних состояний определяются из расчетов "ab initio", функции остальных состояний моделируются в рамках МКД - из всех этих функций строится модифицированная функция Грина [54], [61].

Однако, для более точного описания свойств низковозбужденных состояний существует и альтернативный подход – замена реального потенциала, описывающего взаимодействия в атоме, в том числе создаваемые притягивающим полем ядра и отталкивающим полем электронов, суммарным псевдопотенциалом, действующим на валентный электрон со стороны ядра и электронного остатка.

Идея псевдопотенциала была впервые представлена в работе [62] применительно к расчетам собственных функций и значений энергии электрона в кристалле; последовательная теория псевдопотенциала, в которой сформулированы основные требования, которым должен удовлетворять потенциал, была впервые изложена Филипсом и Клейнманом [63], далее Абаренковым и Хейне была предложена аппроксимация для псевдопотенциала, названная модельным потенциалом [64].

Основное положение в теории псевдопотенциала – разделение электронных состояний и электронов в атоме на две группы:

- внутренние электроны кора;
- валентные электроны и электроны проводимости (для иона в кристал-

лической решетке).

Следующим аспектом теории псевдопотенциала является приближение "замороженного кора" [65]: воздействие результирующего поля атома на внутренние электроны исключается из рассмотрения, их состояния полагаются независимыми и неизменными. В рамках этой модели возможно задать волновые функции внешних электронов, необходимые для дальнейших расчетов. Полученные функции должны быть ортогональны всем волновым функциям кора. Для того, чтобы выполнить это требование, в рассмотрение вводят псевдоэлектронные волновые функции ψ_v [66]:

$$\psi_v = \chi_v + \sum_j \langle \varphi_{cj} | \psi \rangle \varphi_{cj}, \quad (2.22)$$

где ψ_v – гладкая функция от реальной функции валентного электрона χ_v , φ_{cj} – волновая функция электрона кора.

Соответствующий подбор параметров позволяет сделать χ_v ортогональным ко всем функциям φ_{cj} j -го электрона кора.

После подстановки функции (2.22) в стационарное уравнение Шредингера получим следующее выражение:

$$\hat{H}\psi_v + \sum_j (E_v - E_{cj}) \langle \varphi_{cj} | \psi_v \rangle \varphi_{cj} = E_v \psi_v. \quad (2.23)$$

Введем нелокальный псевдопотенциал вида:

$$V_{ps}(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) + \sum_j (E_v - E_{cj}) \langle \varphi_{cj} | \psi_v \rangle \varphi_{cj}, \quad (2.24)$$

в котором первое слагаемое, потенциал ядра, отражает притягивающее дальнедействующее взаимодействие, а второе слагаемое соответствует отталкивающему короткодействующему потенциалу, характеризующему взаимодействие оптического электрона с остаточными электронами кора. При соответствующем подборе коэффициентов псевдопотенциал можно задать так, чтобы избавиться от осцилляций, присущих реальному потенциалу внутри кора.

Это обстоятельство позволило Абаренкову и Хейне предложить аппроксимацию для псевдопотенциала – модельный потенциал. При построении подобной аппроксимации учитывались следующие требования:

- объективное описание физических процессов в атоме;
- совпадение собственных значений модельного и реального потенциалов; эти значения, в свою очередь, должны совпадать с энергиями уровней валентных электронов;
- зависимость модельного потенциала от орбитальных параметров;
- кулоновская асимптотика потенциала при $r \rightarrow \infty$.

Модельный потенциал Абаренкова-Хейне был получен в виде [64]:

$$V_m(\mathbf{r}) = \sum_l \hat{V}_l(r) \hat{P}_l, \quad (2.25)$$

где оператор $\hat{V}_l(r)$ представляется кусочно-заданной функцией расстояния

$$\hat{V}_l(r) = \begin{cases} -A_l, & r \leq r_c \\ -\frac{Z}{r}, & r > r_c, \end{cases} \quad (2.26)$$

а оператор проектирования на подпространство сферических гармоник \hat{P}_l удовлетворяет следующим требованиям:

$$\hat{P}_l f(r, \theta, \varphi) = \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\theta, \varphi) \int_0^\infty Y_{lm}(\theta', \varphi') f(r, \theta', \varphi') d\Omega. \quad (2.27)$$

Аппроксимация псевдопотенциала модельным потенциалом существенно упрощает расчеты атомных свойств, а в некоторых случаях и позволяет получить аналитические выражения для волновых функций и характеристик, определяемых волновыми функциями, однако потенциал Абаренкова-Хейне имеет разрыв, что существенно ограничивает область его применения и усложняет расчеты, поэтому для определения оптических характеристик высоковозбужденных функций более удобны неразрывные модификации модельного потенциала.

2.3. Метод модельного потенциала Фьюса

Наиболее удобным методом расчета времени жизни возбужденного состояния является метод модельного потенциала Фьюса, предложенный Саймонсом [67], [68] по аналогии с методом моделирования валентной зоны в полупроводниках и диэлектриках. Метод был назван в честь Фьюса, впервые смоделировавшего в рамках квантовой волновой теории дискретный спектр двухатомных молекул. Кроме выполнения общих условий, налагаемых на модельный потенциал, к модельному потенциалу Фьюса предъявлялись следующие требования:

- потенциал должен быть центральносимметричным;
- потенциал должен учитывать эффективное выталкивание внешнего электрона из кора и эффект экранировки кулоновского поля атомного ядра.

Опираясь на эти требования и на предположение о поляризации остова валентным электроном, Г. Саймонс предложил следующий вид модельного потенциала [67]

$$\hat{V}_F(\mathbf{r}) = -\frac{Z}{r} + \sum_l \frac{B_l \hat{P}_l}{r^2} \quad (2.28)$$

Поскольку проекционный оператор \hat{P}_l действует только на угловые переменные, операция отделения радиальной переменной сохраняется в том же виде, что и для уравнения Шредингера с кулоновским потенциалом. Отделив угловые переменные в уравнении (2.17), для радиальной части волновой функции получим следующее уравнение:

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{Z}{r} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + \frac{B_l}{r^2} - E \right) r R_{nl}(r) = 0. \quad (2.29)$$

Объединим слагаемые $\sim r^{-2}$, после чего введем эффективный центробежный потенциал $V_{eff}(r)$:

$$V_{eff}(r) = \frac{\lambda(\lambda+1)}{2r^2}, \quad (2.30)$$

где λ – эффективный орбитальный параметр, для которого выполняется соотношение:

$$\lambda = \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + 2B_l} - \frac{1}{2}. \quad (2.31)$$

Таким образом, полученное уравнение Шредингера отличается от соответствующего уравнения для атома водорода заменой орбитального момента l на эффективный орбитальный параметр λ и главного квантового числа n на эффективное главное квантовое число ν_{nl} .

В связанном состоянии уравнение (2.29) имеет дискретный набор решений [60]:

$$R_{nl} = \frac{2Z^{\frac{3}{2}}}{\nu_{nl}^2} \sqrt{\frac{(2\lambda + 2)_{n_r}}{(2\lambda + 1)! n_r!}} \left(\frac{2Zr}{\nu_{nl}}\right)^\lambda e^{-\frac{Zr}{\nu_{nl}}} {}_1F_1\left(-n_r; 2\lambda + 2; \frac{2Zr}{\nu_{nl}}\right), \quad (2.32)$$

где ${}_1F_1$ – вырожденная гипергеометрическая функция,

$(a)_k = a(a + 1)(a + 2)\dots(a + k - 1)$ – символ Похгаммера, n_r – радиальное квантовое число, в большинстве случаев определяемое как $n_r = n - n_0$, где n_0 – главное квантовое число состояния с минимальной энергией из серии состояний с определенным орбитальным моментом l .

Собственные значения гамильтониана уравнения (2.29) совпадают со значениями энергии связанных состояний валентного электрона

$$E_{nl} = -\frac{Z^2}{2\nu_{nl}^2} \quad (2.33)$$

Эффективное главное квантовое число ν_{nl} и эффективный орбитальный параметр λ связаны следующим образом:

$$\nu_{nl} = n_r + \lambda + 1. \quad (2.34)$$

Для случая положительной энергии электрона $E > 0$ радиальная часть волновой функции валентного электрона принимает вид:

$$R_{El}(r) = \frac{|\Gamma\left(\lambda + 1 + \frac{iZ}{\chi}\right)|}{\Gamma(2\lambda + 2)} \sqrt{\frac{2\chi}{\pi}} e^{\frac{\pi Z}{2\chi} - i\chi r} (2\chi r)^\lambda {}_1F_1\left(\lambda + 1 + \frac{iZ}{\chi}; 2\lambda + 2; 2i\chi r\right), \quad (2.35)$$

где $\chi = \sqrt{2E}$ – импульс свободного электрона.

Радиальные волновые функции в форме (2.32) позволяют представить радиальные матричные элементы дискретно-дискретных переходов в виде:

$$\begin{aligned} \langle n'l'|r|nl \rangle &= \frac{1}{4Z} \frac{\Gamma(\lambda + \lambda' + 4)}{\sqrt{\Gamma(2\lambda + 2)\Gamma(2\lambda' + 2)}} \sqrt{\frac{(2\lambda + 2)_{n_r}}{n_r!} \frac{(2\lambda' + 2)_{n'_r}}{n'_r!}} \left(\frac{2\nu'}{\nu' + \nu}\right)^{\lambda+2} \\ &\times \left(\frac{2\nu}{\nu' + \nu}\right)^{\lambda'+2} F_2\left(\lambda + \lambda' + 4; -n_r, -n'_r; 2\lambda + 2, 2\lambda' + 2; \frac{2\nu'}{\nu' + \nu}, \frac{2\nu}{\nu' + \nu}\right), \end{aligned} \quad (2.36)$$

где F_2 —обобщенная гипергеометрическая функция двух переменных, которую можно записать в виде двукратного ряда:

$$F_2(a; b_1, b_2; c_1, c_2; x, y) = \sum_{m,n=0}^{\infty} \frac{(a)_{m+n} (b_1)_m (b_2)_n}{(c_1)_m (c_2)_n m! n!} x^m y^n \quad (2.37)$$

и удобно представить в виде однократного ряда гипергеометрических функций Гаусса ${}_2F_1$ [57]:

$$F_2(a; b_1, b_2; c_1, c_2; x, y) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(a)_m (b_1)_m}{(c_1)_m m!} x^m {}_2F_1(a + m, b_2; c_2; y). \quad (2.38)$$

Для радиальных матричных элементов дискретно-непрерывных переходов, используем выражения (2.32, 2.35):

$$\begin{aligned} \langle nl|r|El' \rangle &= \frac{\Gamma(\lambda + \lambda' + 4) \left| \Gamma\left(\lambda + 1 + \frac{iZ}{\chi}\right) \right|}{4\chi\Gamma(2\lambda' + 2)\sqrt{2\pi Z\chi}} e^{\frac{\pi Z}{2\chi}} \sqrt{\frac{(2\lambda + 2)_{n_r}}{\Gamma(2\lambda + 2)n_r!}} x_1^{\lambda+2} \times \\ &\times (-ix_2)^{\lambda'+2} F_2\left(\lambda + \lambda' + 4; -n_r, \lambda' + 1 + \frac{iZ}{\chi}; 2\lambda + 2, 2\lambda' + 2; x_1, x_2\right) = \\ &= \frac{\Gamma(\lambda + \lambda' + 4) \left| \Gamma\left(\lambda + 1 + \frac{iZ}{\chi}\right) \right|}{4\chi\Gamma(2\lambda' + 2)\sqrt{2\pi Z\chi}} e^{\frac{\pi Z}{2\chi}} \sqrt{\frac{(2\lambda + 2)_{n_r}}{\Gamma(2\lambda + 2)n_r!}} x_1^{\lambda+2} (-ix_2)^{\lambda'+2} \times \\ &\times \sum_{k=0}^{n_r} \frac{(\lambda + \lambda' + 4)_k (-n_r)_k}{(2\lambda + 2)_k k!} x_{12}^k {}_2F_1\left(k + \lambda + \lambda' + 4; \lambda' + 1 + \frac{iZ}{\chi}; 2\lambda' + 2; x_2\right), \end{aligned} \quad (2.39)$$

где аргументы гипергеометрической функции определяются выражениями:

$$x_1 = \frac{2Z}{Z + i\chi\nu}, \quad x_2 = 2 - x_1 = \frac{2i\chi\nu}{Z + i\chi\nu}.$$

Необходимо отметить, что для более точного моделирования волновой функции валентного электрона внутри атомного остова следует ввести определенные ограничения на эффективный орбитальный параметр λ [42]:

$$|\lambda - l| \leq \frac{1}{2}. \quad (2.40)$$

Так, для S -, P -состояний ионов Ca^+ , Sr^+ , Ba^+ и для S - состояний Be^+ в расчетах амплитуд радиационных переходов методом квантового дефекта эффективный орбитальный параметр был уменьшен на единицу, что соответствует ослаблению центробежного потенциала и соответствующего выталкивания электрона из кора и более правильно моделирует взаимодействие оптического электрона с ионным остатком на малых расстояниях.

2.4. Суммы сил осцилляторов и первых моментов сил осцилляторов

Одним из критериев применимости модельного атомного потенциала в расчетах скоростей радиационных переходов следует считать выполнение правила Томаса-Райхе-Куна для сумм сил осцилляторов внутриатомных переходов, поскольку, как будет показано в главе 3, численные значения термоиндуцированных сдвигов и уширений ридберговских состояний могут быть выражены через соответствующие суммы сил осцилляторов и первых моментов сил осцилляторов.

Концепция силы осциллятора сформировалась как проявление спектроскопического правила соответствия между квантовым и классическим подходами: излучающий атом рассматривался как совокупность гармонических осцилляторов с собственными частотами, соответствующими частотам переходов между связанными энергетическими состояниями. Подобные виртуальные осцилляторы, поставленные в соответствие переходу с определенной частотой, называются осцилляторами перехода. Вклад определенного осцилля-

тора перехода в общую количественную характеристику реакции атома на излучение определяются силой осциллятора [24]

$$f_{n'n} = 2\omega_{n'n} |\langle n'l|z|nl \rangle|^2. \quad (2.41)$$

Из определения (2.41) очевидно, что сила осциллятора отрицательна для распада ($\omega_{n'n} < 0$) и положительна ($\omega_{n'n} > 0$) для возбуждения состояния $|nl\rangle$.

Для атома в целом выполняется правило Томаса-Райхе-Куна для суммы осцилляторов по всем возможным энергетическим состояниям:

$$S_{nl}(0) = \sum f_{n'n} = N, \quad (2.42)$$

где N - число электронов.

В одноэлектронном приближении, основывающемся на предположении, что взаимодействие с внешним полем происходит за счет изменений состояния валентного электрона, правило сумм трансформируется следующим образом:

$$S_{nl}(0) = \sum f_{n'n} = 1. \quad (2.43)$$

В этом случае внутренние электроны и их состояния исключаются из рассмотрения и не присутствуют в суммировании.

Преобразуем выражение для сумм сил осцилляторов к такому виду, чтобы можно было оценить соответствие матричных элементов разрешенных переходов, рассчитанных с волновыми функциями модельного потенциала правилу сумм Томаса-Райхе-Куна:

$$\begin{aligned} S_{nl}(0) &= \frac{1}{2l+1} \sum_{m=-l}^l \sum_{n'l'm'} 2\omega_{n'n} |\langle n'l'm'|z|nlm \rangle|^2 = \\ &= \frac{1}{2l+1} \sum_{m=-l}^l \sum_{n'l'm'} (\langle nlm|[z, \hat{H}]|n'l'm' \rangle \langle n'l'm'|z|nlm \rangle - \\ &\quad - \langle nlm|z|n'l'm' \rangle \langle n'l'm'|[z, \hat{H}]|nlm \rangle). \end{aligned} \quad (2.44)$$

Учитывая, что и для гамильтониана МПФ, и для гамильтониана МКД выполняется условие полноты собственных функций:

$$\sum_{n'l'm'} \langle \mathbf{r} | n'l'm' \rangle \langle n'l'm' | \mathbf{r}' \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (2.45)$$

выражение (2.44) преобразуется к виду:

$$S_{nl}(0) = \frac{1}{2l+1} \sum_{m=-l}^l \langle nlm | [[z, \hat{H}], z] | nlm \rangle. \quad (2.46)$$

используя известные значения коммутаторов $[\mathbf{r}, \mathbf{p}^2] = 2i\mathbf{p}$, $[z, \hat{p}_z] = i$, получаем для гамильтониана \hat{H}_{QD} , используемого в методе квантового дефекта, правило сумм сил осцилляторов:

$$S_{nl}(0) = \frac{1}{2l+1} \sum_{m=-l}^l \left\langle nlm \left| \left[\left[z, \frac{\hat{p}^2}{2} - \frac{Z}{r} \right], z \right] \right| nlm \right\rangle = 1, \quad (2.47)$$

тогда как для гамильтониана МПФ эта величина отклонится от правила Томаса-Райхе-Куна вследствие появления вклада двойного коммутатора декартовой компоненты z и оператора проектирования в общую сумму:

$$\begin{aligned} S_{nl}(0) &= \frac{1}{2l+1} \sum_{m=-l}^l \left\langle nlm \left| \left[\left[z, \frac{\hat{p}^2}{2} - \frac{Z}{r} + \sum_{\nu'} \frac{B_{\nu'} \hat{P}_{\nu'}}{r^2} \right], z \right] \right| nlm \right\rangle = \\ &= 1 + \frac{1}{2l+1} \sum_{m=-l}^l \left\langle lm \left| \left[\left[\cos \theta, \sum_{\nu'} B_{\nu'} \hat{P}_{\nu'} \right], \cos \theta \right] \right| lm \right\rangle. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Применяя соотношение для сферических функций [43]:

$$\cos \theta Y_{lm} = \sqrt{\frac{(l+1+m)(l+1-m)}{(2l+3)(2l+1)}} Y_{l+1,m} + \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}} Y_{l-1,m} \quad (2.49)$$

и используя представление проекционного оператора в собственном базисе

$$\langle n | \hat{P}_k | m \rangle = \langle n | k \rangle \langle k | m \rangle = \delta_{nk} \delta_{mk}, \quad (2.50)$$

получим выражение для матричного элемента, в которое войдут только сла-

гаемые с одинаковыми орбитальными моментами l в обкладках:

$$\begin{aligned} \left\langle lm \left| \left[\left[\cos \theta, \sum_{l'} B_{l'} \hat{P}_{l'} \right], \cos \theta \right] \right| lm \right\rangle = 2 \left(- \left[\frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+3)(2l+1)} + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{l^2 - m^2}{(2l+1)(2l-1)} \right] B_l + \frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+1)(2l+3)} B_{l+1} + \frac{l^2 - m^2}{(2l+1)(2l-1)} B_{l-1} \right). \end{aligned} \quad (2.51)$$

Подставляя полученное выражение в (2.49) и выполняя суммирование и усреднение по m , учитывая, что $\sum_{m=-l}^l m^2 = \frac{1}{3}l(l+1)(2l+1)$, получим окончательное выражение для суммы сил осцилляторов дипольных переходов, рассчитанной методом модельного потенциала Фьюса:

$$\begin{aligned} S_{nl}(0) &= 1 + \frac{2}{3(2l+1)} ((l+1)B_{l+1} + lB_{l-1} - (2l+1)B_l) = \\ &= 1 + \frac{2}{3(2l+1)} \sum_{l'=l\pm 1} l_{>} (B_{l'} - B_l), \end{aligned} \quad (2.52)$$

Зависимость коэффициента $B_l = \frac{1}{2}(\lambda(\lambda+1) - l(l+1))$ от главного квантового числа n достаточно быстро исчезает с ростом n , поэтому B_l остается практически постоянным для всей серии ридберговских уровней с данным l . Отметим, что отклонение от правила сумм при расчетах матричных элементов с радиальными волновыми функциями МПФ может быть весьма существенным для многоэлектронных атомов, что снижает достоверность оценок оптических характеристик, которые могут быть выражены через эти суммы.

Термоиндуцированный энергетический сдвиг ε_{nl}^{BBR} высоковозбужденных уровней может быть определен через сумму сил осцилляторов, $S_{nl}(0)$, что будет подробнее рассмотрено в главе 3, тогда как тепловое уширение ридберговских уровней с большими орбитальными моментами Γ_{nl}^{BBR} пропорционально сумме первых моментов сил осцилляторов $S_{nl}(1)$:

$$S_{nl}(1) = \frac{2}{2l+1} \sum_{m=-l}^l \sum_{n'l'm'} \omega_{n'n}^2 |\langle n'l'm' | z | nlm \rangle|^2. \quad (2.53)$$

Выполняя преобразования, аналогичные (2.44), для суммы моментов сил

осцилляторов также получим выражение, содержащее коммутаторы гамильтониана \hat{H} с компонентой радиус-вектора z .

$$S_{nl}(1) = \frac{2}{2l+1} \sum_{m=-l}^l \langle nlm | [z, \hat{H}] [\hat{H}, z] | nlm \rangle. \quad (2.54)$$

Выполним преобразование произведения коммутаторов:

$$\begin{aligned} [z, \hat{H}] [\hat{H}, z] &= \left[z, \frac{\hat{p}^2}{2} - \frac{Z}{r} + \sum_{l_1} \frac{B_{l_1} \hat{P}_{l_1}}{r^2} \right] \left[\frac{\hat{p}^2}{2} - \frac{Z}{r} + \sum_{l_2} \frac{B_{l_2} \hat{P}_{l_2}}{r^2}, z \right] = \\ &= \left(i\hat{p}_z + \sum_{l_1} \frac{B_{l_1}}{r} [\cos \theta, \hat{P}_{l_1}] \right) \left(-i\hat{p}_z + \sum_{l_2} \frac{B_{l_2}}{r} [\hat{P}_{l_2}, \cos \theta] \right) = \\ &= \hat{p}_z^2 + i \sum_{l_1} B_{l_1} \left(\hat{p}_z \left[\frac{\hat{P}_{l_1}}{r}, \cos \theta \right] + \left[\frac{\hat{P}_{l_1}}{r}, \cos \theta \right] \hat{p}_z \right) - \\ &\quad - \sum_{l_1, l_2} \frac{B_{l_1} B_{l_2}}{r^2} [\hat{P}_{l_1}, \cos \theta] [\hat{P}_{l_2}, \cos \theta]. \end{aligned} \quad (2.55)$$

Каждое из трех слагаемых содержит нелокальную часть и вносит поправки в правило суммирования моментов, что приводит к погрешностям при расчетах термоиндуцированных уширений. Рассмотрим вклад отдельных слагаемых в общую сумму моментов сил осцилляторов.

$$\hat{p}_z^2 = \frac{2}{3} (\hat{H} - \hat{V}). \quad (2.56)$$

Используя средние значения операторов

$$\begin{aligned} \langle nl | \hat{H} | nl \rangle &= -\frac{Z^2}{2\nu_{nl}^2}; \quad \langle nl | \frac{Z}{r} | nl \rangle = \frac{Z^2}{\nu_{nl}^2}; \\ \langle nl | \frac{B_l}{r^2} | nl \rangle &= \frac{Z^2 B_l}{\nu_{nl}^3 (\lambda + 1)}, \end{aligned} \quad (2.57)$$

можем представить вклад квадрата компоненты z импульса в виде:

$$\langle nl | \hat{p}_z^2 | nl \rangle = \frac{Z^2}{3\nu_{nl}^2} \left(1 - \frac{2B_l}{\nu_{nl}(\lambda + 1/2)} \right). \quad (2.58)$$

Для того, чтобы найти среднее значение слагаемых в выражении (2.55), содержащих операторы \hat{p}_z в первой степени, кроме использования соотноше-

ния для произведения сферических функций (2.49) требуется также применение правила действия z -компоненты оператора импульса $\hat{p}_z = -i\frac{\partial}{\partial z} = -i\nabla_z$ на произведение радиальной и сферической функций [43]:

$$\begin{aligned} \nabla_z f(r) Y_{lm}(\theta, \phi) = & \sqrt{\frac{(l+1+m)(l+1-m)}{(2l+3)(2l+1)}} \left(f'(r) - \frac{l}{r} f(r) \right) Y_{l+1,m} + \\ & + \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}} \left(f'(r) + \frac{l+1}{r} f(r) \right) Y_{l-1,m}. \end{aligned} \quad (2.59)$$

Подстановка этих соотношений в общее выражение для суммы первых моментов сил осцилляторов после интегрирования по угловым переменным и усреднения по магнитным квантовым числам m позволяет представить средние значения второго и третьего слагаемого выражения (2.55) в виде линейной комбинации параметров B_l , $B_{l\pm 1}$ нелокальной части модельного потенциала Фьюса. Коэффициенты при этих параметрах представляют собой выражения, сводящиеся к произведениям выражений, зависящих от орбитального момента l и среднего значения радиального оператора r^{-2} , подчиняющегося следующим соотношениям:

$$\langle R_{nl} | r^{-1} | R'_{nl} \rangle = -\frac{1}{2} \langle R_{nl} | r^{-2} | R_{nl} \rangle = -\frac{Z^2}{2\nu_{nl}^3 (\lambda + 1/2)}. \quad (2.60)$$

Окончательно, вклад линейных по B_l слагаемых уравнения (2.55) в сумму первых моментов сил осцилляторов может быть представлен следующим образом:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2l+1} \sum_{m=-l}^l \left\langle nlm \left| \sum_{l_1} B_{l_1} \left(\hat{p}_z \left[\frac{\hat{P}_{l_1}}{r}, \cos \theta \right] + \left[\frac{\hat{P}_{l_1}}{r}, \cos \theta \right] \hat{p}_z \right) \right| nlm \right\rangle = \\ & = \frac{Z^2}{3\nu_{nl}^3 (\lambda + 1/2)} \left[\frac{(l+1)(3l+2)B_{l+1} - l(3l+1)B_{l-1}}{2l+1} - 2B_l \right]. \end{aligned} \quad (2.61)$$

Отклонение от правила сумм, определяемое последним слагаемым выражения (2.55) может быть рассчитано по аналогии с вычислением средних значений коммутаторов, входящих в сумму $S_{nl}(0)$, рассчитанную с волновыми функциями модельного потенциала Фьюса. Результат вклада этого слагаемого определяется линейной комбинацией квадратичных выражений для

параметров B_l , $B_{l\pm 1}$, коэффициенты при которых также могут быть представлены в виде произведения функций от орбитальных моментов и среднего значения оператора r^{-2} :

$$-\frac{1}{2l+1} \sum_{m=-l}^l \left\langle nlm \left| \sum_{l_1, l_2} \frac{B_{l_1} B_{l_2}}{r^2} [\hat{P}_{l_1}, \cos \theta] [\hat{P}_{l_2}, \cos \theta] \right| nlm \right\rangle =$$

$$= \frac{Z^2}{3\nu_{nl}^3(\lambda + 1/2)(2l + 1)} [l(B_l - B_{l-1})^2 + (l + 1)(B_l - B_{l+1})^2]. \quad (2.62)$$

Таким образом, правило суммирования первых моментов сил осцилляторов электродипольных одноэлектронных переходов в приближении метода модельного потенциала Фьюса выглядит следующим образом:

$$S_{nl}(1) = \frac{2Z^2}{3\nu_{nl}^2} \left[1 + \frac{l(B_l - B_{l-1})^2 + (l + 1)(B_l - B_{l+1})^2}{\nu_{nl}(\lambda + 1/2)(2l + 1)} + \right.$$

$$\left. + \frac{(l + 1)(3l + 2)B_{l+1} - l(3l + 1)B_{l-1} - 2(2l + 1)B_l}{\nu_{nl}(\lambda + 1/2)(2l + 1)} \right]$$

$$= \frac{2Z^2}{3\nu_{nl}^2} \left[1 + \frac{1}{\nu_{nl}(\lambda_l + 1/2)(2l + 1)} \sum_{l' = l \pm 1} l_{>} ((B_l - B_{l'})^2 + \right.$$

$$\left. + (-1)^{l_{>} - l + 1} (l_{>} + 2l + 1) B_{l'} - 2B_l \right]. \quad (2.63)$$

2.5. Результаты численных расчетов времен жизни энергетических уровней ионов группы Па

В данном разделе приведено сравнение результатов численных расчетов естественных времен жизни τ_{nl}^{sp} ионов щелочноземельных элементов, выполненных методами МПФ и МКД, с наиболее достоверными данными научной литературы. Энергии уровней, являющиеся основными входными параметрами расчетов, были взяты из обобщенных спектроскопических баз данных [69],[70]. Для определения энергий высоковозбужденных состояний использовалась полиномиальная аппроксимация квантового дефекта (2.7); рассчитанные коэффициенты полиномов для уровней энергий щелочноземельных ионов представлены в работе [26].

На примере расчетов естественных времен жизни низкоэнергетических уровней проведен анализ области наилучшей применимости полуэмпирических методов квантового дефекта и модельного потенциала Фьюса.

Be^+

Бериллий - элемент, изучение которого крайне важно для астрофизических исследований. Высокая распространенность атомов и ионов бериллия в космическом пространстве, обусловленная реакциями тяжелых ядер и космических лучей в межзвездной среде, позволяет использовать информацию о распространении бериллия и спектральных характеристиках его ионов и соединений для оценки достоверности космологических моделей. Кроме того, наличие Be^+ в составе поверхности Солнца делает исследование характерных резонансных дуплетов Be^+ 3130 Å незаменимым для описания процессов нуклеогенеза.

Однократно ионизированный бериллий в высоковозбужденных состояниях может быть использован и в экспериментах, осуществляющих квантовое кодирование информации – проводятся исследования применимости однократных ионов бериллия при создании квантового логического элемента [71].

Применение одиночных ионов бериллия может быть востребовано при конструировании современного стандарта частоты-времени, а именно в процессах симпатического охлаждения контрольных ионов в парах Ca^+-Be^+ , Al^+-Be^+ [71],[72], что способствует росту интереса к исследованиям оптических характеристик Be^+ [73],[74].

Бериллий – самый легкий элемент щелочноземельной группы, однократный ион бериллия имеет наиболее простое строение кора, поэтому из всех ионов второй группы этот ион наиболее явно проявляет свойства водородоподобного иона. Квантовый дефект энергетических уровней Be^+ невелик даже для состояний с $l = 0$, $l = 1$, поэтому оптические характеристики, такие

как времена жизни и термоиндуцированные сдвиг и уширение, описываются одинаково хорошо как в формализме метода квантового дефекта, так и с помощью метода модельного потенциала Фьюса. Расчеты естественных времен жизни состояний с главными квантовыми числами $n \leq 10$ и орбитальными моментами $l = 0, 1, 2$, выполненные по методам МКД и МПФ, представлены в таблицах 2.1, 2.2; приведено сравнение численных значений, полученных полуэмпирическими методами, используемыми в диссертационной работе, с соответствующими расчетами, выполненными методами релятивистской многочатичной теории [75], и расчетами в приближении Хартри-Слетера [76].

Анализ приведенных данных показывает, что отклонение рассчитанных времен жизни низкоэнергетических состояний от наиболее достоверных данных, представленных в литературе, не превышает 3 %, поэтому и аппроксимации для высоковозбужденных уровней Be^+ позволяют получить достоверные численные значения.

Mg^+

Оптические свойства однократного иона магния, также как и характеристики однократного иона бериллия, представляют интерес для астрофизических исследований. Резонансные линии однократного иона магния остаются достаточно сильными в широком диапазоне спектра, что позволяет рассматривать эти линии в качестве "детекторов" при проведении спектроскопического исследования. Анализ спектральных свойств Mg^+ широко используется в высокоточной диагностике состояний звездных хромосфер, в том числе, солнечной хромосферы. В экспериментах по созданию новейшего частотно-временного стандарта исследуется применимость Mg^+ в качестве спарринг-иона при осуществлении симпатического охлаждения [77].

До настоящего времени в научной литературе были известны вероятности радиационных переходов и времена жизни для уровней с $n < 10$ [78], [79], а также поляризуемости состояний с главным квантовым числом $n < 17$ [80].

Таблица 2.1. Естественные времена жизни S -, P -состояний ионов Be^+ .

Состояние	J	τ_{nl} , нс				
		МКД	МПФ	[69]	[76]	[75]
$3S$	1/2	2.564	2.461	2.5	2.473	2.451
$4S$	1/2	4.509	4.200	4.3	4.196	4.174
$5S$	1/2	7.935	7.237	7.3	7.213	7.194
$6S$	1/2	13.07	11.76	12	11.70	11.673
$7S$	1/2	20.25	18.03	18.5	18.02	17.918
$8S$	1/2	29.81	26.34	26.5	26.22	26.17
$9S$	1/2	42.07	37.00	37.5	36.81	36.78
$10S$	1/2	57.39	50.28	51	50.02	49.89
$2P$	1/2	8.799	8.509	8.9	8.930	8.850
$2P$	3/2	8.792	8.504	-	8.930	8.850
$3P$	1/2	5.387	5.521	5.6	5.431	5.417
$3P$	3/2	5.389	5.523	-	5.431	5.417
$4P$	1/2	7.829	8.231	8.3	8.030	8.072
$4P$	3/2	7.832	8.234	-	8.030	8.086
$5P$	1/2	12.33	13.15	13.5	12.76	12.935
$5P$	3/2	12.33	13.16	-	12.76	12.918
$6P$	1/2	18.91	20.39	20.5	19.71	20.04
$6P$	3/2	18.92	20.40	-	19.71	20.05
$7P$	1/2	27.86	30.29	30.5	29.19	29.78
$7P$	3/2	27.88	30.30	-	29.19	29.78
$8P$	1/2	39.53	43.26	43.5	41.57	42.47
$9P$	1/2	54.26	59.72	60.1	57.25	58.86
$9P$	3/2	54.28	59.73	-	57.25	58.86

Таблица 2.2. Естественные времена жизни возбужденных D -состояний Be^+ .

Состояние	J	τ_{nl} , нс				
		МКД	МПФ	[69]	[76]	[75]
$3D$	$3/2$	0.903	0.862	0.9	0.9110	0.904
$3D$	$5/2$	0.903	0.862	-	0.9110	0.901
$4D$	$3/2$	2.069	1.991	2.1	2.081	2.067
$4D$	$5/2$	2.069	1.991	-	2.081	2.066
$4D$	$3/2$	3.953	3.815	3.9	3.971	3.950
$5D$	$5/2$	3.953	3.816	-	3.971	3.938
$5D$	$3/2$	6.727	6.505	6.7	6.754	6.701
$6D$	$5/2$	6.728	6.506	-	6.754	6.700
$6D$	$3/2$	10.57	10.23	10.5	10.61	10.522
$7D$	$5/2$	10.57	10.23	-	10.61	10.518
$8D$	$3/2$	15.64	15.15	15.5	15.71	15.58
$8D$	$5/2$	15.65	15.16	-	15.71	15.58
$9D$	$3/2$	22.13	21.45	22	22.22	22.05
$9D$	$5/2$	22.14	21.46	-	22.22	22.01

В работе [79] для расчетов естественных времен жизни применялся метод Хартри-Фока, в работе [78] вычисления проводились в формализме модельного потенциала слабо связанного электрона.

В таблицах 2.3, 2.4 представлено сравнение естественных времен жизни низкоэнергетических состояний ионов магния, рассчитанных методами МПФ и МКД, с наиболее достоверными теоретическими и экспериментальными данными.

Таблица 2.3. Естественные времена жизни S -, P -состояний Mg^+ .

Состояние	J	τ_{nl} , нс				
		МКД	МПФ	[79]	[78]	[69]
$4S$	1/2	3.139	2.786	2.90	2.95	2.8
$5S$	1/2	5.486	5.052	5.04	5.05	5.1
$6S$	1/2	9.607	8.966	8.76	8.18	9.4
$7S$	1/2	15.79	14.80	14.2	12.9	16
$8S$	1/2	24.42	22.92	21.8	19.3	25
$9S$	1/2	32.93	33.70	31.7	27.9	36
$10S$	1/2	50.71	47.51	-	-	53
$3P$	1/2	3.899	5.209	3.85	3.64	4
$3P$	3/2	3.869	5.168	3.81	3.61	-
$4P$	1/2	19.19	19.82	18.8	19.0	20
$4P$	3/2	19.05	19.64	18.7	18.8	-
$5P$	1/2	51.43	53.07	45.5	48.3	53
$5P$	3/2	51.17	52.55	45.5	48.2	-
$6P$	1/2	108.0	115.2	87.5	108	110
$6P$	3/2	107.5	114.08	87.8	108	-
$7P$	1/2	197.5	217.0	148	200	200
$7P$	3/2	196.8	214.7	149	200	-
$8P$	1/2	328.5	369.7	232	321	340
$8P$	3/2	327.5	365.7	234	321	-
$9P$	1/2	509.5	584.3	331	477	530
$9P$	3/2	508.0	577.7	334	478	-

Таблица 2.4. Естественные времена жизни D -состояний Mg^+ .

Состояние	J	τ_{nl} , нс				
		МКД	МПФ	[79]	[78]	[69]
$3D$	$3/2$	2.095	2.477	2.04	1.96	-
$3D$	$5/2$	2.105	2.490	2.05	1.97	2.2
$4D$	$3/2$	7.837	7.392	7.43	7.31	-
$4D$	$5/2$	7.899	7.444	7.46	7.35	8.1
$5D$	$3/2$	19.84	16.32	18.3	18.1	-
$5D$	$5/2$	20.03	16.45	18.4	18.2	20
$6D$	$3/2$	39.86	30.17	36.2	35.6	-
$6D$	$5/2$	40.29	30.42	36.4	35.8	41
$7D$	$3/2$	69.30	49.81	62.3	61.2	-
$7D$	$5/2$	70.07	50.25	62.7	61.4	72
$8D$	$3/2$	109.4	76.15	97.1	95.8	-
$8D$	$5/2$	110.7	76.83	97.8	96.1	110
$9D$	$3/2$	161.4	110.0	118	70.4	-
$9D$	$5/2$	163.3	111.1	119	70.6	170

Необходимо отметить, что даже наиболее точные имеющиеся в литературе экспериментальные и теоретические результаты существенно различаются между собой, более того, времена жизни, опубликованные в работах [56], [81] отличаются от численных значений, представленных в базе данных [69], на порядок и более, поэтому вычисления, выполненные методами МПФ и МКД, представляются приемлемыми для оценок времен жизни произвольных высоковозбужденных уровней, которые невозможно получить с помощью других методов численных расчетов.

Ca⁺

Однократный ион кальция находит применение во многих теоретических и практических исследованиях: в астрофизике знание оптических характеристик Ca⁺ востребовано при изучении радиационных свойств звездных объектов, исследование спектров Ca⁺ может быть информативным при определении химического состава звезд и расчетах передачи энергии в звездах. Кроме того, Ca⁺ применим и в лабораторных экспериментах – вследствие специфики спектра, а именно наличия метастабильных состояний $3d^2D_{3/2}$, $3d^2D_{5/2}$ [82], однократный ион кальция может быть использован для сверхточных измерений: стандартизации частот, создания оптических часов и уточнения постоянной тонкой структуры.

Ион Ca⁺ на сегодняшний момент является одним из наиболее подходящих квантовых объектов для реализации квантовых логических устройств в ионных ловушках [12]. В научной литературе представлены, в основном, исследования основного, метастабильного и еще нескольких нижних энергетических уровней иона кальция. В работах [50], [83] были исследованы мультипольные поляризуемости, силы осцилляторов, времена жизни энергетических уровней с главными квантовыми числами $n \leq 7$, в работе [84] вычислены дипольные поляризуемости нижних уровней.

В таблицах 2.5, 2.6 приведено сравнение времен жизни энергетических состояний однократных ионов кальция, рассчитанных методами МПФ и МКД, с соответствующими данными из обобщенной спектроскопической базы, а также с результатами вычислений релятивистским методом Хартри-Фока [85] и результатами применения метода, в котором используется альтернативный модельный потенциал [86].

Таблица 2.5. Естественные времена жизни S -, P -состояний Ca^+ .

Состояние	J	τ_{nl} , нс				
		МКД	МПФ	[69]	[85]	[86]
$5S$	1/2	4.504	2.854	4.5	3.91	4.15
$6S$	1/2	7.248	4.996	7.2	6.39	6.76
$7S$	1/2	12.00	8.628	12	10.63	11.26
$8S$	1/2	18.96	13.96	19	-	-
$9S$	1/2	28.46	21.28	-	-	-
$10S$	1/2	40.90	30.91	41	-	-
$4P$	1/2	6.727	6.617	6.4	6.69	6.85
$4P$	3/2	6.547	6.445	6.4	-	-
$5P$	1/2	34.14	29.34	29	35.35	34.8
$5P$	3/2	32.83	28.10	29	-	-
$6P$	1/2	94.69	85.24	70	99.8	90
$6P$	3/2	90.99	80.86	70	-	-
$7P$	1/2	184.61	192.1	130	-	-
$7P$	3/2	177.2	180.2	-	-	-
$8P$	1/2	294.0	340.8	220	-	-
$8P$	3/2	283	364.5	-	-	-
$9P$	1/2	417.8	614.9	330	-	-
$9P$	3/2	405.7	594.2	-	-	-
$10P$	1/2	554.6	951.9	470	-	-
$10P$	3/2	540	938.1	-	-	-

Таблица 2.6. Естественные времена жизни D , F -состояний Ca^+ .

Состояние	J	τ_{nl} , нс				
		МКД	МПФ	[69]	[85]	[86]
$4D$	$3/2$	2.819	4.075	2.9	2.85	2.89
$4D$	$5/2$	2.841	4.155	-	-	-
$5D$	$3/2$	5.573	6.956	6.1	6.21	6.20
$5D$	$5/2$	5.633	7.056	6.1	-	-
$6D$	$3/2$	9.929	11.78	11	-	-
$6D$	$5/2$	10.05	11.96	11	-	-
$7D$	$3/2$	16.11	18.76	19	-	-
$7D$	$5/2$	16.32	18.96	19	-	-
$8D$	$3/2$	24.38	28.27	30	-	-
$8D$	$5/2$	24.72	28.54	30	-	-
$9D$	$3/2$	35.01	40.68	44	-	-
$9D$	$5/2$	35.50	41.04	44	-	-
$10D$	$3/2$	48.23	56.38	61	-	-
$10D$	$5/2$	48.93	56.85	61	-	-
$4F$	$5/2, 7/2$	4.178	1.43	3	3.54	3.90
$5F$	$5/2, 7/2$	7.752	2.56	5.1	-	-
$6F$	$5/2, 7/2$	12.97	4.22	8.1	-	-
$7F$	$5/2, 7/2$	20.20	6.52	12	-	-
$8F$	$5/2, 7/2$	29.78	9.57	18	-	-
$9F$	$5/2, 7/2$	42.05	13.5	25	-	-
$10F$	$5/2, 7/2$	57.33	18.3	34	-	-

Заметим, что времена жизни S -, P -, F -состояний, рассчитанных с волновыми функциями МКД, более согласуются с имеющимися в литературе

данными, тогда как расчеты времен жизни D -состояний более точны при выполнении вычислений методом МПФ.

Sr^+

Однократный ион стронция, также как и ион кальция, имеет в своем энергетическом спектре долгоживущий метастабильный уровень, наличие которого позволяет применять этот ион в качестве контрольного при конструировании оптического стандарта частоты [87], а также использовать его в экспериментах по созданию квантового логического элемента [15]. Кроме того, информация об оптических свойствах иона стронция также необходима при синтезе молекул, например, Sr^+Ar и Sr^+Kr .

Изучение оптических характеристик Sr^+ имеет большое значение и для астрофизики — точная информация о численных значениях этих характеристик важна для определения химического звезд и описания эволюции холодных звезд - гигантов, например, в работе [23] значения времен жизни и сил осцилляторов Sr^+ используются для определения химического строения звезды χ Lupi.

Анализ данных, приведенных в таблицах 2.7, 2.8, показывает, что метод квантового дефекта и метод модельного потенциала в расчетах времен жизни ионов стронция с невысокими главными квантовыми числами n могут применяться альтернативно, причем для некоторых состояний наилучшее согласие с данными, имеющимися в литературе, получается при вычислении методом МПФ [88], для других же состояний результаты расчетов времен жизни методом МКД более близки к значениям, представленным в обобщенной базе спектроскопических характеристик [69] и значениям, вычисленным релятивистским методом Хартри-Фока [89]. Результаты численных расчетов демонстрируют хорошее согласие с имеющимися в литературе данными, поэтому МПФ и МКД представляются применимыми к оценкам времен жизни возбужденных состояний ионов щелочно-земельных элементов.

Таблица 2.7. Естественные времена жизни S -, P -состояний Sr^+ .

Состояние	J	τ_{nl} , нс			
		МКД	МПФ	[69]	[89]
6 <i>S</i>	1/2	5.203	3.442	5.2	4.97
7 <i>S</i>	1/2	8.322	5.895	8.3	7.32
8 <i>S</i>	1/2	13.68	10.02	14	11.76
9 <i>S</i>	1/2	21.46	16.10	22	18.41
10 <i>S</i>	1/2	32.02	24.43	32	22.44
11 <i>S</i>	1/2	45.83	35.4	45	-
12 <i>S</i>	1/2	63.13	49.15	65	-
13 <i>S</i>	1/2	84.81	66.55	95	-
14 <i>S</i>	1/2	110.7	87.27	130	-
15 <i>S</i>	1/2	141.7	112.3	170	-
5 <i>P</i>	1/2	7.10	7.434	7.4	7.71
5 <i>P</i>	3/2	6.428	6.754	6.6	6.96
6 <i>P</i>	1/2	34.54	29.98	28	37.50
6 <i>P</i>	3/2	28.94	25.66	28	33.8
7 <i>P</i>	1/2	97.23	80.1	72	96.41
7 <i>P</i>	3/2	78.11	66.45	72	88.55
8 <i>P</i>	1/2	147.4	136.4	140	178.3
8 <i>P</i>	3/2	149.3	135.9	140	170.6
9 <i>P</i>	1/2	230.0	246.9	-	446.3
9 <i>P</i>	3/2	239.4	244.5	-	441.9
10 <i>P</i>	1/2	320.3	396.3	-	651.1
10 <i>P</i>	3/2	335.9	390.4	-	648.7

Таблица 2.8. Естественные времена жизни D , F -состояний Sr^+

Конфигурация	J	τ_{nl} , нс			
		МКД	МПФ	[69]	[89]
$5D$	$3/2$	3.526	4.855	3.8	3.62
$5D$	$5/2$	3.612	4.928	3.8	3.85
$6D$	$3/2$	6.059	7.696	7	6.60
$6D$	$5/2$	6.251	7.845	7	6.90
$7D$	$3/2$	9.934	12.41	12	11.28
$7D$	$5/2$	10.29	12.68	12	11.70
$8D$	$3/2$	15.25	19.10	18	18.15
$8D$	$5/2$	15.83	19.56	18	18.72
$9D$	$3/2$	22.23	28.79	28	24.91
$9D$	$5/2$	23.09	28.79	28	25.58
$10D$	$5/2$	30.74	39.54	40	33.70
$10D$	$5/2$	32.27	40.74	40	34.53
$4F$	$5/2, 7/2$	3.639	1.65	3	3.23
$5F$	$5/2, 7/2$	6.326	2.92	4.5	5.33
$6F$	$5/2, 7/2$	10.27	4.82	7.1	8.52
$7F$	$5/2, 7/2$	15.73	7.45	11	12.85
$8F$	$5/2, 7/2$	22.88	10.93	15	18.67
$9F$	$5/2, 7/2$	32.14	15.41	21	26.11
$10F$	$5/2, 7/2$	43.67	21.0	28	35.3
$11F$	$5/2, 7/2$	57.70	27.8	39	-
$12F$	$5/2, 7/2$	74.54	35.9	50	-

2.6. Выводы ко второй главе

Результаты выполненных расчетов продемонстрировали одинаковую точность полуэмпирических методов МПФ и МКД в расчетах вероятностей спонтанного распада низких энергетических уровней ионов группы IIa. Использование МПФ для высоких уровней представляется менее обоснованным вследствие неточности воспроизведения правил сумм сил осцилляторов, что связано, по-видимому, с неточным поведением радиальных волновых функций ридберговских состояний на малых расстояниях от ядра. Область малых расстояний дает наибольший вклад в матричный элемент дипольного перехода в низшие состояния. В этой области волновые функции МКД имеют большое количество узлов и поэтому более точно воспроизводят волновые функции ридберговского электрона.

Глава 3

Асимптотические аппроксимации для спонтанных и термоиндуцированных уширений и сдвигов ридберговских уровней энергии ионов группы Па

3.1. Сравнение скоростей спонтанных и термоиндуцированных переходов

Для того, чтобы получить полную информацию о спектральных характеристиках большого количества возбужденных уровней, необходимо не только рассчитать общую ширину уровня, определяемую суммой естественной ширины и индуцированного уширения, но и отдельно проанализировать вклад четырех групп радиационных переходов:

- спонтанные распады;
- термоиндуцированные распады;
- термоиндуцированные возбуждения в состояния дискретного спектра;
- термоиндуцированные переходы в состояния континуума.

Скорость спонтанных распадов, в атомной системе единиц равная естественной ширине уровня, может быть определена по формуле (1.2):

$$\Gamma_{nl} = \frac{4}{3c^3(2l+1)} \sum_{n',l'=l\pm 1} l > \omega_{nn'}^3 |\langle n'l'|r|nl \rangle|^2. \quad (3.1)$$

Выражение для общей скорости термоиндуцированного распада Γ_{nl}^{BBR} (1.27) позволяет выделить скорости распадов Γ_{nl}^d , возбуждений Γ_{nl}^e и иониза-

ции Γ_{nl}^c :

$$\Gamma_{nl}^{d(e)} = \frac{4}{3c^3(2l+1)} \sum_{n', l' = l \pm 1}^{E_{n'l'} < (>) E_{nl}} l_{>} \frac{|\omega_{n'n}|^3 |\langle n'l' | r | nl \rangle|^2}{e^{|\omega_{n'n}|/kT} - 1}, \quad (3.2)$$

$$\Gamma_{nl}^c = \frac{4}{3c^3(2l+1)} \sum_{l' = l \pm 1} l_{>} \int_0^\infty \frac{|\langle \varepsilon l' | r | nl \rangle|^2 (\varepsilon + |E_{nl}|)^3}{e^{(\varepsilon + |E_{nl}|)/kT} - 1} d\varepsilon. \quad (3.3)$$

Выражения для скоростей спонтанных и термоиндуцированных переходов в состояния с $E_{n'l'} < E_{nl}$ отличаются друг от друга только знаменателем, появляющимся при расчетах термоиндуцированных процессов и выражающим спектральное распределение тепловых фотонов. Формула для переходов в дискретные состояния с энергией $E_{n'l'} > E_{nl}$ содержит бесконечное суммирование по главным квантовым числам конечных состояний n' . Такая бесконечная сумма не может быть выражена целиком через более простые функции, рассчитываемые аналитически, однако известно, что с ростом n' существенно уменьшается вклад слагаемых, соответствующих переходам в отдаленные ридберговские уровни, поэтому значение остаточной суммы оценивалось через пороговый матричный элемент [90]:

$$|\langle n'l' | r | nl \rangle|^2 \approx \frac{Z^2 |\langle \varepsilon = 0 l' | r | nl \rangle|^2}{n'^3}, \quad (3.4)$$

как было предложено в работе [91]

$$\Gamma_{nl}^{rem} = \frac{l_{>} Z^6 kT |\langle \varepsilon = 0 l' | r | nl \rangle|^2}{6c^3(2l+1)n^4 n'^2}, \quad (3.5)$$

где n' – главное квантовое число наиболее высокого учтенного конечного состояния.

После подстановки в формулы (3.1, 3.2, 3.5) аналитического выражения для радиального матричного элемента, полученного с волновыми функциями квантового дефекта, возможно непосредственное вычисление спонтанных распадов и термоиндуцированных скоростей переходов в состояния дискретного спектра с энергией большей и меньшей энергии исходного состояния, соответствующие расчеты для одноэлектронных состояний однократных ионов второй группы представлены в таблицах 3.1-3.10.

Таблица 3.1. Полные скорости спонтанных распадов Γ_{nl}^{sp} , термоиндуцированных распадов Γ_{nl}^d и возбуждений Γ_{nl}^e (в кГц) для возбужденных nS - и nP -серий состояний в ионах Be^+ при температурах теплового излучения $T = 100, 300, 600, 1000, 1500 K$.

Состояние	Γ_{nl}^{sp} , кГц	Γ_{nl}^d , кГц					Γ_{nl}^e , кГц				
		100K	300K	600K	1000K	1500K	100K	300K	600K	1000K	1500K
15S	5226	3.690	56.78	181.0	379.5	654.1	7.364	32.05	75.24	138.4	220.1
20S	2217	8.982	57.63	150.4	288.4	472.3	5.553	21.19	47.68	84.63	131.5
25S	1140	10.01	48.81	117.4	216.3	345.8	4.081	14.86	32.37	56.19	86.16
30S	662.6	9.346	39.97	91.97	165.7	261.2	3.096	10.91	23.20	39.76	60.51
35S	419.0	8.261	32.73	73.29	130.1	203.3	2.423	8.297	17.37	29.52	44.73
40S	281.8	7.181	27.07	59.49	104.6	162.4	1.945	6.499	13.45	22.74	34.37
50S	145.3	5.409	19.19	41.19	71.47	110.1	1.325	4.277	8.737	14.69	22.13
70S	53.55	3.266	10.92	22.89	39.20	59.85	0.719	2.239	4.523	7.568	11.37
90S	25.42	2.154	6.999	14.50	24.66	37.49	0.447	1.371	2.757	4.606	6.917
110S	14.02	1.520	4.856	9.987	16.92	25.65	0.304	0.925	1.856	3.098	4.650
130S	8.541	1.127	3.563	7.293	12.32	18.64	0.220	0.666	1.335	2.227	3.342
150S	5.585	0.868	2.724	5.556	9.368	14.16	0.166	0.502	1.006	1.678	2.518
15P	4414	3.105	24.84	74.15	153.0	262.3	3.010	41.04	136.0	290.4	499.1
20P	1925	4.165	24.33	63.14	121.2	198.7	5.858	40.16	107.6	205.2	330.5
25P	1005	4.372	21.09	50.96	94.20	150.9	6.438	33.48	80.70	145.9	228.3
30P	588.7	4.103	17.71	41.03	74.17	117.2	6.033	26.93	61.09	107.4	165.6
35P	374.2	3.685	14.81	33.40	59.50	93.12	5.354	21.64	47.32	81.84	125.1
40P	252.5	3.257	12.47	27.58	48.62	75.60	4.659	17.57	37.52	64.23	97.67
50P	130.7	2.523	9.076	19.58	34.06	52.50	3.486	12.06	25.06	42.43	64.15
70P	48.30	1.580	5.339	11.23	19.25	29.41	2.045	6.546	13.31	22.34	33.62
90P	22.94	1.065	3.489	7.245	12.33	18.75	1.307	4.057	8.186	13.69	20.57
110P	12.66	0.762	2.453	5.053	8.565	12.99	0.895	2.737	5.501	9.187	13.79
130P	7.711	0.572	1.816	3.723	6.292	9.524	0.643	1.951	3.914	6.530	9.802
150P	5.043	0.444	1.398	2.856	4.817	7.281	0.476	1.438	2.881	4.805	7.210

Таблица 3.2. Полные скорости спонтанных распадов Γ_{nl}^{sp} , термоиндуцированных распадов Γ_{nl}^d и возбуждений Γ_{nl}^e (в кГц) для возбужденных nF - и nD -серий состояний в ионах Be^+ при температурах теплового излучения $T = 100, 300, 600, 1000, 1500 K$.

Состояние	Γ_{nl}^{sp} , кГц	Γ_{nl}^d , кГц					Γ_{nl}^e , кГц				
		100K	300K	600K	1000K	1500K	100K	300K	600K	1000K	1500K
15D	9939	0.854	17.26	62.96	142.1	257.0	2.071	37.34	130.3	283.5	491.9
20D	4218	2.578	20.57	58.42	117.5	198.5	4.983	37.78	103.9	200.1	323.7
25D	2167	3.359	19.03	48.61	92.67	151.6	5.791	31.91	78.12	142.1	223.0
30D	1256	3.442	16.48	39.72	73.46	117.9	5.570	25.85	59.24	104.6	161.5
35D	792.1	3.239	14.03	32.61	59.15	93.75	5.019	20.86	45.92	79.65	121.9
40D	531.1	2.943	11.94	27.07	48.44	76.11	4.410	16.98	36.44	62.52	95.16
50D	272.2	2.353	8.809	19.35	34.01	52.84	3.347	11.76	24.55	41.63	62.99
70D	99.30	1.516	5.245	11.15	19.26	29.58	1.995	6.446	13.14	22.08	33.24
90D	46.74	1.035	3.447	7.214	12.35	18.85	1.291	4.037	8.159	13.66	20.53
110D	25.61	0.746	2.430	5.039	8.576	13.04	0.897	2.759	5.553	9.279	13.94
130D	15.52	0.562	1.803	3.715	6.300	9.561	0.656	2.002	4.021	6.713	10.08
150D	10.10	0.438	1.390	2.851	4.823	7.307	0.500	1.518	3.044	5.079	7.623
15F	4505	0.879	21.74	79.84	180.6	327.1	1.986	36.79	129.4	282.5	490.9
20F	1917	3.067	24.79	70.54	142.1	240.7	4.722	36.42	100.8	194.6	315.2
25F	986.6	3.935	22.34	57.18	109.2	179.1	5.450	30.43	74.81	136.3	214.1
30F	572.8	3.976	19.05	45.99	85.22	137.0	5.222	24.48	56.27	99.44	153.7
35F	361.5	3.702	16.05	37.36	67.88	107.8	4.694	19.66	43.38	75.31	115.3
40F	242.5	3.339	13.56	30.77	55.16	86.83	4.118	15.95	34.29	58.86	89.62
50F	124.4	2.643	9.898	21.77	38.33	59.65	3.118	11.00	22.98	38.99	59.01
70F	45.43	1.684	5.831	12.42	21.47	33.01	1.854	6.000	12.24	20.56	30.97
90F	21.39	1.144	3.811	7.985	13.68	20.90	1.198	3.749	7.578	12.69	19.07
110F	11.72	0.821	2.678	5.557	9.467	14.41	0.831	2.558	5.150	8.606	12.93
130F	7.104	0.617	1.982	4.088	6.938	10.53	0.608	1.855	3.725	6.220	9.338
150F	4.625	0.480	1.526	3.132	5.301	8.036	0.463	1.405	2.818	4.703	7.059

Таблица 3.3. Полные скорости спонтанных распадов Γ_{nl}^{sp} , термоиндуцированных распадов Γ_{nl}^d и возбуждений Γ_{nl}^e (в кГц) возбужденных nS -, nP -состояний в ионах Mg^+ при температурах теплового излучения $T = 100, 300, 600, 1000, 1500 K$.

Состояние	Γ_{nl}^{sp} , кГц	Γ_{nl}^d , кГц					Γ_{nl}^e , кГц				
		100K	300K	600K	1000K	1500K	100K	300K	600K	1000K	1500K
15S	5278	6.194	80.17	239.3	484.2	816.1	12.31	72.25	169.5	301.2	466.4
20S	2112	12.98	73.24	181.9	339.6	547.1	12.17	47.42	101.4	173.4	263.4
25S	1048	13.08	57.92	134.1	242.0	382.0	9.270	31.77	65.75	111.1	167.8
30S	594.5	11.42	45.27	101.1	179.0	279.4	6.913	22.42	45.77	76.92	111.6
35S	369.3	9.632	35.85	78.30	137.1	212.4	5.255	16.58	33.61	56.31	84.68
40S	245.1	8.086	28.92	62.22	108.1	166.6	4.098	12.73	25.68	42.97	64.57
50S	124.0	5.806	19.79	41.80	71.89	110.1	2.666	8.151	16.38	27.25	41.07
70S	44.72	3.323	10.82	22.44	38.20	58.11	1.372	4.148	8.312	13.86	20.83
90S	20.97	2.128	6.783	13.94	23.60	35.78	0.831	2.503	5.012	8.356	12.54
110S	11.49	1.474	4.639	9.480	16.00	24.21	0.556	1.673	3.348	5.582	8.372
130S	6.966	1.079	3.369	6.861	11.56	17.46	0.398	1.196	2.394	3.990	5.986
150S	4.542	0.824	2.557	5.193	8.735	13.18	0.299	0.898	1.796	2.994	4.491
15P	328.9	11.03	62.98	148.1	264.8	412.7	9.452	97.97	280.0	551.9	907.9
20P	130.0	10.89	42.36	91.08	156.9	239.8	15.17	81.83	198.7	362.1	569.6
25P	65.30	8.365	28.79	59.97	101.9	154.6	14.40	62.45	141.1	248.2	382.9
30P	37.75	6.283	20.50	42.08	71.03	107.3	12.27	47.71	103.6	178.9	273.2
35P	23.93	4.801	15.24	31.03	52.19	78.74	10.21	37.14	78.72	134.5	204.2
40P	16.18	3.756	11.73	23.78	39.91	60.14	8.491	29.52	61.62	104.5	158.2
50P	8.439	2.454	7.535	15.20	25.45	38.29	6.007	19.76	40.52	68.23	102.9
70P	3.181	1.266	3.842	7.718	12.90	19.39	3.351	10.49	21.20	35.50	53.37
90P	1.535	0.768	2.318	4.650	7.766	11.66	2.101	6.445	12.96	21.66	32.52
110P	0.857	0.514	1.548	3.104	5.181	7.779	1.428	4.339	8.706	14.53	21.81
130P	0.527	0.368	1.107	2.217	3.700	5.554	1.026	3.101	6.214	10.36	15.55
150P	0.347	0.276	0.830	1.662	2.773	4.163	0.765	2.305	4.616	7.697	11.55

Таблица 3.4. Полные скорости спонтанных распадов Γ_{nl}^{sp} , термоиндуцированных распадов Γ_{nl}^d и возбуждений Γ_{nl}^e (в кГц) возбужденных nD -, nF -состояний в ионах Mg^+ при температурах теплового излучения $T = 100, 300, 600, 1000, 1500 K$.

Состояние	Γ_{nl}^{sp} , кГц	Γ_{nl}^d , кГц					Γ_{nl}^e , кГц				
		100K	300K	600K	1000K	1500K	100K	300K	600K	1000K	1500K
15D	1250	4.406	50.15	148.4	299.3	502.9	5.658	44.00	130.2	267.0	450.7
20D	528.7	7.918	45.98	115.6	217.0	350.0	6.645	36.39	92.70	173.5	277.0
25D	273.0	8.148	37.63	88.35	160.3	253.5	6.075	27.99	65.58	117.3	182.6
30D	159.5	7.365	30.38	68.69	122.2	191.2	5.183	21.45	47.79	83.45	128.2
35D	101.4	6.411	24.73	54.61	96.04	149.0	4.345	16.68	36.01	61.99	94.54
40D	68.51	5.528	20.40	44.33	77.30	119.3	3.637	13.22	27.97	47.72	72.43
50D	35.63	4.138	14.46	30.77	53.07	81.35	2.598	8.821	18.26	30.86	46.63
70D	13.32	2.496	8.268	17.23	29.38	44.72	1.457	4.636	9.417	15.79	23.77
90D	6.393	1.650	5.326	10.98	18.62	28.24	0.915	2.835	5.719	9.564	14.37
110D	3.559	1.168	3.711	7.605	12.85	19.44	0.623	1.908	3.836	6.406	9.620
130D	2.185	0.869	2.732	5.576	9.399	14.20	0.451	1.370	2.750	4.589	6.889
150D	1.440	0.671	2.095	4.263	7.174	10.83	0.340	1.031	2.067	3.448	5.175
15F	4906	0.865	18.78	69.56	158.6	289.3	2.131	38.82	135.8	295.8	513.4
20F	2090	2.687	21.81	62.52	126.7	215.5	5.063	38.60	106.4	205.1	331.9
25F	1076	3.474	19.89	51.18	98.17	161.4	5.843	32.33	79.27	144.3	226.5
30F	624.5	3.540	17.08	41.42	76.99	124.1	5.598	26.06	59.78	105.6	163.1
35F	394.1	3.317	14.47	33.79	61.55	97.93	5.032	20.96	46.18	80.12	122.6
40F	264.4	3.006	12.27	27.93	50.16	79.07	4.413	17.02	36.55	62.72	95.48
50F	135.6	2.395	9.004	19.84	34.99	54.50	3.342	11.76	24.55	41.63	63.00
70F	49.51	1.537	5.334	11.37	19.68	30.28	1.988	6.426	13.10	22.01	33.14
90F	23.32	1.048	3.497	7.333	12.57	19.21	1.285	4.019	8.123	13.60	20.44
110F	12.78	0.755	2.462	5.112	8.712	13.27	0.895	2.756	5.549	9.273	13.93
130F	7.742	0.568	1.825	3.765	6.391	9.708	0.657	2.006	4.030	6.729	10.10
150F	5.041	0.442	1.405	2.887	4.888	7.411	0.502	1.526	3.062	5.110	7.770

Таблица 3.5. Полные скорости спонтанных распадов Γ_{nl}^{sp} , термоиндуцированных распадов Γ_{nl}^d и возбуждений Γ_{nl}^e (в кГц) возбужденных nS -, nP -состояний в ионах Ca^+ при температурах теплового излучения $T = 100, 300, 600, 1000, 1500 \text{ K}$.

Состояние	Γ_{nl}^{sp} , кГц	Γ_{nl}^d , кГц					Γ_{nl}^e , кГц				
		100K	300K	600K	1000K	1500K	100K	300K	600K	1000K	1500K
15S	6194	4.417	77.46	244.8	507.1	865.8	11.36	75.46	181.7	325.9	507.1
20S	2403	12.50	75.32	190.4	358.5	580.3	12.46	49.95	107.4	184.4	280.7
25S	1168	13.22	60.11	140.3	254.4	402.6	9.591	33.20	68.89	116.5	176.1
30S	653.1	11.69	46.98	105.4	187.2	292.7	7.138	23.26	47.52	79.89	120.4
35S	401.1	9.891	37.14	81.36	142.7	221.4	5.404	17.09	34.65	58.06	87.33
40S	263.7	8.307	29.88	64.45	112.1	173.0	4.197	13.05	26.34	44.06	66.22
50S	131.5	5.955	20.37	43.08	74.14	113.6	2.713	8.294	16.67	27.84	41.80
70S	46.50	3.393	11.07	22.97	39.11	59.53	1.384	4.184	8.384	13.99	20.99
90S	21.51	2.167	6.913	14.21	24.07	36.50	0.835	2.513	5.031	8.388	12.58
110S	11.66	1.498	4.716	9.641	16.28	24.63	0.557	1.674	3.350	5.585	8.378
130S	7.010	1.095	3.420	6.965	11.73	17.73	0.398	1.195	2.390	3.984	5.977
150S	4.539	0.835	2.592	5.265	8.855	13.37	0.298	0.895	1.791	2.985	4.477
15P	690.9	7.854	42.79	99.67	177.2	275.0	4.922	81.01	264.6	557.5	953.2
20P	348.5	7.324	28.02	60.14	103.5	158.1	11.89	77.36	201.1	378.8	606.1
25P	202.5	5.491	18.92	39.56	67.37	102.3	12.74	61.87	145.5	261.2	406.9
30P	128.7	4.100	13.54	27.98	47.42	71.81	11.46	48.27	107.7	188.1	289.0
35P	87.11	3.144	10.16	20.87	35.25	53.30	9.834	37.94	81.92	141.0	215.0
40P	61.84	2.479	7.906	16.18	27.28	41.19	8.335	30.30	64.08	109.3	165.9
50P	34.56	1.652	5.191	10.57	17.78	26.81	6.023	20.37	42.11	71.13	107.4
70P	14.09	0.885	2.763	5.555	9.317	14.03	3.421	10.86	22.04	36.95	55.59
90P	7.111	0.552	1.698	3.429	5.744	8.641	2.166	6.705	13.52	22.60	33.96
110P	4.090	0.378	1.156	2.330	3.899	5.862	1.486	4.545	9.136	15.26	22.91
130P	2.570	0.275	0.838	1.687	2.822	4.241	1.080	3.284	6.589	11.00	16.51
150P	1.721	0.208	0.636	1.279	2.138	3.212	0.820	2.484	4.979	8.307	12.47

Таблица 3.6. Полные скорости спонтанных распадов Γ_{nl}^{sp} , термоиндуцированных распадов Γ_{nl}^d и возбуждений Γ_{nl}^e (в кГц) возбужденных nD -, nF -состояний в ионах Ca^+ при температурах теплового излучения $T = 100, 300, 600, 1000, 1500 \text{ K}$.

Состояние	Γ_{nl}^{sp} , кГц	Γ_{nl}^d , кГц					Γ_{nl}^e , кГц				
		100K	300K	600K	1000K	1500K	100K	300K	600K	1000K	1500K
15D	6031	7.532	67.35	191.5	382.3	641.4	9.740	76.16	200.9	379.8	609.6
20D	2571	10.98	57.00	139.6	260.0	418.7	12.08	57.68	133.8	238.7	370.8
25D	1331	10.23	43.80	100.9	182.1	287.8	10.50	42.11	92.51	160.7	246.2
30D	777.8	8.646	33.69	75.11	133.2	208.2	8.539	31.44	67.04	114.8	174.7
35D	494.2	7.161	26.41	57.68	101.2	157.0	6.911	24.16	50.58	85.94	130.2
40D	333.6	5.941	21.14	45.53	79.24	122.4	5.645	19.05	39.43	66.65	100.7
50D	173.0	4.205	14.31	30.28	52.19	80.06	3.915	12.66	25.86	43.48	65.50
70D	64.19	2.370	7.729	16.06	27.38	41.72	2.155	6.703	13.53	22.64	34.03
90D	30.57	1.506	4.807	9.896	16.78	25.48	1.349	4.128	8.300	13.86	20.81
110D	16.89	1.037	3.271	6.695	11.32	17.14	0.919	2.793	5.603	9.351	14.04
130D	10.30	0.757	2.367	4.826	8.139	12.31	0.665	2.013	4.033	6.728	10.09
150D	6.743	0.576	1.791	3.642	6.132	9.262	0.503	1.517	3.039	5.068	7.604
15F	5238	5.490	52.50	146.3	285.1	467.5	6.103	53.35	160.9	331.5	560.4
20F	2219	8.405	44.70	108.3	198.6	315.0	7.933	44.82	114.7	214.9	343.1
25F	1139	8.124	35.38	80.88	144.3	225.4	7.415	34.50	80.92	144.8	225.4
30F	659.5	7.111	28.07	62.17	109.2	169.0	6.358	26.38	58.78	102.6	157.7
35F	415.6	6.074	22.63	49.13	85.45	131.5	5.330	20.46	44.17	76.01	115.9
40F	278.6	5.175	18.56	39.75	68.66	105.2	4.456	16.17	34.21	58.35	85.57
50F	142.8	3.821	13.07	27.52	47.12	71.84	3.169	10.74	22.22	37.54	56.71
70F	52.09	2.280	7.448	15.41	26.14	39.65	1.764	5.605	11.38	19.08	28.71
90F	24.54	1.502	4.797	9.839	16.62	25.13	1.102	3.411	6.878	11.50	17.28
110F	13.46	1.061	3.345	6.825	11.50	17.36	0.748	2.286	4.595	7.674	11.52
130F	8.160	0.789	2.465	5.027	8.428	12.71	0.539	1.636	3.284	5.480	8.225
150F	5.317	0.609	1.892	3.838	6.445	7.711	0.406	1.228	2.461	4.105	6.161

Таблица 3.7. Полные скорости спонтанных распадов Γ_{nl}^{sp} , термоиндуцированных распадов Γ_{nl}^d и возбуждений Γ_{nl}^e (в кГц) возбужденных nS -, nP -состояний в ионах Sr^+ при температурах теплового излучения $T = 100, 300, 600, 1000, 1500 K$.

Состояние	Γ_{nl}^{sp} , кГц	Γ_{nl}^d , кГц					Γ_{nl}^e , кГц				
		100K	300K	600K	1000K	1500K	100K	300K	600K	1000K	1500K
15S	7058	2.810	74.67	252.9	537.2	928.8	9.547	83.53	213.8	393.1	619.6
20S	2590	12.16	78.21	200.5	379.7	616.5	13.39	57.69	126.6	219.1	335.1
25S	1221	13.52	62.55	146.6	266.2	421.6	10.74	38.41	80.48	136.7	207.1
30S	674.9	12.02	48.57	109.1	193.8	302.9	8.067	26.80	55.07	92.81	140.0
35S	406.5	10.14	38.12	83.49	146.4	227.1	6.120	19.60	39.89	66.96	100.8
40S	268.6	8.482	30.48	65.68	114.2	176.2	4.750	14.91	30.17	50.53	75.98
50S	132.8	6.027	20.57	43.46	74.76	114.5	3.063	9.417	18.96	31.67	47.57
70S	42.91	3.392	11.04	22.89	38.96	59.27	1.556	4.716	9.455	15.77	23.67
90S	17.35	2.150	6.845	14.06	23.80	36.08	0.935	2.820	5.647	9.417	14.13
110S	9.416	1.478	4.648	9.495	16.02	24.24	0.623	1.874	3.750	6.252	9.380
130S	5.744	1.077	3.359	6.837	11.51	17.39	0.444	1.335	2.670	4.452	6.678
150S	3.781	0.819	2.539	5.156	8.670	13.08	0.332	0.999	1.998	3.330	4.996
15P	1084	5.839	39.41	99.14	183.7	292.7	2.806	68.67	247.8	547.7	963.2
20P	532.5	6.496	27.84	62.82	111.3	173.1	9.976	72.88	197.1	379.1	614.1
25P	304.3	5.230	19.66	42.78	74.53	114.8	11.59	59.68	143.7	260.4	407.9
30P	191.2	4.088	14.52	31.03	53.56	82.09	10.72	46.84	105.9	186.1	286.9
35P	128.5	3.242	11.16	23.57	40.45	61.77	9.303	36.83	80.23	138.6	211.8
40P	90.69	2.624	8.842	18.53	31.67	48.25	7.927	29.37	62.49	106.9	162.4
50P	50.33	1.815	5.955	12.35	20.99	31.86	5.749	19.66	40.76	68.94	104.2
70P	20.40	1.015	3.237	6.638	11.21	16.96	3.261	10.40	21.13	35.44	53.34
90P	10.29	0.647	2.035	4.148	6.984	10.54	2.058	6.387	12.89	21.55	32.38
110P	5.922	0.449	1.398	2.839	4.771	7.192	1.409	4.315	8.676	14.49	21.76
130P	3.726	0.330	1.020	2.067	3.468	5.223	1.022	3.110	6.242	10.42	15.64
150P	2.499	0.252	0.778	1.572	2.635	3.967	0.775	2.348	4.708	7.854	11.79

Таблица 3.8. Полные скорости спонтанных распадов Γ_{nl}^{sp} , термоиндуцированных распадов Γ_{nl}^d и возбуждений Γ_{nl}^e (в кГц) возбужденных nD -, nF -состояний в ионах Sr^+ при температурах теплового излучения $T = 100, 300, 600, 1000, 1500 \text{ K}$.

Состояние	Γ_{nl}^{sp} , кГц	Γ_{nl}^d , кГц					Γ_{nl}^e , кГц				
		100K	300K	600K	1000K	1500K	100K	300K	600K	1000K	1500K
15D	8702	3.496	62.17	204.7	435.6	757.3	9.170	56.80	136.4	246.0	384.9
20D	3624	10.02	64.36	168.0	322.4	528.8	9.452	38.25	83.41	144.5	221.1
25D	1853	11.11	53.29	127.6	234.7	375.2	7.352	26.17	55.16	94.05	142.8
30D	1076	10.15	42.62	97.60	175.5	276.5	5.590	18.82	38.99	65.99	99.75
35D	680.8	8.785	34.22	76.27	135.2	211.1	4.328	14.14	29.00	48.85	73.67
40D	458.5	7.498	27.85	60.94	106.9	166.0	3.430	10.99	22.40	37.62	56.66
50D	237.3	5.492	19.25	41.19	71.39	109.9	2.293	7.178	14.52	24.32	36.57
70D	88.08	3.201	10.62	22.22	38.01	58.02	1.223	3.749	7.540	12.59	18.91
90D	42.04	2.067	6.680	13.81	23.48	35.69	0.757	2.300	4.615	7.701	11.56
110D	23.29	1.438	4.575	9.399	15.92	24.13	0.514	1.555	3.116	5.198	7.801
130D	14.24	1.056	3.323	6.801	11.49	17.38	0.372	1.122	2.247	3.745	5.622
150D	9.339	0.807	2.525	5.147	8.676	13.11	0.281	0.848	1.697	2.830	4.246
15F	6929	6.397	42.26	107.5	201.2	322.9	5.134	53.74	168.0	351.0	597.4
20F	2944	7.313	33.81	78.54	141.2	221.8	8.036	48.55	126.1	237.6	380.4
25F	1513	6.552	26.46	58.99	104.0	161.5	8.060	38.79	91.66	164.5	256.4
30F	878.4	5.581	20.99	45.72	79.67	122.8	7.178	30.37	67.98	118.9	182.8
35F	554.6	4.715	16.97	36.40	62.93	96.55	6.164	23.96	51.86	89.35	136.3
40F	372.4	3.999	13.97	29.64	50.96	77.91	5.240	19.18	40.65	69.40	105.4
50F	191.5	2.947	9.909	20.72	35.37	53.83	3.810	12.96	26.83	45.36	68.52
70F	70.33	1.763	5.703	11.75	19.90	30.14	2.172	6.909	14.03	23.53	35.40
90F	33.30	1.165	3.697	7.559	12.75	19.26	1.373	4.254	8.578	14.34	21.55
110F	18.34	0.826	2.589	5.270	8.866	13.38	0.939	2.871	5.771	9.637	14.47
130F	11.12	0.615	1.914	3.884	6.524	9.833	0.679	2.064	4.140	6.909	10.40
150F	7.298	0.476	1.473	2.982	5.003	7.535	0.513	1.551	3.108	5.185	7.780

Таблица 3.9. Полные скорости спонтанных распадов Γ_{nl}^{sp} , термоиндуцированных распадов Γ_{nl}^d и возбуждений Γ_{nl}^e (в кГц) возбужденных nS -, nP -состояний в ионах Ba^+ при температурах теплового излучения $T = 100, 300, 600, 1000, 1500 K$.

Состояние	Γ_{nl}^{sp} , кГц	Γ_{nl}^d , кГц					Γ_{nl}^e , кГц				
		100K	300K	600K	1000K	1500K	100K	300K	600K	1000K	1500K
15S	8207	1.503	69.36	257.5	564.5	991.3	6.852	89.04	247.9	471.9	757.5
20S	2847	11.72	80.81	209.9	399.7	650.8	14.09	66.90	150.9	264.6	407.3
25S	1301	13.79	64.66	151.9	275.9	437.2	12.04	45.02	95.67	163.6	248.6
30S	698.8	12.30	49.75	111.6	198.2	309.8	9.208	31.41	65.11	110.2	166.5
35S	417.7	10.33	38.69	84.61	148.3	229.8	7.028	22.93	46.93	78.98	119.0
40S	269.2	8.577	30.70	66.03	114.7	176.7	5.469	17.40	35.36	59.32	89.27
50S	130.7	6.026	20.47	43.18	74.20	113.6	3.531	10.94	22.08	36.93	55.49
70S	44.88	3.341	10.84	22.43	38.14	57.99	1.792	5.449	10.94	18.25	27.40
90S	20.44	2.098	6.662	13.67	23.12	35.03	1.075	3.248	6.507	10.85	16.29
110S	10.97	1.435	4.499	9.182	15.49	23.42	0.715	2.153	4.311	7.188	10.78
130S	6.554	1.041	3.239	6.588	11.09	16.75	0.509	1.532	3.065	5.110	7.666
150S	4.223	0.789	2.442	4.955	8.329	12.57	0.381	1.145	2.291	3.819	5.729
15P	1645	6.554	54.25	139.5	258.0	408.7	2.127	74.92	284.5	638.5	1133
20P	687.8	8.497	36.18	79.75	138.8	213.1	10.86	82.80	225.1	434.2	704.9
25P	361.1	6.724	24.22	51.24	87.67	133.4	13.14	67.54	162.5	294.3	461.2
30P	215.5	5.097	17.20	35.77	60.74	92.08	12.20	52.76	119.0	209.0	322.0
35P	139.9	3.885	12.69	26.14	44.21	66.87	10.46	41.02	89.17	153.9	235.1
40P	96.42	3.038	9.746	19.97	33.68	50.88	8.840	32.49	69.00	117.9	179.1
50P	51.91	1.993	6.270	12.77	21.47	32.37	6.333	21.53	44.58	75.37	113.9
70P	20.46	1.043	3.229	6.535	10.96	16.49	3.542	11.26	22.86	38.33	57.68
90P	10.20	0.641	1.967	3.973	6.652	10.01	2.219	6.871	13.85	23.17	34.81
110P	5.841	0.434	1.327	2.623	4.471	6.721	1.511	4.623	9.292	15.52	23.30
130P	3.669	0.313	0.955	1.922	3.213	4.829	1.093	3.322	6.666	11.13	16.70
150P	2.461	0.237	0.721	1.449	2.421	3.638	0.827	2.503	5.018	8.371	12.56

Таблица 3.10. Полные скорости спонтанных распадов Γ_{nl}^{sp} , термоиндуцированных распадов Γ_{nl}^d и возбуждений Γ_{nl}^e (в кГц) возбужденных nD -, nF -состояний в ионах Ba^+ при температурах теплового излучения $T = 100, 300, 600, 1000, 1500 K$.

Состояние	Γ_{nl}^{sp} , кГц	Γ_{nl}^d , кГц					Γ_{nl}^e , кГц				
		100K	300K	600K	1000K	1500K	100K	300K	600K	1000K	1500K
15D	7898	4.097	68.83	223.9	471.8	814.4	7.416	80.19	223.6	428.7	691.5
20D	3279	11.07	68.24	174.9	332.3	541.2	12.28	58.76	134.5	237.9	368.0
25D	1634	11.80	54.34	128.0	233.3	370.8	10.59	41.17	89.06	153.6	234.4
30D	919.7	10.39	42.03	94.80	169.1	265.0	8.466	30.17	63.58	108.3	164.4
35D	583.2	8.738	33.03	72.73	128.0	199.1	6.606	22.40	46.46	78.61	118.8
40D	390.6	7.294	26.39	57.17	99.76	154.3	5.274	17.36	35.65	60.08	90.62
50D	200.9	5.176	17.79	37.75	65.13	99.99	3.541	11.25	22.87	38.36	57.73
70D	74.36	2.908	9.521	19.81	33.79	51.49	1.882	5.806	11.70	19.55	29.37
90D	35.52	1.840	5.888	12.13	20.57	31.23	1.159	3.533	7.094	11.84	17.78
110D	19.72	1.263	3.989	8.169	13.81	20.91	0.784	2.374	4.761	7.943	11.92
130D	12.08	0.919	2.878	5.870	9.900	14.97	0.565	1.706	3.417	5.699	8.551
150D	7.944	0.698	2.173	4.419	7.440	11.24	0.426	1.285	2.573	4.290	6.436
15F	5786	7.718	56.70	145.4	270.7	431.1	7.492	84.27	254.5	517.2	866.2
20F	2491	9.163	40.49	91.36	161.2	249.5	12.58	73.25	184.3	341.9	542.9
25F	1285	7.576	28.61	61.71	106.6	163.3	12.33	56.61	131.0	232.8	361.3
30F	746.1	6.008	21.18	44.72	76.52	116.5	10.66	43.34	95.63	166.2	254.8
35F	470.8	4.764	16.16	33.72	57.37	87.08	8.950	33.70	72.24	124.0	188.7
40F	315.8	3.846	12.73	26.37	44.71	67.72	7.479	26.71	56.21	95.69	145.1
50F	161.8	2.639	8.498	17.44	29.43	44.46	5.312	17.78	36.65	61.85	93.35
70F	59.10	1.456	4.569	9.292	15.62	23.54	2.966	9.369	18.99	31.83	47.88
90F	27.84	0.921	2.856	5.784	9.699	14.60	1.860	5.745	11.58	19.35	29.07
110F	15.26	0.635	1.957	3.952	6.619	9.956	1.269	3.876	7.787	13.00	19.52
130F	9.250	0.464	1.425	2.874	4.809	7.230	0.919	2.790	5.597	9.339	14.02
150F	6.024	0.355	1.085	2.185	3.654	5.492	0.695	2.104	4.217	7.035	10.56

Необходимо заметить, что с ростом главного квантового числа n и температуры излучения T растет вклад термоиндуцированного уширения в общее уширение уровня, тогда как вклад спонтанных переходов не зависит от температуры, поэтому для данного конкретного состояния существует температура излучения, при которой скорость термоиндуцированных переходов превышает скорость спонтанных распадов. При фиксированной температуре излучения в рассматриваемом в работе диапазоне ($T = 100\text{--}2000\text{K}$) найдется уровень, для которого $\Gamma_{nl}^{sp} < \Gamma_{nl}^{BBR}$, причем чем выше температура излучения, тем ниже находится этот уровень.

Отметим, что функция скорости термоиндуцированных переходов при температуре 100 K для состояний щелочноземельных ионов с $l = 0, 1, 2, 3$ имеет максимум для уровней с номерами $n = 20 - 25$, а далее монотонно убывает с ростом n .

Кроме того, анализ данных таблиц 3.1-3.10 показывает, что в представленном диапазоне главных квантовых чисел состояний и температур теплового излучения вклад переходов в состояния с энергией больше исходного (возбуждений) может как превосходить вклад термоиндуцированных распадов, так и не достигать его, однако с ростом главного квантового числа все больше разрешенных переходов будут осуществляться в состояния с меньшей энергией, тогда как число переходов в вышележащие состояния, будет убывать. Таким образом, скорость термоиндуцированных распадов с ростом номера уровня в большинстве случаев убывает несколько медленнее, чем скорость термоиндуцированных возбуждений, что можно заметить в процессе анализа таблиц 3.1-3.10.

Рассмотрим теперь общую скорость переходов в состояния с положительной энергией – ионизационную составляющую взаимодействия с тепловым излучением. Такое взаимодействие не только приводит к штарковским уширению и сдвигу энергетических уровней, но и существенно изменяет сам квантовый объект: атом превращается в ион, что существенно меняет все

оптические характеристики – ионы, рассмотренные в работе, теряют единственный оптический электрон. Как правило, вклад этого процесса в полную скорость термоиндуцированных переходов не превышает 5-10 %, для ридберговских состояний этот вклад еще меньше и может быть учтен оценочно, однако в общем случае вклад переходов в непрерывный спектр не пренебрежимо мал и должен быть определен как можно более точно. Однако, расчет скорости ионизации по формуле (3.3) реализуем только численно, поэтому целесообразно выполнить оценку такого вклада, которая не приведет к потере точности большей, чем численный расчет интеграла в выражении (3.3).

Такую оценку можно произвести с учетом известных квазиклассических аппроксимаций для сечений ионизации [93]:

$$\sigma_{nl}(\omega) \approx \sigma_{nl}^{thr} \left| \frac{E_{nl}}{\omega} \right|^{\beta_{nl}}, \quad (3.6)$$

где $\omega = \varepsilon + |E_{nl}|$, $\sigma_{nl}^{thr}(\omega)$ – пороговое сечение ионизации, определяемое следующим выражением:

$$\sigma_{nl}^{thr}(\omega) = \frac{4\pi^2 |E_{nl}|}{3c(2l+1)} \sum_{l'=l\pm 1} l_{>} |\langle \varepsilon = 0 l' | r | nl \rangle|^2. \quad (3.7)$$

Параметр β_{nl} согласно квазиклассической теории стремится к постоянному значению $\beta_{nl} \rightarrow \frac{7}{3}$, причем отклонения от асимптотического значения незначительны при $n > 30$, поэтому в расчетах сечений ионизации ридберговских уровней этот показатель выбран постоянным, в отличие от работы [94], где для коэффициента β_{nl} применялась полиномиальная аппроксимация по обратным степеням n .

Подставляя зависимости (3.6, 3.7) в выражение (3.3), получим следующую оценку для скорости термоиндуцированной ионизации [95]:

$$\begin{aligned} \Gamma_{nl}^c(T) &= \frac{4}{3c^3(2l+1)} \sum_{l'=l\pm 1} l_{>} \int_0^{\infty} \frac{|\langle \varepsilon l' | r | nl \rangle|^2 \omega^3}{e^{\omega/kT} - 1} d\varepsilon = \\ &= \frac{4|E_{nl}|^{\beta_{nl}+1}}{3c^3(2l+1)} \sum_{l'=l\pm 1} l_{>} |\langle \varepsilon = 0 l' | r | nl \rangle|^2 \int_{|E_{nl}|}^{\infty} \frac{d\omega}{\omega^{\beta_{nl}-2} (e^{\omega/kT} - 1)}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Поскольку в общем случае вклад переходов в континуум в общую скорость распада состояния невелик, в диссертационной работе не приводятся результаты точных расчетов скоростей ионизации по аналогии с таблицами 3.1-3.10, однако представлены коэффициенты численных аппроксимаций для оценки скоростей переходов этого типа (раздел 3.2.3). Аппроксимационные выражения воспроизводят результаты точных вычислений с погрешностью в несколько процентов для энергетических уровней ионов с главными квантовыми числами $n > 30$.

3.2. Полное уширение высоковозбужденных уровней

Анализ полученных данных показывает, что вклады каждого из типов внутриатомных переходов существенно зависят от главного квантового числа уровня и температуры излучения, индуцирующего переходы. Для состояния с определенным n при различных температурах T чернотельного излучения вклад спонтанных переходов может как быть меньше, так и превосходить вклад термоиндуцированных переходов в состояния дискретного спектра, поэтому асимптотическая зависимость ширины ридберговского уровня от n , T может быть получена только как сумма таких асимптотических приближений для каждой из компонент, тогда как зависимость наподобие представленной в работе [96] $\Gamma \sim n^{-m}$ будет иметь очень ограниченную по n и T область применимости. Поэтому для оценки полного времени жизни в поле теплового излучения необходимо получить аппроксимационные зависимости для каждой из следующих характеристик: естественного времени жизни уровня, скоростей термоиндуцированных распадов и возбуждений, скорости тепловой ионизации.

3.2.1. Аппроксимации для естественного времени жизни высоковозбужденного уровня

Одно из уникальных свойств ридберговских уровней, большое время жизни, позволяет задействовать ридберговские уровни атомов в экспериментах, где необходима достаточно длительная по атомным меркам манипуляция с квантовыми объектами. Однако тепловое излучение может существенно сократить время жизни уровня, вследствие того, что общая скорость термоиндуцированных распадов может многократно превосходить скорость спонтанных переходов. Для того, чтобы планировать высокоточные эксперименты с ридберговскими объектами, необходимы оценки как естественного времени жизни, так и термоиндуцированного уширения (сокращения времени жизни) высоковозбужденных уровней. В связи с этим предлагаются простые аппроксимационные оценки оптических характеристик ридберговских уровней в широком диапазоне главных квантовых чисел уровней и температур излучения.

Рассмотрим выражение (3.1) для спонтанной скорости распада состояния с определенными квантовыми числами n, l . Для двух предельных случаев – переходов из ридберговских в соседние уровни или переходов в низковозбужденные уровни – будет наблюдаться две различные асимптотические зависимости матричных элементов и частоты перехода от главных квантовых чисел начального (n) и конечного (n') состояний:

1. при $n' \ll n$, $|\langle n'l'|r|nl \rangle|^2 \sim n^{-3}$, $\omega^3 \approx n'^{-6}$,
2. при $n' \approx n$ $|\langle n'l'|r|nl \rangle|^2 \sim n^4$, $\omega^3 \approx n^{-9}$.

Наибольший вклад в общую скорость спонтанных распадов ридберговского состояния вносят разрешенные переходы на несколько нижних энергетических уровней. Например, для S -состояния однократного иона бериллия с главным квантовым числом $n = 100$ вероятность перехода в состояние $2P$ составляет 33.4 % от общей вероятности спонтанного распада, тогда как пе-

реход в состояние $99P$ составляет лишь 0.36 %.

Согласно формуле для скорости спонтанного распада (1.11), при условии $n \gg n'$ получаем следующие закономерности:

$$\Gamma_{nl}^{sp} \sim n^{-3}, \quad \tau_{nl}^{sp} \sim n^3. \quad (3.9)$$

Для того, чтобы учесть не только основной вклад, вносимый распадами в самые низкие состояния, но и поправку, определяемую переходами во все разрешенные уровни с энергией меньше исходной, умножим выражение для естественного времени жизни на полином по обратным степеням главного квантового числа n :

$$\tau_{nl}^{sp} = \tau_l^{(0)} n^3 \left(1 + \frac{t_l^{(1)}}{n} + \frac{t_l^{(2)}}{n^2} + \frac{t_l^{(3)}}{n^3} \right), \quad (3.10)$$

где параметр $\tau_l^{(0)}$ (в с) и безразмерные величины $t_l^{(n)}$ постоянны для каждой l -серии уровней щелочноземельного иона.

Это соотношение с хорошей точностью выполняется для энергетических уровней с $n > 15$. Рассчитав коэффициенты аппроксимации с помощью стандартной процедуры полиномиальной интерполяции, возможно получить характеристики для уровней с главным квантовым числом n вплоть до 2000.

В таблице 3.11 представлены параметр $\tau_l^{(0)}$ и коэффициенты $t_l^{(1)}$, $t_l^{(2)}$, $t_l^{(3)}$ аппроксимационной формулы (3.10) для состояний с $l = 0, 1, 2, 3$ ридберговских ионов второй группы. С ростом главного числа n полином по обратным степеням n , стоящий в правой части выражения (3.10) стремится к единице, следовательно, $\tau_{nl}^{sp} \rightarrow \tau_l^{(0)} n^3$, однако подобная зависимость наблюдается только для весьма высоких уровней, поэтому целесообразной представляется аппроксимация именно в виде (3.10). Аппроксимации же вида $\tau_{nl}^{sp} \rightarrow \tau_l^{(0)} n^\alpha$, представленные, например, в работе [81], где α отличается от 3, имеют очень ограниченную область сходимости и для расчета времени жизни ридберговских уровней с высокими n неприменимы [25].

Таблица 3.11. Параметр $\tau_l^{(0)}$ (в наносекундах) и коэффициенты $t_l^{(1)}, t_l^{(2)}, t_l^{(3)}$ асимптотического выражения (3.10) для естественных времен жизни состояний щелочноземельных ионов.

Ион	Серия	$\tau_l^{(0)}$, нс	$t_l^{(1)}$	$t_l^{(2)}$	$t_l^{(3)}$
Be ⁺	<i>nS</i>	0.05116	6.594	-166.0	1372
	<i>nP</i> _{3/2}	0.05689	5.927	-137.7	1515
	<i>nD</i> _{5/2}	0.02932	0.024	5.104	-25.86
	<i>nF</i> _{7/2}	0.06400	0.087	8.789	-57.58
Mg ⁺	<i>nS</i>	0.06444	2.773	-172.6	1521
	<i>nP</i> _{3/2}	0.75506	5.440	-128.7	802.5
	<i>nD</i> _{5/2}	0.19013	15.32	-370.9	2948
	<i>nF</i> _{7/2}	0.05874	0.0444	9.124	-51.62
Ca ⁺	<i>nS</i>	0.06764	-5.324	14.501	-7.777
	<i>nP</i> _{3/2}	0.14020	35.78	-196.6	1846
	<i>nD</i> _{5/2}	0.04230	6.613	-112.2	739.2
	<i>nF</i> _{7/2}	0.05543	1.083	-32.57	314.2
Sr ⁺	<i>nS</i>	0.07265	-7.831	23.11	-5.354
	<i>nP</i> _{3/2}	0.09510	39.91	-365.4	2466
	<i>nD</i> _{5/2}	0.02999	10.314	-243.0	1780
	<i>nF</i> _{7/2}	0.03953	5.1576	-140.8	12
Ba ⁺	<i>nS</i>	0.07489	-9.626	22.77	76.28
	<i>nP</i> _{3/2}	0.09322	50.43	-1062	8662
	<i>nD</i> _{5/2}	0.03432	16.126	-490.9	4253
	<i>nF</i> _{7/2}	0.04901	0.623	-16.88	278.5

3.2.2. Относительные скорости термоиндуцированных распадов и возбуждений ридберговских состояний

Полная скорость распада включает слагаемые, соответствующие общей скорости спонтанных распадов Γ_{nl}^{sp} , термоиндуцированных распадов и воз-

буждений $\Gamma_{nl}^{d(e)}$, скорости термоиндуцированной ионизации $\Gamma_{nl}^c(T)$:

$$\Gamma_{nl}(T) = \Gamma_{nl}^{sp} + \Gamma_{nl}^d(T) + \Gamma_{nl}^e(T) + \Gamma_{nl}^c(T). \quad (3.11)$$

Для того, чтобы наглядно оценить изменение полной скорости распада, уширения уровня и полного времени жизни состояния, удобно ввести относительные скорости распадов $R_{nl}(T)$, впервые предложенные в работе [42]. Тогда полная скорость распада может быть определена следующим образом:

$$\Gamma_{nl} = \Gamma_{nl}^{sp} (1 + R_{nl}^d(T) + R_{nl}^e(T) + R_{nl}^c(T)). \quad (3.12)$$

Для того, чтобы построить аппроксимационную зависимость относительных скоростей распадов и возбуждений (3.2) от главного квантового числа $n \gg 1$, воспользуемся асимптотическим поведением квадратов матричных элементов $|\langle n'l'|r|nl \rangle|^2$ и частоты перехода $\omega_{nn'}$. Для термоиндуцированных распадов и возбуждений наибольший вклад в общую скорость распада состояния вносят переходы в соседние разрешенные энергетические уровни [42], поэтому в формуле (3.2) можно ввести характерную частоту ω_0 , приблизительно равную частоте перехода между близлежащими уровнями, которая будет соответствовать максимальной скорости перехода:

$$\omega_0 = \frac{Z^2}{n^3}. \quad (3.13)$$

Учитывая зависимость (3.2), можем применить следующую оценку:

$$\omega_{nn'}^3 |\langle n'l'|r|nl \rangle|^2 = \frac{Q(1/n, T)}{n^5}, \quad (3.14)$$

где $Q(1/n, T)$ – полином по степеням $1/n$, позволяющий уточнить убывающий вклад переходов в отдаленные от исходного состояния уровни.

Подставляя полученные закономерности в выражение для относительной скорости распада (возбуждения), получаем зависимость:

$$R_{nl}^{d,e}(T) = \frac{\Gamma_{nl}^{d,e}(T)}{\Gamma_{nl}^{sp}} = \frac{Q(1/n, T)}{(n/2)^2 \left(e^{\frac{Z^2 T_a}{n^3 T}} - 1 \right)}. \quad (3.15)$$

Исходя из соображения, что вклад переходов состояний по мере отдаления от исходного уменьшается в обратной зависимости от n и T , безразмерную переменную, по степеням которой строится полином $Q(1/n, T)$ можно определить следующим образом:

$$x = \frac{200}{nT^{\frac{1}{3}}} \approx \left(\frac{Z^2 T_a}{n^3 T} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (3.16)$$

Для учета вклада переходов во все состояния, в том числе низковозбужденные, достаточно выбрать в качестве $Q(x)$ полином второй степени [91]:

$$Q(x) = a_0(T)^{d,e} + a_1^{d,e}(T)x + a_2^{d,e}(T)x^2, \quad (3.17)$$

где коэффициенты $a_i^{d,e}(T)$ предполагаются переменными независимыми от n величинами со слабой зависимостью от температуры:

$$a_i^{d,e}(T) = \sum_{k=0}^2 b_{ik}^{d,e} t^k, \quad (3.18)$$

Для удобства построения аппроксимации коэффициенты $b_{ik}^{d,e}$ полагаются постоянными, а $t = \left(\frac{100}{T}\right)^{1/3}$ – безразмерными температурно зависимыми [42].

Окончательно относительная скорость распадов (возбуждений) может быть представлена в виде:

$$R^{d,e} = \frac{a_0(T)^{d,e} + a_1^{d,e}(T)x + a_2^{d,e}(T)x^2}{(n/2)^2 \left(e^{\frac{Z^2 T_a}{n^3 T}} - 1 \right)}. \quad (3.19)$$

Анализ полученных данных показывает, что аппроксимация (3.19) воспроизводит значения относительных скоростей переходов, полученные высокоточными расчетами с погрешностью в пределах 1 – 2%. В таблице 3.12, представлены коэффициенты $b_{ik}^{d,e}$, определяющие $a_i^{d,e}(T)$ в выражении (3.19).

Таблица 3.12. Численные значения коэффициентов $b_{ik}^{d,e}$ суммирования (3.18), определяющие переменные для построения полинома (3.17) в асимптотической зависимости (3.19) для относительных скоростей переходов из ридберговских nS -, nP -, nD - and nF -состояний в ионах Be^+ , Mg^+ , Ca^+ , Sr^+ , Ba^+

Ион	Серия	i	b_{i0}^d	b_{i1}^d	b_{i2}^d	b_{i0}^e	b_{i1}^e	b_{i2}^e
Be^+	nS	0	3.6914	0.0202	0.0204	0.6360	-0.0384	0.0369
		1	-0.5400	-1.8148	0.7157	0.0719	0.0081	-0.1001
		2	-2.3560	5.1152	-2.5370	0.0225	-0.2174	0.1858
	nP	0	2.1963	0.01578	0.0086	1.8215	-0.1923	0.1813
		1	-1.9662	1.3426	-0.7332	4.4373	-5.8885	2.3729
		2	0.4375	-0.3642	0.2425	-9.3972	16.8490	-8.4801
	nD	0	1.1309	0.0087	0.0001	1.1350	-0.0864	0.0809
		1	-1.4433	1.1578	-0.5659	-1.0185	1.7549	-1.0057
		2	0.9860	-1.5984	0.8376	1.0039	-2.4930	1.3903
	nF	0	2.6833	0.0183	0.0016	2.2869	-0.1805	0.1667
		1	-2.8597	1.8026	-0.8779	-1.9362	3.3998	-1.9704
		2	2.0794	-3.33704	1.7599	2.2725	-5.5789	3.0950
Mg^+	nS	0	4.1491	0.0087	0.0305	1.3653	-0.0209	0.0265
		1	0.4737	-3.0528	1.3033	0.5415	-0.7661	0.2785
		2	-4.5452	9.2784	-4.6764	-1.2069	2.3954	-1.1623
	nP	0	15.1157	-0.2904	0.3844	41.0210	-2.8700	2.6946
		1	31.9351	-47.2865	20.9398	117.456	-162.5452	69.9339
		2	-34.6686	67.452	-33.6214	-198.23	363.41	-183.96
	nD	0	10.7078	0.0758	0.0895	4.7305	-0.3955	0.3403
		1	2.1582	-9.6190	3.7797	7.0404	-8.8717	3.3211
		2	-14.6308	29.6360	-14.8892	-8.2357	12.9585	-6.1419
	nF	0	2.8819	0.0170	0.0004	2.3417	-0.1373	0.0112
		1	-2.5970	1.7356	-0.8345	-3.1989	5.2195	-2.7710
		2	1.9236	-3.1087	6331	4.6454	-10.1046	5.4104

Ион	Серия	i	b_{i0}^d	b_{i1}^d	b_{i2}^d	b_{i0}^e	b_{i1}^e	b_{i2}^e
Ca ⁺	nS	0	4.3797	-0.0029	0.0249	1.4150	-0.0184	0.0231
		1	-2.6029	1.4519	-0.7691	-0.4466	0.6728	-0.3791
		2	-0.0116	0.5725	-0.2030	0.2344	-0.3811	0.2618
	nP	0	2.2846	-0.0545	0.0911	8.8439	-0.7367	0.4719
		1	5.8665	-8.9353	3.7997	23.3318	-30.3769	13.0557
		2	-0.8418	1.8736	-0.6942	1.9494	-11.5496	6.8566
	nD	0	1.8656	0.0161	0.0048	1.5850	-0.0947	0.0860
		1	1.8287	-3.9028	1.7833	0.3433	-0.2540	-0.070
		2	-2.4376	7.7917	-2.3706	-0.5564	0.6894	-0.2366
	nF	0	2.8477	-0.0002	0.0146	1.6176	-0.1182	0.1028
		1	-4.1997	5.0185	-2.5140	0.5475	-0.3871	-0.0578
		2	3.5099	-6.3592	3.3534	-0.3318	-0.2053	0.2642
Sr ⁺	nS	0	4.5346	-0.0018	0.0230	1.6813	-0.0215	0.0252
		1	-2.8469	1.8090	-0.9255	-0.7640	1.1497	-0.6055
		2	-0.2511	0.9989	-0.4235	0.3734	-0.6813	0.4196
	nP	0	1.9422	-0.0292	0.0689	5.6218	-0.5627	0.3353
		1	5.3985	-8.5583	3.6782	17.8411	-23.2059	10.0486
		2	-3.4294	6.5172	-3.1008	-1.8049	-2.7602	2.1419
	nD	0	1.9047	0.0103	0.0177	0.6332	-0.0204	0.0231
		1	2.1391	-4.5311	2.0423	0.1627	-0.1970	0.0278
		2	-3.8093	7.4205	-3.7222	-0.1624	0.2842	-0.1011
	nF	0	1.6058	0.0011	0.0108	1.4786	-0.1110	0.0989
		1	-2.3111	2.8009	-1.4104	0.7886	-0.7779	0.1411
		2	1.4219	-2.4712	1.3173	-1.6324	2.3680	-1.0820
Ba ⁺	nS	0	4.4179	-0.0053	0.0222	1.9740	-0.0207	0.0223
		1	-2.5327	1.5395	-0.7880	-1.1021	1.6551	-0.8311
		2	-0.9077	2.1183	-0.9899	0.6609	-1.4197	0.8384
	nP	0	1.6904	-0.0373	0.0636	5.9053	-0.6016	0.3794
		1	7.0145	-10.5026	4.6328	23.5827	-31.5054	13.7893
		2	-6.1107	11.8609	-5.9223	-17.5665	27.4764	-13.3585
	nD	0	1.8155	0.0099	0.0214	1.0818	-0.0387	0.0388
		1	3.9087	-6.9790	3.1793	1.1410	-1.5593	0.6214
		2	-5.8566	11.2319	-5.6638	4.1137	-10.9291	6.7099
	nF	0	2.127	-0.5187	0.5164	1.940	-0.4618	0.4545
		1	-1.815	3.386	-2.665	0.1327	0.8000	-1.228
		2	1.471	-3.132	2.399	0.2118	-1.530	1.287

Отметим, что относительные скорости распадов и возбуждений ридберговских уровней в дискретные состояния энергии могут быть описаны единообразно при использовании выражения (3.19), различаются в этом случае только коэффициенты полинома $Q(x)$, однако скорость ионизации высоковозбужденного состояния демонстрирует иное асимптотическое поведение и должна быть рассмотрена отдельно. Так, экспериментальные и теоретические исследования показывают, что вклад переходов в состояния непрерывного спектра для ридберговских уровней становится пренебрежимо мал в сравнении с вкладом термоиндуцированных распадов и возбуждений, а также вкладом спонтанных переходов, поэтому соответствующая асимптотика должна отражать более резкий экспоненциальный спад общей скорости ионизации.

3.2.3. Ионизационное уширение ридберговских уровней тепловым излучением

Третий тип индуцированных тепловым излучением переходов представляет собой переход в состояния с положительной энергией $E > 0$. Вероятность этого процесса вычисляется по формуле:

$$\Gamma_{nl}^c = \frac{4}{3c^3(2l+1)} \sum_{l' = l \pm 1} l' \int_0^{\infty} \frac{|\langle \varepsilon l' | r | nl \rangle|^2 (\varepsilon + |E_{nl}|)^3}{e^{(\varepsilon + |E_{nl}|)/kT} - 1} d\varepsilon. \quad (3.20)$$

Обычно вклад таких переходов невелик по сравнению со вкладом индуцированных распадов и возбуждений и не превышает 5-10 %. Расчет интеграла, входящего в выражение для скорости ионизации, реализуем только численно, поэтому целесообразно оценить вклад соответствующей скорости переходов в общую скорость распада. В разделе 3.1 представлен способ такой оценки через известные аппроксимационные зависимости для сечений ионизации, показавшие хорошую точность применительно к расчетам оптических характеристик щелочных атомов [42], однако для оценки уширения уровней с большими орбитальными моментами $l > 4$, может быть применен и альтер-

нативный способ, основанный на правиле сумм сил осцилляторов.

Преобразуем общую скорость термоиндуцированных переходов во все доступные состояния дискретного и непрерывного спектров

$\Gamma_{nl}^{BBR} = \Gamma_{nl}^d + \Gamma_{nl}^e + \Gamma_{nl}^c$ при асимптотическом условии $\omega \ll kT$

$$\Gamma_{nl}^{BBR} = \frac{4kT}{3c^3(2l+1)} \sum_{l'=l\pm 1} l > \left\{ \sum_{n'} |\omega_{n'l'nl}|^2 |\langle n'l'|r|nl \rangle|^2 + \int_0^\infty |\langle \varepsilon l'|r|nl \rangle|^2 (\varepsilon + |E_{nl}|)^2 d\varepsilon \right\} \approx \frac{2kT}{c^3} S_{nl}(1), \quad (3.21)$$

где сумма моментов сил осцилляторов $S_{nl}(1)$ включает в себя как дискретную, так и непрерывную составляющие, и для гамильтонианов атомных потенциалов, корректно определяющих правило сумм (в том числе потенциала, используемого в МКД), выражается следующим образом:

$$S_{nl}(1) = \frac{2Z^2}{3\nu_{nl}^2} \quad (3.22)$$

Необходимо отметить, что полученное выражение будет (3.21) справедливо только для состояний с высокими орбитальными моментами l . В общем же случае полученное соотношение неверно учитывает вклад распадов в нижние энергетические уровни, поскольку для этих переходов не выполняется условие $\omega_{nn'} \ll kT$, поэтому выражение для термоиндуцированной скорости переходов должно быть преобразовано следующим образом:

$$\Gamma_{nl}^{BBR} = \frac{2kT}{c^3} S_{nl}(1) f(n, l, T), \quad (3.23)$$

где $f(n, l, T) \rightarrow 1$ – некоторая функция от главного квантового числа, орбитального момента и температуры, стремящаяся к единице при достаточно больших значениях своих параметров.

Сумма моментов сил осцилляторов может быть также разделена на три слагаемых, соответствующих различным группам переходов:

$$S_{nl}^c(1) = S_{nl}(1) - S_{nl}(1)^d - S_{nl}(1)^e. \quad (3.24)$$

Учитывая выражение (3.23), имеем соотношение:

$$S_{nl}^c(1)/S_{nl}(1) = \Gamma_{nl}^c/\Gamma_{nl}^{BBR}. \quad (3.25)$$

Полученное выражение позволяет оценить вклад переходов в состояния непрерывного спектра в суммарную скорость распада состояния с большим орбитальным моментом, используя вычисленные скорости распадов и возбуждений.

Однако зависимость (3.23) демонстрирует, что для получения достоверных данных о тепловом уширении уровня необходимо, чтобы расчет первых моментов сил осцилляторов согласовывался с правилом (3.22). Это наблюдение позволило сделать вывод о том, что использование метода модельного потенциала Фьюса в расчетах термоиндуцированного сдвига приведет к существенным погрешностям.

Для одновременной оценки характеристик большого числа уровней, необходимо получить и явный вид зависимости относительной скорости ионизации $R_{nl}^c(T)$ от температуры и главного квантового числа по аналогии с аппроксимацией для относительных скоростей распадов и возбуждений (3.19). Так же, как и аппроксимация (3.19), выражение для расчета полной скорости ионизации ридберговского уровня должно содержать в числителе полином по обратным степеням безразмерного параметра, связанного с показателем экспоненты ω_0/kT , входящей в выражение в знаменателе наряду со степенью главного квантового числа n^q . Однако характерная частота ω_0 , соответствующая максимальной вероятности перехода, должна совпадать не с разностью энергий соседних уровней, а с собственной энергией состояния E_{nl} , поскольку матричные элементы переходов в континуум убывают по мере отдаления от порога, а значит, основной вклад в скорость ионизации достигается за счет перехода в состояние с нулевой энергией. Показатель степени главного квантового числа, согласно квазиклассическому подходу, должен стремиться к значению $4/3$, однако наилучшая сходимость достигается при показателях,

немного отклоняющихся от этой величины [91].

Таким образом, отношение скорости термоиндуцированной ионизации к скорости спонтанных распадов для высоковозбужденных уровней в диапазоне температур $T = 100 - 2000 \text{ K}$ может быть представлено следующим образом:

$$R_{nl}^c = \frac{a_0(T)^c + a_1^c(T)y + a_2^c(T)y^2}{(n)^q \left(e^{\frac{Z^2 T_a}{2n^2 T}} - 1 \right)}, y = \frac{1000}{nT^{1/2}} \approx \left(\frac{Z^2 T_a}{2n^2 T} \right)^{\frac{1}{2}},$$

$$a_n^c(T) = \sum_{k=0}^2 b_{nk}^c t^k, t = \left(\frac{100}{T} \right)^{1/2} \quad (3.26)$$

Коэффициенты $a_i(T)$ были получены стандартной полиномиальной интерполяцией, затем схожая процедура была реализована для нахождения коэффициентов b_{ik} . Численные значения Γ_{nl}^{sp} , $\Gamma_{nl}^{d,e}$ были вычислены по формулам (3.1,3.2) с использованием радиальных волновых функций метода квантового дефекта, для упрощения расчета Γ_{nl}^c (3.8) применялись квазиклассические аппроксимации для сечения ионизации и порогового сечения ионизации [91], [95]:

$$\sigma_{nl}(\omega) \approx \sigma_{nl}^{thr} \left| \frac{E_{nl}}{\omega} \right|^{\beta_{nl}}, \sigma_{nl}^{thr} = s_l^{(0)} n^p \left(1 + \frac{s_l^{(1)}}{n} + \frac{s_l^{(2)}}{n^2} \right). \quad (3.27)$$

Результаты квазиклассической теории показывают, что значение показателя степени p для ридберговских серий состояний с малым орбитальным моментом $l \ll n$ стремится к величине $5/3$, однако это значение достигается при очень высоких n , в общем же случае для высоковозбужденных уровней этот показатель остается близким к $5/3$ и может быть представлен отношением целых чисел [29].

В таблице 3.13 [29] представлены параметры b_{ik} , определяющие коэффициенты полинома $a_i(T)$ (3.26) и наиболее подходящие для данной l -серии уровней показатели степени q главного квантового числа n в выражении (3.26), а также показатели степени p в асимптотической аппроксимации для пороговой ионизации 3.27.

Таблица 3.13. [29] Численные значения коэффициентов b_{ik}^c температурно зависимого полинома и показатель степени q в асимптотическом представлении относительной скорости термоиндуцированной ионизации (3.26); параметр p и коэффициенты $s_l^{(i)}$ аппроксимации порогового сечения ионизации ридберговских уровней щелочноземельных ионов Ca^+ , Sr^+ , Ba^+ .

Ион	Серия	i	b_{i0}^c	b_{i1}^c	b_{i2}^c	p	$s_l^{(i)}$	q	
Ca^+	nS	0	0.06800	-0.01126	0.0002543	58/31	0.007441	41/38	
		1	-0.163097	0.18354	-0.08191		-23.26		
		2	0.12742	-0.2124	0.1061		98.02		
	nP	0	78.13	-11.07	0.3703	5/3	2.821	4/3	
		1	-17.95	-112.1	76.31		-3.721		
		2	80.03	-134.5	71.06		208.4		
	nD	0	5.772	-0.8150	-0.01454	55/32	0.8997	40/32	
		1	-7.082	2.247	0.1884		-3.285		
		2	2.311	1.171	-2.001		-351.6		
	nF	0	14.088	-1.765	-0.06761	51/32	2.210	4/3	
		1	-2.944	-22.29	15.22		8.467		
		2	-4.933	24.89	-16.97		97.64		
	Sr^+	nS	0	0.16136	-0.02041	-0.001389	58/31	0.015088	35/32
			1	-0.1649	-0.01518	0.04909		7.003	
			2	-0.1078	0.4512	-0.3045		-1053.0	
nP		0	50.814	-6.699	0.1319	5/3	2.746	4/3	
		1	11.752	-119.38	74.50		-1.392		
		2	19.110	-13.991	4.3153		31.56		
nD		0	1.061	-0.1571	0.0005005	57/32	0.2390	45/38	
		1	-1.624	1.050	-0.3074		-16.40		
		2	0.8827	-0.8406	0.2441		13.78		
nF		0	222.4	-22.88	10.13	51/32	3.059	46/32	
		1	-87.59	1.534	-1.541		0.6444		
		2	-2.098	7.787	-5.209		40.39		

Ион	Серия	i	b_{i0}^c	b_{i1}^c	b_{i2}^c	p	$s_l^{(i)}$	q
Ba ⁺	nS	0	0.7750	-0.1116	-0.000877	57/32	0.07239	40/34
		1	-1.103	0.5882	-0.1289		-5.786	
		2	0.4704	-0.2271	-0.04108		-217.8	
	nP	0	50.18	-7.333	0.4223	5/3	2.161	4/3
		1	-6.921	-79.18	52.34		-11.26	
		2	65.77	-127.1	71.36		582.4	
	nD	0	2.548	-0.3527	-0.00520	56/32	0.4937	44/36
		1	-2.590	-0.05117	0.6310		-12.75	
		2	0.8002	0.8163	-0.9962		-9.271	
	nF	0	19.42	-3.067	0.1098	5/3	2.086	4/3
		1	-27.66	16.83	-4.688		5.683	
		2	33.84	-60.44	31.82		65.35	

3.2.4. Полная ширина ридберговского уровня

Полное время жизни ридберговского уровня, обратно пропорциональное полному уширению состояния, существенно зависит от температуры. Как было показано ранее, для полной скорости распада состояния с произвольным высоким n при определенной температуре излучения T не удастся подобрать подходящую аппроксимационную зависимость, воспроизводящую с малой погрешностью результаты точных расчетов в широком диапазоне главных квантовых чисел и температур. Поэтому полное время высоковозбужденного уровня может быть оценено при использовании асимптотических выражений для вероятностей переходов разных типов следующим образом:

$$\tau_{nl} = \Gamma_{nl}(1 + R_{nl}^d + R_{nl}^e + R_{nl}^c), \quad (3.28)$$

где $R_{nl}^{d,e}$ и R_{nl}^c определяются выражениями (3.19, 3.26).

На рисунке 3.2 представлены зависимости относительных скоростей термощиндуцируемых переходов от температуры и номера уровня, а также соответствующие зависимости для полного времени жизни nS -энергетических уровней ионов Ca⁺.

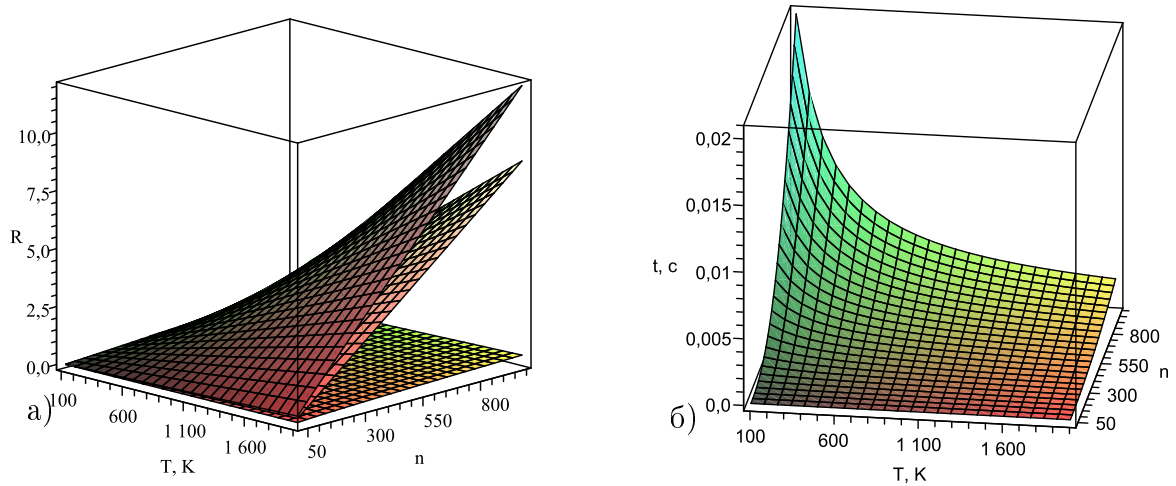


Рис. 3.1. а) Зависимости от главного квантового числа и температуры относительных вкладов вероятностей переходов в состояния дискретного спектра $E_{nl} > E_{n'l'}$ $|nl\rangle$ (верхняя поверхность, R^d) $|n'l\pm 1\rangle$, $E_{nl} < E_{n'l'}$, (средняя поверхность, R^e) и переходов в непрерывный спектр $|El\pm 1\rangle$ (нижняя поверхность R^c) в полную ширину уровня для nS -состояний Ca^+ , б) Полное время жизни nS -уровня Ca^+ при различных n и T

Полученные результаты позволяют сделать вывод о том, что для высоко-возбужденных ридберговских уровней при достаточно высоких температурах окружающей среды основной вклад в нестабильность состояния вносят термоиндуцированные переходы в близлежащие энергетические уровни, причем численные значения скоростей распадов и возбуждений сопоставимы для рассмотренного в работе диапазона значений квантовых чисел и температур, тогда как скорость ионизации ридберговского уровня существенно меньше скоростей переходов в состояния дискретного спектра.

3.3. Термоиндуцированный сдвиг ридберговских уровней энергии

Наряду с сокращением естественного времени жизни энергетического состояния под действием теплового поля возникает еще один индуцированный квантовый эффект – смещение положения энергетического уровня, достаточно малое для низковозбужденных состояний, однако существенное при опи-

сании ридберговских уровней. Известно, что величина теплового сдвига высоковозбужденного уровня стремится к асимптотическому значению, практически не зависящему от главного квантового числа и даже от специфики атомного спектра, однако в диссертационной работе показано, что данное асимптотическое значение достигается для сдвигов щелочноземельных ионов с главным квантовым числом $n \sim 150$, причем слабая зависимость от n сохраняется и для более высоких возбужденных уровней.

Как было показано в главе 1, термоиндуцированный энергетический сдвиг представляет собой действительную часть комплексного штарковского сдвига и может быть рассчитан согласно следующей зависимости:

$$\varepsilon_{nl}^{BBR} = -\frac{2(kT)^3}{3\pi c^3(2l+1)} \sum_{l'=l\pm 1} l' \left\{ \sum_{n'} |\langle n'l'|r|nl \rangle|^2 F\left(\frac{\omega_{nn'}}{kT}\right) + \int_0^\infty |\langle \varepsilon l'|r|nl \rangle|^2 F\left(\frac{\varepsilon + |E_{nl}|}{kT}\right) d\varepsilon \right\}. \quad (3.29)$$

В выражении для штарковского сдвига (1.26) можно выделить дискретную и непрерывную компоненты:

$$\varepsilon_{nl}^{BBR} = \varepsilon_{nl}^{dis}(T) + \varepsilon_{nl}^c(T), \quad (3.30)$$

где $\varepsilon_{nl}^{dis}(T)$ определяет вклад в термоиндуцированный сдвиг разрешенных переходов в вышележащие и нижележащие состояния дискретные энергетические состояния, а $\varepsilon_{nl}^c(T)$ соответствует вкладу переходов в континуум.

Поскольку вклад переходов в непрерывный спектр существенно меньше общего вклада переходов в состояния с отрицательной энергией и расчет интеграла, входящего в выражение для термоиндуцированного сдвига, реализуем только численно, поэтому целесообразно оценить этот вклад с учетом квазиклассических выражений для сечений ионизации, как это было сделано

при расчете непрерывной составляющей теплового уширения:

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{nl}^c &= -\frac{2(kT)^3}{3\pi c^3(2l+1)} \sum_{l'=l\pm 1} l_{>} \int_0^{\infty} |\langle \varepsilon' l' | r | nl \rangle|^2 F\left(\frac{\omega}{kT}\right) d\varepsilon = \\
&= -\frac{2(kT)^3}{3\pi c^3(2l+1)} \sum_{l'=l\pm 1} l_{>} |\langle \varepsilon = 0 l' | r | nl \rangle|^2 \int_0^{\infty} \frac{F\left(\frac{\omega}{kT}\right)}{\left(\frac{\omega}{|E_{nl}|}\right)^{\beta_{nl}}} d\varepsilon = \\
&= -\frac{\sigma_{nl}^{thr}}{2c^2} \left(\frac{kT}{\pi}\right)^3 \Psi_{\beta_{nl}}\left(\frac{|E_{nl}|}{kT}\right), \tag{3.31}
\end{aligned}$$

где по аналогии с функцией Фарлея-Винга введена функция

$$\Psi_{\beta}(\alpha) = \int_1^{\infty} \frac{F(\alpha x)}{x^{\beta+1}} dx. \tag{3.32}$$

Расчет теплового сдвига, индуцированного дискретно-дискретными переходами с волновыми функциями метода квантового дефекта может быть выполнен точно.

Функция, определяющая зависимость теплового сдвига от главного квантового числа n для уровней с $n < 50$ существенно различается для разных орбитальных моментов l , однако, общий вид функции для различных ионов щелочноземельных элементов с одинаковыми орбитальными моментами l при равной температуре теплового излучения T остается примерно постоянным. Примеры зависимости теплового сдвига от главного квантового числа от температуры представлены на рисунках 3.2, 3.3, 3.4. Функции построены по точкам, полученным прямыми расчетами $\varepsilon_{nl}^{dis}(T)$ и оценкой $\varepsilon_{nl}^c(T)$ согласно выражению (3.31).

Для высоковозбужденных энергетических уровней возможно получить простое аналитическое выражение, позволяющее определить тепловой сдвиг без вычисления матричных элементов переходов. Такое выражение может быть получено при использовании асимптотического поведения функции Фарлея-Винга: при малых и больших значениях аргумента функция принимает

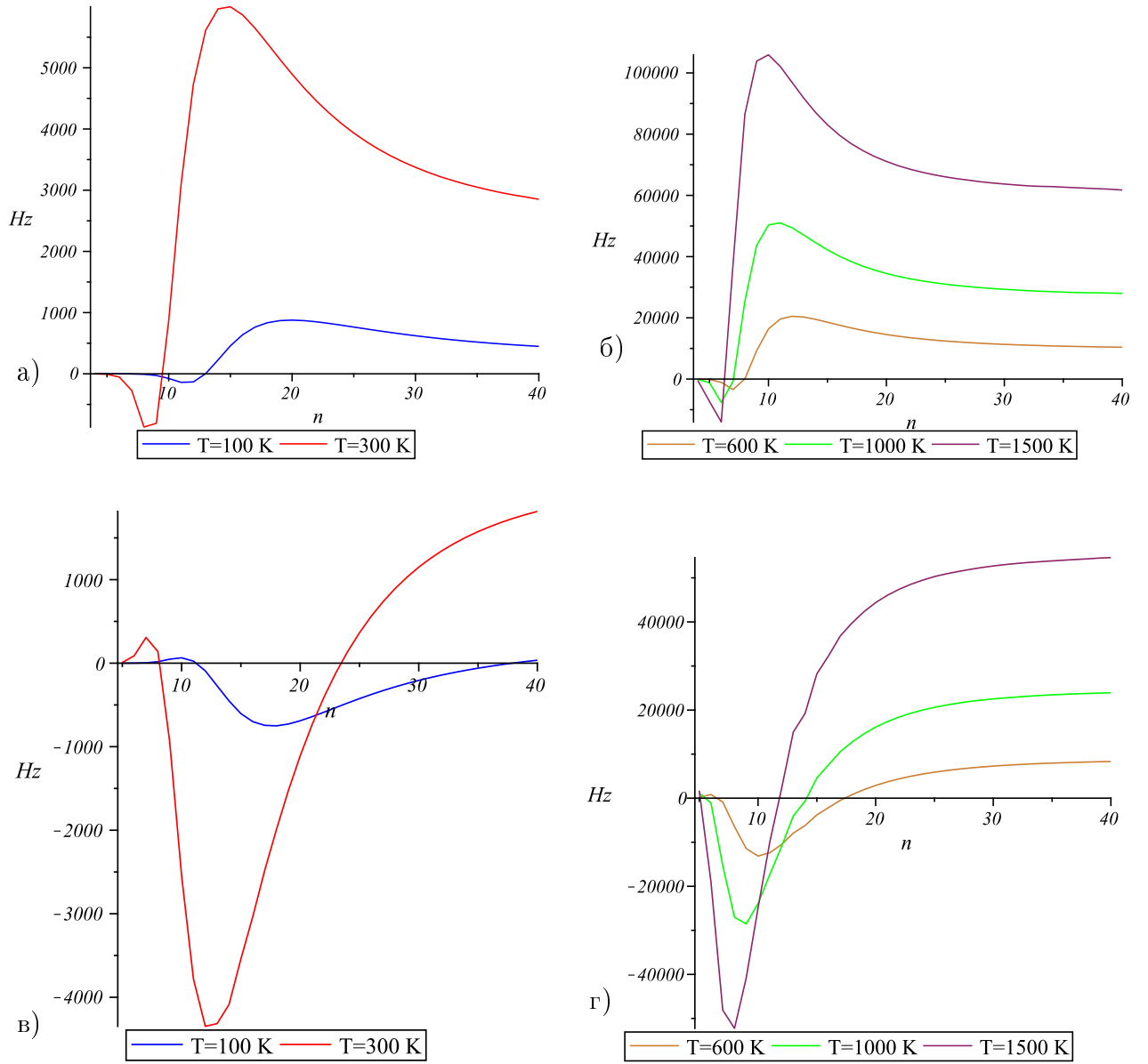


Рис. 3.2. Термоиндуцированный штарковский сдвиг возбужденных энергетических состояний ионов кальция при различных температурах излучения: а),б) – nS -серии состояний, в),г) – nP -серии состояний

следующие значения [29]:

$$F(z) \approx \begin{cases} -2z \int_0^{\infty} \frac{x dx}{e^x - 1} = -\frac{\pi^2 z}{3} + 6z^3, & |z| \ll 1 \\ \frac{2}{z} \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} + \frac{2}{z^3} \int_0^{\infty} \frac{x^5 dx}{e^x - 1} = \frac{2\pi^4}{15z} + \frac{16\pi^6}{63z^3} + \frac{15\pi^8}{16z^5}, & |z| > 40. \end{cases} \quad (3.33)$$

Очевидно, что для ридберговских уровней термоиндуцированный сдвиг стремится к своему асимптотическому значению [48], [96].

$$\varepsilon_{nl}^{BBR} = \frac{\pi(kT)^2}{3c^3} S_{nl}(0). \quad (3.34)$$

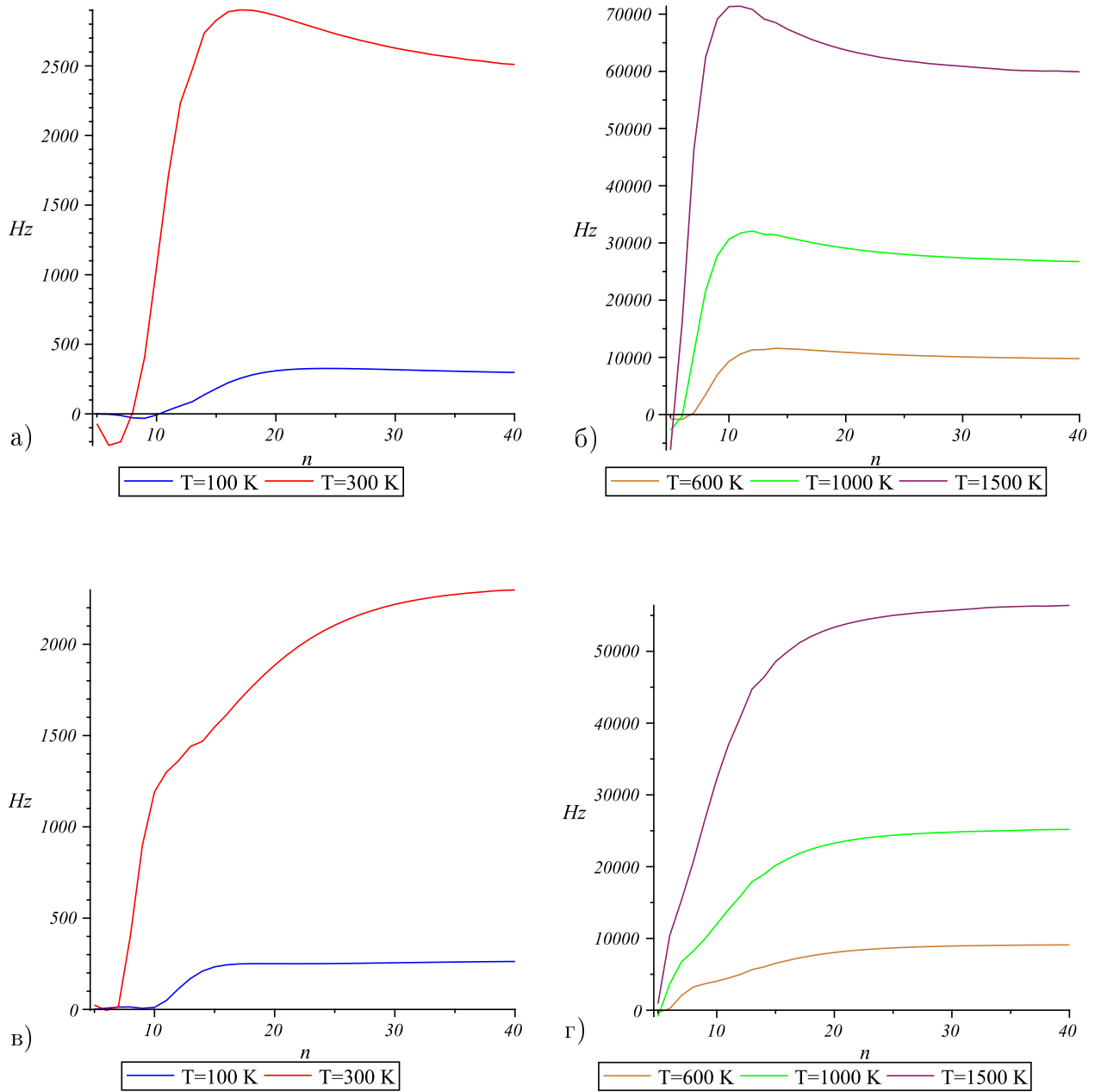


Рис. 3.3. Термоиндуцированный штарковский сдвиг возбужденных энергетических состояний ионов кальция при различных температурах излучения: а),б) – nD -состояния, в),г) – nF -состояния

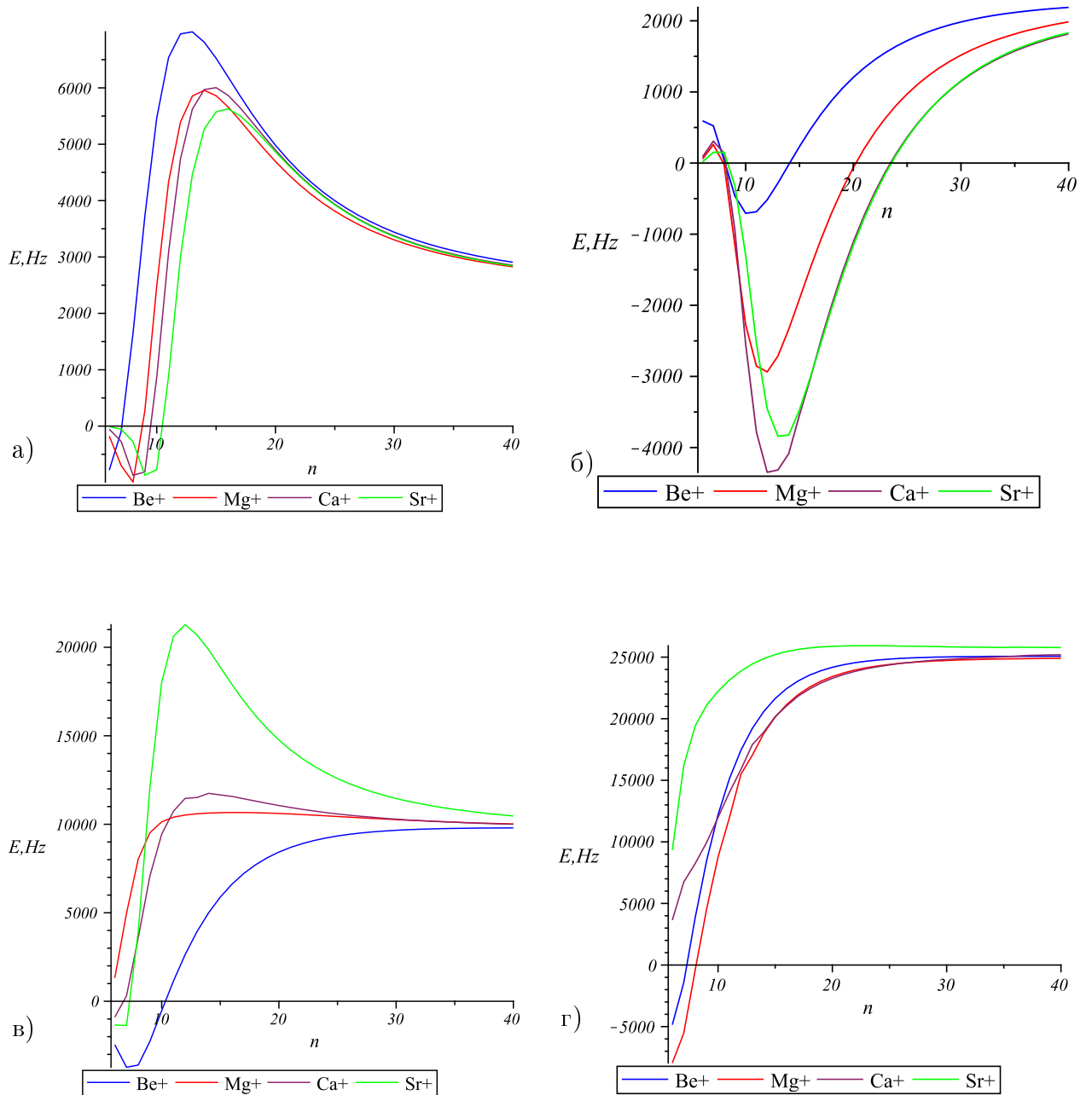


Рис. 3.4. Термоиндуцированный штарковский сдвиг энергетических уровней ионов щелочноземельных элементов: а) – nS -состояния при $T = 300K$, б) – nP -состояния при $T = 300K$, в) – nD -состояния при $T = 600K$, г) – nF -состояния при $T = 1000K$

Эту зависимость можно получить при подстановке асимптотического значения функции Фарлея-Винга (3.33) при условии $|E_{nl}| \ll kT$ в выражение (3.29), однако необходимо учесть, что кроме слагаемого, содержащего сумму сил осцилляторов, появится поправочное слагаемое, связанное с эмпириче-

ским членом $6z^3$ выражения (3.33).

Кроме того, при переходах с ридберговских уровней с малыми орбитальными моментами на низкоэнергетические уровни соотношение $\omega \ll kT$ выполняться не будет. Поскольку наибольший вклад в термоиндуцированные процессы дают переходы в близкие энергетические уровни, а вклад в общий термоиндуцированный сдвиг переходов в состояния непрерывного спектра оценивается в несколько процентов от общего значения, выражение (3.34) может быть дополнено полиномом по степеням безразмерного параметра, сохраняя общий вид зависимости от суммы сил осцилляторов $S_{nl}(0)$.

Точные численные расчеты термоиндуцированного сдвига показывают, что подходящей является аппроксимация вида:

$$\varepsilon_{nl}^{BBR} = \frac{\pi(kT)^2}{3c^3} S_{nl}(0) f \left(\sqrt{\frac{|E_{nl}|}{kT}} \right), \quad (3.35)$$

где полином по степеням параметра, равного квадратному корню из отношения энергии связи и тепловой энергии $\frac{|E_{nl}|}{kT}$, стремится к единице с ростом n . Кроме того, коэффициенты в полиноме полагаются слабыми температурно зависимыми величинами. В работе [29] выражение (3.35) представлено в виде:

$$\varepsilon = \varepsilon_0 (T/300)^2 (a_0^\varepsilon(T) + a_1^\varepsilon(T)z + a_2^\varepsilon(T)z^2),$$

$$z = \left(\frac{|E_{nl}|}{kT} \right)^{1/2}, \quad a_i^\varepsilon(T) = \sum_{k=0}^2 b_{ik}^\varepsilon t^k, \quad t = \left(\frac{100}{T} \right)^{1/2}. \quad (3.36)$$

где $\varepsilon_0 = 2416.6$ кГц – термоиндуцированный сдвиг при температуре 300 К.

Коэффициенты b_{ik} , определяющие коэффициенты полинома, входящего в выражения для термоиндуцированного сдвига для ридберговских S, P, D, F -уровней однократных ионов щелочноземельных элементов приведены в таблице 3.14.

Анализ полученных результатов демонстрирует, что несмотря на то, что значение термоиндуцированного сдвига ридберговского уровня стремится к постоянной величине, не зависящей ни от номера уровня, ни от заряда иона,

Таблица 3.14. [29] Численные значения параметров b_{ik}^ε , определяющих коэффициенты температурно зависимого полинома в выражении (3.3) для аппроксимации теплового сдвига ридберговских nS -, nP -, nD - и nF -состояний щелочноземельных ионов.

Ион	Серия	i	b_{i0}^ε	b_{i1}^ε	b_{i2}^ε	
Be^+	nS	0	0.9950	0.0301	-0.0136	
		1	-0.1263	0.6075	-0.8674	
		2	1.0255	-5.0762	6.2493	
	nP	0	0.9980	0.0160	-0.0307	
		1	0.0719	-0.3576	0.5104	
		2	-0.1092	0.5438	-0.0674	
	nD	0	0.9967	0.0292	-0.0575	
		1	-0.0161	0.0045	0.1229	
		2	0.3689	-1.7099	1.8477	
	nF	0	0.9973	0.0242	-0.0431	
		1	-0.0416	0.1418	-0.0866	
		2	0.5161	-2.4519	2.7813	
	Mg^+	nS	0	0.9964	0.0196	0.0011
			1	-0.1102	0.5433	-0.7958
			2	0.8348	-4.1449	5.1300
nP		0	0.9945	0.0420	-0.0929	
		1	0.0927	-0.5490	0.9012	
		2	-0.3304	1.7761	-2.4524	
nD		0	0.9983	0.0101	-0.0040	
		1	-0.0473	0.2269	-0.3241	
		2	0.4677	-2.3143	2.8487	
nF		0	0.9965	0.0307	-0.0593	
		1	-0.0253	0.0460	0.0725	
		2	0.4415	-2.0604	2.2553	

Ион	Серия	i	b_{i0}^ε	b_{i1}^ε	b_{i2}^ε	
Ca ⁺	nS	0	0.9963	0.01489	0.04741	
		1	0.02419	-0.2807	0.03307	
		2	0.1085	0.2911	-0.1298	
	nP	0	1.0011	0.03027	-0.1708	
		1	-0.1049	0.5091	0.06741	
		2	0.08732	-0.8607	0.3541	
	nD	0	0.9975	0.01955	-0.02170	
		1	-0.008936	-0.04998	0.06623	
		2	0.09018	-0.0455	-0.01388	
	nF	0	0.9992	0.02963	-0.09165	
		1	-0.06863	0.2011	0.6374	
		2	0.1687	-0.4846	0.1971	
	Sr ⁺	nS	0	0.9952	0.01923	0.04766
			1	0.03111	-0.3167	0.05389
			2	0.1056	0.3202	-0.1553
nP		0	1.0044	0.01813	-0.1631	
		1	-0.1250	0.5818	0.1439	
		2	0.1184	-0.9421	0.4192	
nD		0	0.9936	0.02921	0.02875	
		1	0.02990	-0.3168	0.08564	
		2	0.1179	0.3011	-0.1607	
nF		0	1.0030	0.00578	-0.7571	
		1	-0.06514	0.02855	-0.211	
		2	0.07472	-0.4353	0.1982	
Ba ⁺		nS	0	0.9965	0.01398	0.04825
			1	0.02446	-0.2813	0.4200
			2	0.1075	0.2696	-0.1328
	nP	0	1.0008	0.03545	-0.1901	
		1	-0.1167	0.5626	0.07182	
		2	0.09911	-0.9547	0.4019	
	nD	0	0.9942	0.03039	-0.00292	
		1	0.01503	-0.2020	0.9832	
		2	0.09896	0.1297	-0.09894	
	nF	0	1.0011	0.2001	-0.1117	
		1	-0.07629	0.3442	0.03465	
		2	0.07913	-0.5877	0.2528	

одинаковой для всех ионов щелочноземельной группы, необходимо учитывать поправку к выражению (3.34), связанную со спецификой структуры энергетического спектра. Выражение (3.34) начинает выполняться с хорошей точностью для уровней ионов щелочноземельных элементов с номерами $n > 150$. Кроме того, прямая зависимость термоиндуцированного сдвига от суммы сил осцилляторов позволяет сделать вывод о применимости полуэмпирических потенциалов к расчетам радиационных переходов. Как было показано в пункте 2.4 диссертационной работы, при вычислении суммы сил осцилляторов переходов с волновыми функциями модельного потенциала Фьюса происходит нарушение правила сумм Томаса-Райхе-Куна, что обусловлено зависимостью этих сумм от параметров B_l потенциала и орбитального момента уровня. Поэтому вычисление термоиндуцированного сдвига методом МПФ приводит к существенным погрешностям, тогда как применение волновых функций МКД в расчетах теплового сдвига высоковозбужденных уровней позволяет получить результат, согласующийся с асимптотическим значением.

Возможность выразить тепловой сдвиг через сумму сил осцилляторов позволяет в некоторых случаях оценить вклад переходов в состояния непрерывного спектра, поскольку расчет ε_{nl}^c реализуем только численно, даже после упрощения выражения с учетом квазиклассических выражений для сечений ионизации. Для уровней с достаточно высокими орбитальными моментами будет справедлива следующая зависимость:

$$\frac{\varepsilon_{nl}^c}{\varepsilon_{nl}^{BBR}} = \frac{S_{nl}^c(0)}{S_{nl}(0)}, \quad (3.37)$$

которая позволит произвести численную оценку ε_{nl}^c .

Выражение (3.37) может быть применено и для оценки компоненты ε_{nl}^c штарковского сдвига ридберговских уровней с малыми орбитальными моментами без заметной потери точности, поскольку вклад переходов в непрерывный спектр в значение штарковского сдвига не является существенным.

3.4. Выводы к третьей главе

В третьей главе диссертационной работы представлены основные численные результаты исследования влияния теплового излучения на оптические характеристики ридберговских ионов щелочноземельных элементов. Проанализировано изменение термоиндуцированных сдвига и уширения с ростом номера возбужденного уровня и температуры окружающей среды, а также сокращение полного времени жизни в поле теплового излучения. Предложены простые асимптотические зависимости теплового сдвига и относительных скоростей термоиндуцированных переходов от главного квантового числа уровня и температуры излучения.

Заключение

В диссертационной работе был проведен сравнительный анализ двух полуэмпирических методов расчета радиационных переходов на примере изменения оптических характеристик щелочноземельных ионов под действием теплового излучения. Результаты исследований, полученные в ходе выполнения работы, позволили сформулировать условие применимости методов в расчетах оптических характеристик энергетических уровней атомов и ионов с одним валентным электроном.

Полученные в работе качественные закономерности воздействия излучения черного тела на однократные ионы щелочноземельных элементов, а также простые асимптотические зависимости полного уширения и термоиндуцированного сдвига от главного числа энергетического состояния и температуры чернотельного излучения могут быть востребованы при планировании прецизионных экспериментов с ридберговскими ионами. Результаты работы также могут быть информативны при проведении дальнейших теоретических исследований взаимодействия ридберговских объектов с полем теплового излучения.

Основные результаты исследования:

1. Определен критерий применимости полуэмпирических моделей атомного потенциала в расчетах амплитуд спонтанных и термоиндуцированных радиационных переходов.
2. Выявлены существенные различия в применимости полуэмпирических методов МПФ и МКД в расчетах оптических характеристик, определяющихся численными значениями спектральных сумм сил осцилляторов атомов и ионов.
3. Определены вклады различных компонент дискретного спектра и континуума в количественные характеристики термоиндуцированных сдви-

гов и уширений ридберговских состояний.

4. Получены аналитические соотношения для оценки вклада непрерывного спектра в сдвиг и уширение ридберговских уровней энергии тепловым излучением.
5. Предложены асимптотические аппроксимации и определены численные значения коэффициентов аппроксимационных полиномов, определяющих количественные характеристики спонтанных и термоиндуцированных радиационных процессов в ридберговских ионах щелочноземельных элементов.

Автор выражает искреннюю благодарность Овсянникову Виталию Дмитриевичу за научное руководство, а также коллективу кафедры теоретической физики Воронежского госуниверситета за конструктивные обсуждения работы.

Список литературы

1. Takamoto, M. An optical lattice clock / M. Takamoto, F. L. Hong, R. Hogashi and H. Katori // Nature — 2005. — Vol. 435. — P. 321–324.
2. Ludlow, A.D. Sr Lattice Clock at 1×10^{-16} Fractional Uncertainty by Remote Optical Evaluation with a Ca Clock / A. D. Ludlow, T. Zelevinsky, G. K. Campbell et al // Science — 2008. — Vol. 319. — P. 1805–1808.
3. Zhang, X.L. Fidelity of a Rydberg-blockade quantum gate from simulated quantum process tomography / X. L. Zhang, A. T. Gill, L. Isenhower, T. G. Walker, and M. Saffman // Phys. Rev. A. — 2012. — Vol. 85. — 042310.
4. Muller, M. Trapped Rydberg ions: from spin chains to fast quantum gates / M. Muller, L. Liang, I. Lesanovsky and P. Zoller // New J. Phys. — 2008. — Vol. 10 — 093009.
5. Häffner H. Quantum computing with trapped ions / H. Häffner, C. F. Roos and R. Blatt // Phys. Rep. — 2008. — Vol. 469. — P. 155.
6. Deutsch, D. Quantum Theory, the Church-Turing Principle and the Universal Quantum Computer / D. Deutsch // Proc. R. Soc. London. — 1985. — Vol. 400. — P. 97-117.
7. Grynberg, G. Quantized motion of cold cesium atoms in two- and three-dimensional optical potentials / G. Grynberg, B. Lounis, P. Verkerk, J. Y. Courtois, C. Salomon // Phys. Rev. Lett. — 1993. — Vol. 70, № 15. — P. 2249-2254.
8. Scheunemann, R. Resolving and addressing atoms in individual sites of a CO₂-laser optical lattice / R. Scheunemann, F. S. Cataliotti, T. W. Hansch, M. Weitz // Phys. Rev. A. — 2000. - Vol. 62. — 051801.
9. Третьяков, Д.Б. Исследование квантовой интерференции и диполь-дипольного взаимодействия ридберговских атомов для применения в квантовых компьютерах: дисс. канд. физ.-мат. наук: 01.04.05 / Третья-

- ков Денис Борисович. — НГУ, 2005. — 123 с.
10. Saffman, M. Analysis of a quantum logic device based on dipole-dipole interactions of optically trapped Rydberg atoms / M. Saffman, T. G. Walker // *Phys. Rev. A.* — 2005. — Vol. 72. — 022347.
 11. Amini, J. M. Toward scalable ion traps for quantum information processing / J. M. Amini [et al] // *New J. Phys.* — 2010. — Vol. 12. — 033031.
 12. Benhelm, J. Experimental quantum-information processing with $^{43}\text{Ca}^+$ ions / J. Benhelm [et al] // *Phys. Rev. A.* — 2008. — Vol. 77. — 062306.
 13. Weibin, Li. Entangling quantum gate in trapped ions via Rydberg blockade / Li Weibin, I. Lesanovsky // *Applied Physics B.* — 2014. — Vol. 114, № 1-2. — P. 37-44.
 14. Gorshkov, A. V. Photon-Photon Interactions via Rydberg Blockade / A. V. Gorshkov, J. Otterbach, M. Fleischhauer, T. Pohl, M. D. Lukin // *Phys. Rev. Lett.* — 2011. — Vol. 107. — 133602.
 15. Wang, S. H. Demonstration of a quantum logic gate in a cryogenic surface-electrode ion trap / S. X. Wang, J. Labaziewicz, Y. Ge, R. Shewmon, I. L. Chuang // *Phys. Rev. A.* — 2010. — Vol. 81. — 062332.
 16. Ovsianikov, V. D. Rydberg spectroscopy in an optical lattice: Blackbody thermometry for atomic clocks / V. D. Ovsianikov, A. Derevianko, K. Gibble // *Phys. Rev. Lett.* — 2011. — Vol. 107. — 093003.
 17. Gross, M. Maser Oscillation and Microwave Superradiance in Small Systems of Rydberg Atoms / M. Gross [et al] // *Phys. Rev. Lett.* — 1979. — Vol. 43, № 5. — P. 343-346.
 18. Андреев, А.В. Коллективное спонтанное излучение (сверхизлучение Дикке) / А. В. Андреев, В. И. Емельянов, Ю. А. Ильинский // *Успехи физ. наук.* — 1980. — Т. 131, № 4. — С. 653-694.
 19. Dikke, R. H. Coherence in Spontaneous Radiation Processes / R. H. Dikke // *Phys Rev.* — 1954. — Vol. 93. — P. 99.
 20. Zhang, L. Evolution of the pairs of ultracold Rydberg atoms in the repulsive

- potential / L. Zhang, Z. Feng, C. Li, S. Jia // Optics Express — 2010. — Vol. 18, № 11. — P. 11599.
21. Brewer, R. G. Two-ion superradiance theory / R. G. Brewer // Phys. Rev. A. — 1995. — Vol. 52, № 4. — P. 2965-2970.
 22. Duan, B. Electron-impact broadening parameters for Be II, Sr II, and Ba II spectral lines / B. Duan [et al] // Astronomy & Astrophysics A& A — 2014. — Vol. 555. — A.144.
 23. Brage, T. Theoretical oscillator strengths for Sr II and Y III, with application to abundances in the HgMn-type star χ -Lupi./T. Brage, G. M. Wahlgren, S. G. Johansson, D. S. Leckrone, C. R. Brage Proffitt //The Astrophysical Journal. — 1998.— Vol. 496. — P. 1051-1057.
 24. Fano, U. Spectral distribution of atomic oscillator strength / U. Fano, J. W. Cooper // Rev. of Modern Phys. - 1968. - Vol. 8, №5 - P. 441-507.
 25. Глухов, И. Л. Времена жизни ридберговских состояний ионов II группы / И. Л. Глухов, Е. А. Никитина, В. Д. Овсянников // Оптика и Спектроскопия. — 2013. — Т. 115. — № 1. — С. 12–21. (Optics and Spectr. — 2013. — Vol. 115. — №.1. — P. 9–17).
 26. Glukhov, I. L. Natural lifetimes of excited states in the group II ions // I .L. Gluhov, E. A. Nikitina, V. D. Ovsiannikov // Вестник ВГУ. Серия Физика. Математика. — 2013. — № 2. — С. 33–53.
 27. Glukhov, I. L. Thermal shifts and broadening of Rydberg levels in Be II ions /I. L. Gluhov, E. A. Nikitina, V. D. Ovsiannikov // Phys. Scr. — 2013. — Vol. 157. — 6pp.
 28. Gluhov, I. L. Natural widths and blackbody radiation induced shift and broadening of Rydberg levels in magnesium ions / I. L. Glukhov, S. N. Mokhnenko, E. A. Nikitina, V. D. Ovsiannikov // Eur. Phys. J. D. — 2015. — Vol. 69, № 1. — 7 pp.
 29. Glukhov, I. L. Blackbody-radiation-induced shifts and the broadening of Rydberg states in the ions of group IIa elements / I. L. Gluhov,

- E. A. Nikitina, V. D. Ovsianikov // J. Phys. B. — 2016. — Vol. 49. — 16 pp.
30. Glukhov, I. L. Thermal shifts and broadening of Rydberg levels in Be II ions / I. L. Glukhov, E. A. Nikitina and V. D. Ovsianikov // ICOM 2012. The 3d Int. Conf. On the Physics of Optical Materials and Devices. Belgrade, Serbia. Book of abstracts. — P. 169.
31. Овсянников, В. Д. Тепловые сдвиги и уширения энергетических уровней в ионах Be II / В. Д. Овсянников, И. Л. Глухов, Е. А. Никитина // Материалы 6-го Международного симпозиума «Метрология времени и пространства». 17—19 сентября 2012, Россия, Менделеево. — С. 94—98.
32. Chernushkin, V. V. Thermal Shifts and Broadening of Energy Levels in the Group II Ions / V. V. Chernushkin, I. L. Glukhov, S. N. Mokhnenko, E. A. Nikitina, V. D. Ovsianikov // ICONO/LAT Conf. Program. — IWR11. — P. 66. — Moscow, June 18—22, 2013. — Technical Digest ICONO-03. — P. 55—56.
33. Nikitina E. A. Lifetimes of rydberg states in ions of the group II elements / E. A. Nikitina, I. L. Gluhov, V. D. Ovsyannikov // 11th International Colloquium on Atomic Spectra and Oscillator Strengths for Astrophysical and Laboratory Plasma. — ASOS 2013. Contributed papers. Mons — 2013. — P. 87.
34. Глухов, И. Л. Термоиндуцированные сдвиги и уширения уровней энергии в ионах II группы / И. Л. Глухов, Е. А. Никитина, В. Д. Овсянников // XX Конференция по фундаментальной атомной спектроскопии — ФАС-XX. Воронеж — 2014. — С. 158—160 23—27 сентября, 2013, Воронеж.
35. Чернушкин, В. В. Стандарты частоты нового поколения на основе ионов алюминия и магния / В. В. Чернушкин, С. Н. Мохненко, Е. А. Никитина, В. Д. Овсянников // Сборник тезисов докладов конференции и школы молодых ученых по фундаментальной атомной спектроскопии ФАС-XX 23—27 сентября 2013 г. — Воронеж. — С. 210.

36. Чернушкин, В. В. Влияние теплового излучения на оптические характеристики ионов щелочноземельных атомов в стандартах частоты нового поколения / В. В. Чернушкин, Е. А. Никитина, И. Л. Глухов, В. Д. Овсянников // Собрание по прецизионной физике и фундаментальным физическим константам. Пулково, 7—11 октября 2013. — Тезисы докладов. — Санкт-Петербург. — 2013. — С. 49.
37. Glukhov, I. L. Natural Widths and Blackbody-radiation-induced shift and broadening of Rydberg levels in Magnesium ions. / I. L. Glukhov, S. N. Mokhnenko, E. A. Nikitina and V. D. Ovsianikov // 6th Conference on Elementary Processes in Atomic Systems. — CEPAS 2014. Contributed papers. Bratislava — 2014. — P. 179–186.
38. Ovsianikov, V. D. BBR-Induced Shifts and Broadening of States in Atoms and Ions of Alkaline-Earth Elements / V. D. Ovsianikov, V. G. Palchikov, A. A. Kamenski, I. L. Glukhov, S. N. Mokhnenko, E. A. Nikitina, V. V. Chernushkin // IFCS-EFTF Joint Conference of the IEEE International Frequency Control Symposium and European Frequency and Time Forum. Topic 6: Optical Frequency Standards and Applications. Optical clocks session. Monday April 13, 2015. Paper 5353. Abstract Book — P. 119.
39. Rosenband, T. Frequency Ratio of Al⁺ and Hg⁺ Single-Ion Optical Clocks; Metrology at the 17th Decimal Place/ T. Rosenband [et al] // Science — 2008. — Vol. 319. — P. 1808-1812.
40. Ельяшевич, М. А. Атомная и молекулярная спектроскопия / М. А. Ельяшевич. — М.: Эдиториал УРСС, 2001. — 896 с.
41. Собельман, И. И. Введение в теорию атомных спектров / И. И. Собельман. — М: Физматгиз, 1963. - 640 с.
42. Глухов, И.Л. Радиационные переходы в ридберговских атомах, индуцируемые тепловым излучением: дисс. канд. физ.-мат. наук: 01.04.02/ Игорь Леонидович Глухов. — В., 2010 - 107 с.

43. Варшалович, Д. А. Квантовая теория углового момента / Д. А. Варшалович, А. Н. Москалев, В. К. Херсонский. — Л: Наука, 1975. — 439 с.
44. Лобазовский, Л. Н. Теория атома. Квантовая электродинамика электронных оболочек и процессы излучения / Л. Н. Лобазовский. — М.: Наука, Физматлит, 1996. — 304 с.
45. Рапопорт, Л. П. Теория многофотонных процессов в атомах / Л. П. Рапопорт, Б. А. Зон, Н. Л. Манаков. — В — М. : Атомиздат, 1978 — 184 с.
46. Ландау, Л. Д. Теоретическая физика /Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. — М.: Наука, 1989. — Т. 2 - 768 с.
47. Manakov, N.L. Atoms in a laser field / N. L. Manakov, V. D. Ovsiannikov and L. P. Rapoport // Phys. Rep. — 1986. — Vol. 141. — P. 319–433.
48. Farley, J.W. Accurate calculation of dynamic Stark shifts and depopulation rates of Rydberg energy levels induced by blackbody radiation. Hydrogen, helium, and alkali-metal atoms / J. W. Farley, W. H. Wing // Phys. Rev. A. — 1981. — Vol. 23. — P. 2397-2424.
49. Slater, J. C. A Simplification of the Hartree-Fock Method / J. C. Slater // Phys. Rev. A. — 1951. — Vol. 83. — P. 385-390.
50. Safronova, M. S. Blackbody radiation shift, multipole polarizabilities, oscillator strengths, lifetimes, hyperfine constants, and excitation energies in Ca^+ / M. S. Safronova, U. I. Safronova // Phys. Rev. A. — 2011. — Vol. 83. — 012503.
51. Seaton, M. J. Quantum defect theory I. General formulation / M. J. Seaton // Proc. Phys. Soc. — 1966. — Vol. 88. — P. 801.
52. Seaton, M. J. Quantum defect theory II. Illustrative one-channel and two-channel problems / M. J. Seaton // Proc. Phys. Soc. — 1966. — Vol. 88. — P. 815.
53. Fano, U. Quantum defect theory of l uncoupling in H_2 as an example of channel- interaction treatment // Phys. Rev. A. — 1970. — Vol. 2. — P. 353.
54. Кретинин, И. Ю. Динамические поляризуемости атомов в теории кван-

- тового дефекта: дисс. канд. физ.-мат. наук: 01.04.05 / Игорь Юрьевич Кретинин. — В., 2010 - 100 с.
55. Бутырский, А. М.. Электронная поляризуемость молекул в тоерии квантового дефекта / А. М. Бутырский, Б. А. Зон // ЖЭТФ — 2006. — Т. 130. — С. 415.
 56. Djerad, M. T. Atomic parameters for transitions involving Rydberg states of singly ionized alkaline earths / M. T. Djerad // J. Physique II — 1991. — Vol. 1 — P. 1–9.
 57. Бейтмен, Г. Высшие трансцендентные функции / Г. Бейтмен, А. Эрдейи. — М.: Наука, 1965. — Т. 1 - 296 с.
 58. Chernov, V. E. Exact analytic relation between quantum defects and scattering phases with applications to Green's functions in quantum defect theory / V. E. Chernov, N. L. Manakov, A. F. Starace // Eur. Phys. J. D. — 2000. — Vol. 8. — P. 347-359.
 59. Норман, Г. Э. Обоснование метода квантового дефекта/ Г. Э. Норман // Опт. и спектр. — 1963. — Т. 12. — С. 333.
 60. Манаков, Н.Л. Атомные расчеты по теории возмущений с модельным потенциалом / Н. Л. Манаков, В. Д. Овсянников, Л. П. Рапопорт // Оптика и спектроскопия. — 1975. — Т. 38, вып. 2. — С. 206-211.
 61. Чернов, В. Е. Высоковозбуждённые электронные состояния в малоатомных системах с несферической симметрией : дисс. д-ра физ.-мат. наук: 01.04.05 / Владислав Евгеньевич Чернов. — В., 2015 — 463 с.
 62. Herring C. A New Method for Calculating Wave Functions in Crystals / C. Herring // Phys. Rev. - 1940.- Vol. 57. — P. 1169-1177.
 63. Phillips J.C. New Method for Calculating Wave Functions in Crystals and Molecules / J. C. Phillips, L. Kleinman // Phys. Rev. - 1959. - Vol. 116. — P. 297.
 64. Abarenkov I. V. The model potential for positive ions / I. V. Abarenkov, V. Heine // Phyl. Mag. — 1965. — Vol. 12. — P. 529.

65. Magri R. Pseudopotential for band structure calculations / R. Magri // CNR-Nano-S³. Contributed papers. Modena, Italy - 2012.
66. Овсянников, В. Д. Эффекты высших порядков в процессах взаимодействия атомов с электромагнитными полями: дисс. канд. физ.-мат. наук: 01.04.05/ В. Д. Овсянников; Вор. гос. ун-т - ВГУ, 1976 - 127 с.
67. Simons, G. New model potential for pseudopotential calculations // J. Chem. Phys. — 1971. — Vol. 55. — P. 756-761.
68. Simons G. New procedure for generating valence and Rydberg orbitals. I. Atomic oscillator strengths / G. Simons // J. Chem. Phys. — 1974. — Vol. 60. — P. 645.
69. Новосибирский государственный университет, Мультимедиа центр. Информационная система «Электронная структура атомов» <http://asd.nsu.ru>.
70. Ralchenko Yu, Kramida A. E. and Reader J. NIST ASD Team 2008 NIST Atomic Spectra Database (version 3.1.5) (Gaithersburg, MD: National Institute of Standards and Technology) available at <http://physics.nist.gov/asd3>
71. Barrett, M. D. Sympathetic cooling of $^9\text{Be}^+$ and $^{24}\text{Mg}^+$ for quantum logic / M. D. Barrett [et. all] // Phys. Rev. A. — 2003. — Vol. 68. — 059904.
72. Rosenband, T. Observation of the $^1S_0 \rightarrow ^3P_0$ Clock Transition in $^{27}\text{Al}^+$ / T. Rosenband [et. all] // Phys. Rev. Lett. — 2007. — Vol. 98. — 220801.
73. Tang, Li-Yan. Dynamic dipole polarizabilities of the Li atom and the Be^+ ion/ Li-Yan Tang, Zong-Chao Yan, Ting-Yun Shi, J. Mitroy // Phys. Rev. A. — 2010. — Vol. 81. — 042521.
74. Tang, Li-Yan. Calculations of polarizabilities and hyperpolarizabilities for the Be^+ ion / Li-Yan Tang , Jun-Yi Zhang, Zong-Chao Yan, Ting-Yun Shi, James F. Babb, J. Mitroy // Phys. Rev. A. — 2009. — Vol. 80. — 042511.
75. Safronova, U. I. Relativistic many-body calculation of energies, lifetimes, polarizabilities, and hyperpolarizabilities in Li-like Be^+ / U. I. Safronova,

- M.S. Safronova // Phys. Rev. A. — 2013. — Vol. 87 — 032502.
76. Theodosiou, C. E. Lifetimes of the singly excited Be II and Be III states with $n < 11$ / C. E. Theodosiou // Phys. Scr. — 1992. — Vol. 45. — P. 450-453.
77. Chou, C. W. Frequency Comparison of Two High-Accuracy Al⁺ Optical Clocks / C. W. Chou [et al] // Phys. Rev. Lett. — 2010.— Vol. 104. — 070802.
78. Celik, C. et al. Transition probabilities, oscillator strengths and lifetimes for singly ionized magnesium / C. Celik [et al] // JQSRT — 2011. — Vol. 112. — P. 2330-2334.
79. Fischer, C. Froese. Relativistic energy levels, lifetimes, and transition probabilities for the sodium-like to argon-like sequences / C. Froese Fischer, G. Tachiev, A. Irimia // At. Data Nucl. Data Tables. — 2006.— Vol. 92.— P. 607–812.
80. Mitroy J. Polarizabilities of the Mg⁺ and Si³⁺ ions / J. Mitroy, M. S. Safronova // Phys. Rev. A. — 2009.— Vol. 79. — 012513.
81. Rykova, O.V. Lifetimes of Rydberg states for ions of the group 2 elements / O. V. Rykova and Ya. F. Verolainen // Opt. and Spectr.— 1994. — Vol. 76, Iss. 1 — P. 23.
82. Barton, P. A. Measurement of the lifetime of the $3d^2D_{5/2}$ state in ⁴⁰Ca⁺ /P. A. Barton [et al] // Phys. Rev. - 2000. - Vol. 62. — 032503.
83. Safronova, U. I. Excitation energies, E1, M1, and E2 transition rates and lifetimes in Ca⁺, Sr⁺, Ba⁺, and Hg⁺. / U. I. Safronova, M. S. Safronova // Can. J. Phys. - 2011. - Vol. 89 - P. 465-472.
84. Theodosiou, C.E. Determination of dipole polarizabilities for Mg⁺ and Ca⁺ ions from precision lifetime measurement and transition-moment cancellations / C. E. Theodosiou, L. J. Curtis, C. A. Nicolaides// Phys. Rev. A. — 1995. — Vol. 52. — P. 3677-3680.
85. Safronova, M. S. Blackbody radiation shift, multipole polarizabilities, oscillator strengths, lifetimes, hyperfine constants, and excitation energies

- in Ca+ // U. I. Safronova, M. S. Safronova // Phys. Rev. A. — 2011. — Vol. 83. — 012503.
86. Theodosiou C. E. Accurate calculation of the 4p lifetimes of Ca⁺. / C. E. Theodosiou // Phys. Rev. A - 1980. - Vol. 39. — P. 4880.
87. Dub'e, P. High-resolution spectroscopy of the ⁸⁸Sr⁺ single ion optical frequency standard / P. Dub'e, A. A. Madej, J. E. Bernard, A. D. Shiner // Proc. of SPIE. — 2007. — Vol. 6673. — 667305.
88. Guet, C. Relativistic many-body calculations of transition rates for Ca⁺, Sr⁺, and Ba⁺ / C. Guet, W. R. Johnson // Phys. Rev. A. — 1991. — Vol. 44, № 3. — P. 1531-1535.
89. Biemont, E. Lifetimes of metastable states in Sr II / E. Biemont, J. Lidberg, S. Mannervik, L. O. Norlin, P. Royen, A. Schmitt, W. Shi, X. Tordoir // Eur. Phys. J. D. — 2000. — Vol 11, № 3. — P. 355-365.
90. Regemorter, H. V. Analytical quantum and semiclassical methods for autoionisation of high-1 states and for ion collisional excitation / H. V. Regemorter // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. — 1990. — Vol. 23. — P. 1797-1813.
91. Glukhov, I. L. Blackbody-induced decay, excitation and ionization rates for Rydberg states in hydrogen and helium atoms / I. L. Glukhov, E. A. Nekipelov, V. D. Ovsianikov // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. — 2010. — Vol. 43. — P. 125002.
92. Delone, N. B. Quasiclassical dipole matrix elements for atomic continuum states / N. B. Delone, S. P. Goreslavsky, V. P. Krainov // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. — 1989. — Vol. 22, № 18 — P. 2941.
93. Delone, N. B. Dipole matrix elements in the quasi-classical approximation / N. B. Delone, S. P. Goreslavsky, V. P. Krainov // J. Phys. B. — 1994. — Vol. 27. — P. 4403-4419.
94. Ovsianikov, V. D. Ionization cross sections and contributions of continuum to optical characteristics of Rydberg states / V. D. Ovsianikov,

- I. L. Glukhov, E. A. Nekipelov // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. — 2012. — Vol. 45. — 095003.
95. Ovsianikov, V. D. Rates of blackbody radiation-induced transitions from Rydberg states of alkali atoms / V. D. Ovsianikov, I. L. Glukhov, E. A. Nekipelov // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. — 2011. — Vol. 44. — 195010.
96. Gallagher, T. F. Interactions of blackbody radiation with atoms / T. F. Gallagher, W. E. Cooke // Amer. Phys. Society — 1979. — Vol. 42, № 5. — P. 835-839.