

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

На правах рукописи

Мохненко Сергей Николаевич

**Межатомные и радиационные эффекты на
ультрахолодных атомах**

01.04.02 – Теоретическая физика

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Научный руководитель

д. ф.-м. н., проф.

Овсянников Виталий Дмитриевич

Оглавление

Введение	4
Глава 1. Дисперсионное взаимодействие атомов в ридберговских состояниях	9
1.1. Общие формулы	13
1.2. Теория возмущений первого порядка для асимптотического взаимодействия ридберговских атомов	15
1.3. Двухатомная функция Грина и высшие порядки теории возмущений	17
1.4. Ионизация при Ван-дер-Ваальсовом взаимодействии ридберговских атомов	22
1.5. Разложение тензора C_6 на неприводимые части	24
1.6. Численные расчеты неприводимых компонент тензора C_6 для атомов рубидия в ридберговских состояниях	26
1.7. Асимптотическое представление C_6 для высоковозбужденных состояний	31
1.8. Выводы	40
Глава 2. Резонансные эффекты в дисперсионном взаимодействии ридберговских атомов	41
2.1. Теория возмущений для резонансного асимптотического взаимодействия	43
2.2. Резонансное взаимодействие атомов рубидия в ридберговских состояниях	49
2.3. Выводы	59
Глава 3. Вероятности радиационных переходов из ридберговских состояний атомов	60

3.1. Асимптотики дискретно-дискретных переходов из циркулярных состояний	62
3.2. Сечение пороговой ионизации ридберговского атома из циркулярных состояний	63
3.3. Сечение надпороговой ионизации ридберговского атома из циркулярных состояний	66
3.4. Выводы	68
Глава 4. Эффекты высших порядков во взаимодействии нормальных и метастабильных атомов с полем оптической решетки .	70
4.1. Оптические решетки с магической длиной волны	70
4.2. Нелинейные, недипольные и ангармонические эффекты во взаимодействии атома с полем оптической решетки	74
4.3. Операционная магическая длина волны	80
4.4. Влияние эффектов высших порядков на неопределенности стандартов частоты на атомах магния	83
4.5. Выводы	85
Заключение	87
Список литературы	89

Введение

Актуальность работы.

Разработанные в последние два десятилетия методы лазерного охлаждения атомов до сверхнизких температур заложили основу новейшего направления в теоретической и экспериментальной физике атомов и молекул, направленного на прецизионные исследования фундаментальных характеристик атомных частиц. Начавшееся более сорока лет назад изучение ридберговских состояний атомов приобрело новые возможности для получения и контроля сильно возбужденных атомных частиц. Возможность локализации частиц в оптических решетках позволила существенно повысить точность измерений спектральных свойств изолированных атомов и создать на их основе ультрапрецизионные стандарты частоты и времени.

В настоящее время ансамбли ультрахолодных ридберговских атомов рассматриваются как наиболее перспективные кандидаты на создание устройств для обработки квантовой информации [1–12]. Поэтому важной теоретической задачей является описание взаимодействия между сильно возбужденными атомами. В частности, такое описание необходимо для реализации квантовой логической операции CNOT, которая основана на явлении дипольной блокады процесса возбуждения заданных состояний ридберговских атомов, связанная со сдвигом ридберговского уровня относительно резонанса с возбуждающим лазером. В первой и второй главах настоящей диссертации разработаны методы и представлены результаты количественных расчетов наиболее важных характеристик межатомного взаимодействия атомов в сильно возбужденных ридберговских состояниях.

Поскольку ридберговские атомы очень чувствительны к внешним полям, другой важной задачей является изучение их взаимодействия со сверхслабыми полями, например с остаточными полями лабораторной аппаратуры, а также с полем теплового излучения. Такое взаимодействие приводит к сдвигам и уши-

рениям ридберговских уровней вклад в которые вносят, в частности, индуцированные излучением абсолютно черного тела процессы вынужденного радиационного распада, возбуждения и ионизации, а также процессы спонтанного распада. Знание количественных характеристик термоиндуцированных сдвигов и уширений требуется для прецизионного измерения и контроля тепловых эффектов в атомных спектрах (ридберговский термометр [13]), необходимых для повышения точности стандартов частоты и времени на нейтральных атомах в оптических решетках. В третьей главе исследованы радиационные свойства ридберговских атомов в циркулярных состояниях с максимальными значениями орбитального и магнитного квантовых чисел. Получены аналитические выражения для амплитуд дипольных переходов в состояния дискретного и непрерывного спектров, необходимые, в частности, для определения сдвига и уширения ридберговских уровней излучением черного тела.

В настоящее время наилучшие результаты по созданию оптических стандартов частоты и времени на холодных атомах и ионах были достигнуты с относительной погрешностью измерений на уровне $10^{-17} - 10^{-18}$ [14–27]. Однако дальнейшее увеличение точности оптических стандартов наталкивается на ряд фундаментальных ограничений, связанных, в частности с влиянием излучения абсолютно черного тела. С другой стороны, достижение погрешности воспроизведения единиц измерения времени и частоты на уровне $10^{-17} - 10^{-18}$ требует оценки влияния эффектов высших порядков во взаимодействии атомов с полем оптической решетки на сдвиг частоты часового перехода. В четвертой главе исследованы свойства и определены стратегии создания и операционного управления стандартом частоты на атомах магния в оптической решетке.

Целью диссертации является теоретическое исследование ван-дер-ваальсовского взаимодействия щелочных атомов в ридберговских состояниях, исследованию радиационных свойств ридберговских атомов в циркулярных состояниях и систематическому учету неопределенностей, индуцируемых нелинейно-оптическими, мультипольными и ангармоническими эффектами в стандартах

частоты на нейтральных атомах магния в оптических решетках. Для достижения поставленной цели сформулированы следующие задачи:

- Расчет энергии ван-дер-ваальсова взаимодействия для щелочных атомов в ридберговских состояниях.
- Определение условий проявления ферстеровских резонансов в энергии межатомного взаимодействия.
- Исследование радиационных свойств циркулярных ридберговских состояний атомов.
- Оценка влияния нелинейных и недипольных эффектов взаимодействия атомов магния с полем оптической решетки на неопределенность частоты часового перехода.

Научная новизна. В диссертационной работе и публикациях по теме диссертации впервые представлены расчеты энергии ван-дер-ваальсова взаимодействия щелочных атомов в ридберговских состояниях для произвольных значений главных квантовых чисел и произвольных ориентаций оси квантования относительно межатомной оси. Для неприводимых компонент тензора Ван-дер-Ваальса получены асимптотические зависимости от главного квантового числа и предложены полиномиальные формулы для их упрощенных оценок. Определены области межатомных расстояний, на которых будет проявляться резонанс Ферстера. Аналитически получены асимптотики для сечений фотоионизации атомов из циркулярных ридберговских состояний. Получены количественные характеристики влияния нелинейных и недипольных эффектов взаимодействия атомов магния с полем оптической решетки на неопределенность частоты часового перехода.

Практическая значимость. Результаты диссертации могут быть использованы для проектирования и разработки квантовых логических элементов. Оценки эффектов высших порядков во взаимодействии атомов с излучением

оптической решетки, будут востребованы для разработки стандартов частоты и времени нового поколения. Результаты диссертации целесообразно использовать в научно-исследовательских организациях и центрах, занимающихся изучением сильно охлажденных атомов, в том числе атомов в ридберговских состояниях и в оптических решетках: Институт лазерной физики СО РАН, Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН, Физический институт им. П.Н.Лебедева РАН, Всероссийский научно-исследовательский институт физико-технических и радиотехнических измерений, Санкт-Петербургский государственный университет, Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ». Работа была выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках Госзадания № 3.1761.2017/4.6.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Разложение на неприводимые тензорные компоненты постоянной Ван-дер-Ваальса для атомов щелочных металлов в ридберговских состояниях с малыми орбитальными моментами и произвольными главными квантовыми числами. Асимптотические полиномиальные аппроксимации для компонент тензора Ван-дер-Ваальса ридберговских S-, P-, D- и F-состояний атомов рубидия.
2. Определение областей межатомных расстояний для ферстеровского резонансного дисперсионного взаимодействия ридберговских атомов, на которых зависимость от расстояния вида $1/R^6$ превращается в зависимость вида $1/R^3$.
3. Аналитические выражения для сечения ионизации циркулярных ридберговских состояний с произвольными главными квантовыми числами.
4. Количественные характеристики неопределенности частоты оптического стандарта на атомах магния, индуцируемой нелинейными, недипольными и ангармоническими эффектами взаимодействия с полем оптической

решетки.

Апробация работы. Основные результаты диссертации докладывались на следующих конференциях:

- ICONO/LAT 2013 conference, Moscow, Russia, 18-22 June, 2013.
- XX Конференция по фундаментальной атомной спектроскопии (ФАС-XX), Воронеж, 23–27 сентября 2013.
- CEPAS 2014 6th Conference on Elementary Processes in Atomic Systems, Bratislava, Slovakia, 9-12 July 2014.
- IFCS-EFTF Joint Conference of the IEEE International Frequency Control Symposium and European Frequency and Time Forum, Denver, USA, 12-16 April, 2015.
- XXV Съезд по спектроскопии, Троицк, Москва, 3-7 октября 2016.
- Физика ультрахолодных атомов, Новосибирск, 19-21 декабря 2016.

Публикации. Материалы диссертации опубликованы в 14 печатных работах [28–41], из них 6 статей в рецензируемых журналах [28–33] и 8 тезисов докладов конференций [34–41].

Личный вклад автора. Практически все результаты расчетов, представленные в диссертации, получены лично автором. Подготовка к публикации полученных результатов проводилась совместно с соавторами, причем вклад автора был существенным. Содержание диссертации отражает личный вклад автора в опубликованные работы.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения и библиографии. Общий объем диссертации 100 страниц, из них 80 страниц текста, включая 12 рисунков и 2 таблицы. Библиография включает 88 наименований на 12 страницах. Атомные единицы $e = m = \hbar = 1$ используются в диссертации, если не указано иное.

Глава 1

Дисперсионное взаимодействие атомов в ридберговских состояниях

При отсутствии внешних полей, энергия взаимодействия между двумя нейтральными атомами A и B , находящимися на расстоянии R , которое значительно превышает полную линейную размерность взаимодействующих атомов $R_{LR} = 2(\langle r_A^2 \rangle^{1/2} + \langle r_B^2 \rangle^{1/2})$ (радиус Леруа [42]), подчиняется закону Ван-дер-Ваальса:

$$\Delta E_{vdW} = -\frac{C_6}{R^6}$$

где постоянный коэффициент C_6 может быть определен по теории возмущений второго порядка для диполь-дипольного взаимодействия атомов. Если можно пренебречь спиновыми эффектами, то постоянная Ван-дер-Ваальса $C_6(nS)$ для пары водородоподобных атомов в nS -состояниях является скалярным числом, зависящим от энергий и матричных элементов дипольных переходов между S - и P -состояниями (см. например [43]):

$$C_6(nS) = 6 \sum_{n_1, n_2} \frac{|\langle n_1 P | d_z | nS \rangle|^2 |\langle n_2 P | d_z | nS \rangle|^2}{E_{n_1 P} + E_{n_2 P} - 2E_{nS}}. \quad (1.1)$$

где суммирование производится по полному набору двухатомных состояний $|n_1 P\rangle |n_2 P\rangle$, включая интегрирование по состояниям континуума $|\varepsilon_1 P\rangle |\varepsilon_2 P\rangle$ обоих атомов с положительными энергиями $\varepsilon_1 > 0$, $\varepsilon_2 > 0$.

Распределение энергий P -состояний $E_{n_{1(2)} P}$, как выше, так и ниже энергии nS -состояния делает расчет двукратной суммы в (1.1) довольно сложным. Слагаемые с ближайшими к n значениями n_1 и n_2 могут иметь наибольшие величины, но различные знаки. Сумма таких слагаемых в (1.1) может оказаться на один или несколько порядков меньше по абсолютной величине каждого из них, что может привести к сокращению значащих цифр и уменьшению точно-

сти результата численного расчета.

Для состояний с ненулевым угловым моментом постоянная C_6 является тензорной величиной [44], зависящей от магнитных квантовых чисел, и, следовательно, от ориентации оси квантования и межатомной оси, определяемых единичными векторами \mathbf{a} и \mathbf{n} соответственно (см. Рисунок 1.1). В атомах тяжелых щелочных металлов Rb и Cs тензорные свойства C_6 могут возникать и в $n^2S_{1/2}$ состояниях из-за значительного расщепления тонкой структуры между $n_{1(2)}^2P_J$ состояниями с полными моментами $J = 1/2$ и $J = 3/2$, которые должны появиться в правой части уравнения (1.1) и определяют двухосевую (двухвекторную) компоненту R_{aa} тензора C_6 .

Экспериментальные исследования зависимости межатомного взаимодействия от ориентации межатомной оси были выполнены в [45] для атомов Rb в состояниях $32D$ с использованием постоянного электрического поля, обеспечивающего резонансный обмен энергией с состояниями противоположной четности $34(33)P$ и $n = 30(31)$ из набора вырожденных водородоподобных состояний с орбитальными моментами l от 5 до $n - 1$.

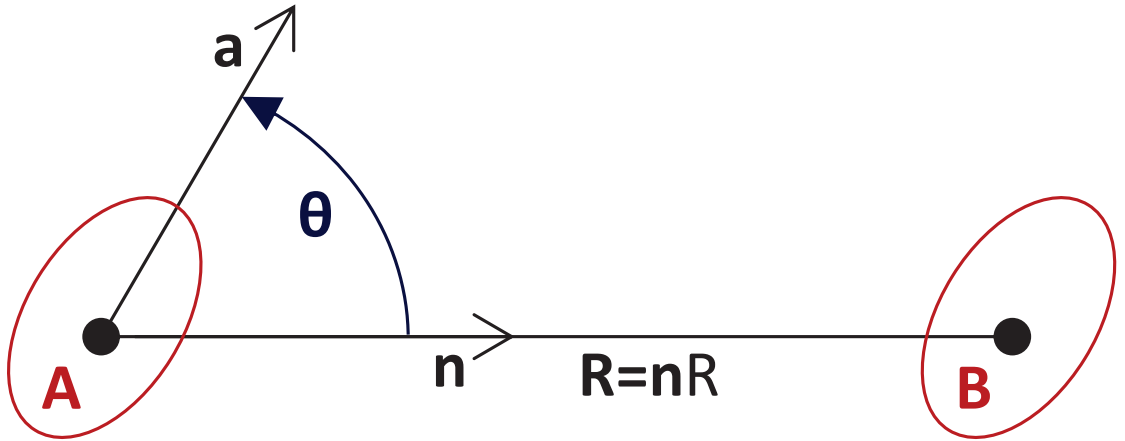


Рис. 1.1. Межатомное взаимодействие атомов A и B , находящихся в одинаковых ридберговских состояниях, разделенных радиус-вектором $\mathbf{R} = \mathbf{n}R$. Единичный вектор \mathbf{n} направлен из A в B под углом θ к единичному вектору \mathbf{a} оси квантования для полного момента $\mathbf{J}_{A(B)}$.

Основным объектом Глав 1-2 данной диссертации является взаимодействие Ван-дер-Ваальса между двумя ридберговскими атомами в одинаковых состо-

яниях. Это взаимодействие может сдвигать ридберговские уровни, нарушая условие резонанса с лазерным возбуждающим излучением, тем самым запрещая одновременное возбуждение соседних атомов [46]. Этот эффект, называемый в литературе "дипольная блокада", может быть полезен для квантовой обработки информации (см., например [2] и ссылки в ней). Сдвиг ридберговского состояния $|nlJM\rangle$ в основном определяется константой C_6 , которая для сильно возбужденных состояний (обычно для $n > 20$) пропорциональна n^{11} . Главный вклад в C_6 дают состояния в правой части уравнения (1.1) с ближайшими к n значениями главных квантовых чисел n_1, n_2 , которым соответствуют наименьшие разности энергии $\delta = E_{n_1} + E_{n_2} - 2E_n$ в знаменателях и наибольшие значения матричных элементов дипольных переходов в числителях. В этом случае так называемого "резонанса Ферстера" взаимодействие между атомами может трансформироваться из обычного закона Ван-дер-Ваальса $-C_6/R^6$ в диполь-дипольное взаимодействие вида C_3/R^3 , которое проявляется, несмотря на явное отсутствие постоянных электродипольных моментов в атомах. Эта ситуация весьма похожа на резонанс для межатомной восприимчивости атомов в основных состояниях, которая зависит от частоты: постоянная C_6 также может усиливаться лазерным излучением с частотой, соответствующей двухатомному резонансу на состояниях с противоположной четностью [47], по аналогии с эффектом резонанса Ферстеровского типа между ридберговскими состояниями противоположной четности $|npr\rangle - |nsn'f\rangle$ вызываемое диполь-квадрупольным взаимодействием для ультрахолодных атомов цезия [48].

Состояния с большими орбитальными моментами $l > 4$ в многоэлектронных атомах являются аналогичными вырожденным состояниям атома водорода. Эти состояния могут быть представлены как суперпозиции состояний с моментами от $l = 5$ до $l = n - 1$. Следовательно, атомы в этих состояниях обладают постоянными электрическими дипольными, квадрупольными, октупольными и более высокими (вплоть до 2^{2n-2} -польными) электромультипольными моментами с отрицательными и положительными четностями [49]. Таким обра-

зом, поправки первого порядка к энергии, содержащие диагональные матричные элементы, которые включают в себя диполь-дипольное взаимодействие, обеспечивающее наиболее важный вклад в сдвиги уровней энергии, будут обратно пропорциональны кубу расстояния R : $\Delta E_{d-d} = C_3/R^3$. Очевидно, что матричный элемент первого порядка также включает диполь-квадрупольный, $\Delta E_{d-q} + \Delta E_{q-d} = C_4/R^4$, диполь-октупольный, квадруполь-квадрупольный, $\Delta E_{d-o} + \Delta E_{o-d} + \Delta E_{q-q} = C_5/R^5$, и другие высшие-мультипольные члены дисперсионного взаимодействия [50]. Однако, так как увеличение мультипольности сопровождается соответствующим увеличением степени $1/R$, учет указанных членов для $R > R_{LR}$ может привести лишь малые поправки. Постоянные C_3 определяются произведениями электродипольных моментов ридберговских состояний (каждый из которых пропорционален квадрату главного квантового числа) и зависят от ориентации векторов дипольного момента относительно межатомной оси. Для состояний $|nlJM\rangle$ с орбитальными моментами $l < 5$ в многоэлектронных атомах постоянные электрические дипольные моменты и все 2^q -польные моменты с нечетным q равны нулю. Энергия взаимодействия первого порядка не обращается в нуль в состояниях $nP_{3/2}$ и в состояниях с орбитальными моментами $l > 1$. Наименьший порядок в члене $1/R$ соответствует взаимодействию электрических квадрупольных моментов: $\Delta E^{(1)} = C_5/R^5$, где тензорная постоянная C_5 зависит от магнитных квантовых чисел M и от относительной ориентации оси квантования и межатомной оси. Для атомов в одинаковых ридберговских состояниях C_5 пропорциональна n^8 .

Зависимость от n постоянной Ван-дер-Ваальса C_6 , определяющей энергию второго порядка ΔE_{vdW} , существенно сильнее, тем самым обеспечивая основной вклад в межатомное взаимодействие, что позволяет например, чрезвычайно точно контролировать эффект дипольной блокады и, наконец, обеспечивать высокоэффективные логические операции с использованием ридберговских атомов. Поэтому в данной главе рассматриваются аналитические свойства энергии Ван-дер-Ваальса $\Delta E_{vdW} \propto n^{11}/R^6$ определяющие асимптотическое (как по n

так и по R) взаимодействие атомов в одинаковых ридберговских состояниях с малыми орбитальными моментами $l \leq 3$.

1.1. Общие формулы

Оператор электростатического взаимодействия между двумя нейтральными атомами A и B может быть представлен в виде асимптотических рядов взаимодействия между двумя 2^L -польными электрическими моментами.

$$\hat{\mathbf{Q}}_{L\mu}^{A(B)} = - \sum_{i=1}^{Z_{A(B)}} r_i^L \mathbf{C}_{L\mu}(\mathbf{n}_i), \quad (1.2)$$

которые учитывают вклад каждого из Z_A (Z_B) электронов определяемых их радиус-векторами $\mathbf{r}_i = r_i \mathbf{n}_i$ относительно атомных ядер (\mathbf{n}_i - единичный вектор, который направлен из ядра в i -й электрон атома) [44]

$$\hat{V}_{AB}(\mathbf{R}) = \sum_{L_A=1}^{\infty} \sum_{L_B=1}^{\infty} \hat{V}_{L_A L_B}(\mathbf{R}). \quad (1.3)$$

Отдельное слагаемое этой суммы является оператором асимптотического взаимодействия электрических $2^{L_A-2^{L_B}}$ -польных моментов:

$$\hat{V}_{L_A L_B}(\mathbf{R}) = \frac{(-1)^{L_B}}{R^{L+1}} \sqrt{\frac{(2L)!}{(2L_A)!(2L_B)!}} \times \left(\mathbf{C}_L(\mathbf{n}) \cdot \left\{ \hat{\mathbf{Q}}_{L_A}^A \otimes \hat{\mathbf{Q}}_{L_B}^B \right\}_L \right) \quad (1.4)$$

где: $L = L_A + L_B$, $\mathbf{C}_{L\mu}(\mathbf{n}_i) = \sqrt{4\pi/(2L+1)} \mathbf{Y}_{L\mu}(\mathbf{n}_i)$ - модифицированная сферическая функция. Для обозначения скалярных и неприводимых тензорных произведений используются обычные обозначения квантовой теории угловых моментов [51].

Первое слагаемое $\hat{V}_{11}(\mathbf{R})$ в двукратной сумме (1.3) описывает взаимодействие между виртуальными электрическими дипольными моментами атомов и определяет в первом порядке теории возмущений диполь-дипольное взаимодействие атомов в вырожденных двухатомных состояниях [45, 52] и взаимодействие Ван-дер-Ваальса во втором порядке для атомов в невырожденных двухатомных

состояниях [53]. Модифицированная сферическая функция $\mathbf{C}_L(\mathbf{n})$ определяет зависимость $2^{L_A} - 2^{L_B}$ -польного взаимодействия от угловых переменных единичного вектора $\mathbf{n} = \mathbf{R}/R$ который направлен из атома A в атом B . Таким образом, энергия взаимодействия между двумя атомами зависит от величины и ориентации вектора межатомного расстояния \mathbf{R} . Зависимость от ориентации окончательно преобразуется в зависимость от угла $\theta = \cos^{-1}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{a})$ между вектором \mathbf{n} и единичным вектором \mathbf{a} , направленным вдоль оси квантования для полных моментов атомов $\mathbf{J}_{A(B)}$ (см. Рисунок 1.1).

Представление оператора взаимодействия в виде (1.4) является наиболее удобным, поскольку переменные "внешнего" вектора \mathbf{R} , собранные в тензор $\mathbf{C}_L(\mathbf{n})/R^{L+1}$, отделены от "внутренних" переменных взаимодействующих атомов, формирующих тензор $\left\{ \hat{\mathbf{Q}}_{L_A}^A \otimes \hat{\mathbf{Q}}_{L_B}^B \right\}_L$. Компоненты тензоров (1.2) появляются явно в матричных элементах оператора $\hat{V}_{L_A L_B}(\mathbf{R})$, согласно правилам отбора для угловых моментов.

Полезно отметить, что оператор диполь-дипольного взаимодействия обычно представляется в терминах электродипольных операторов $\hat{\mathbf{Q}}_1^{A(B)} \equiv \hat{\mathbf{d}}^{A(B)}$, следующим образом

$$\begin{aligned} \hat{V}_{11}(\mathbf{R}) &= -\frac{\sqrt{6}}{R^3} \left(\mathbf{C}_2(\mathbf{n}) \cdot \left\{ \hat{\mathbf{d}}^A \otimes \hat{\mathbf{d}}^B \right\}_2 \right) \\ &= \frac{(\hat{\mathbf{d}}^A \cdot \hat{\mathbf{d}}^B) - 3(\hat{\mathbf{d}}^A \cdot \mathbf{n})(\hat{\mathbf{d}}^B \cdot \mathbf{n})}{R^3}. \end{aligned} \quad (1.5)$$

Первое выражение в (1.5) представляется более удобным для аналитических вычислений и для явного анализа \mathbf{R} -зависимости межатомного взаимодействия атомов в ридберговских состояниях. В частности, определение зависимости от ориентации вектора $\mathbf{R} = R\mathbf{n}$, связанного с фиксированной внешней осью, распределено по многим компонентам скалярных произведений во втором выражении, которые требуют трудоемких вычислений различных дипольных матричных элементов уже в первом порядке теории возмущений [45, 53–55]. По сравнению с этим, \mathbf{n} -зависимость собрана в одном множителе $\mathbf{C}_2(\mathbf{n})$ первого выражения, которое может быть использовано напрямую не только в первом,

но и во втором и более высоких порядках теории возмущений.

В первом порядке теории возмущений диполь-дипольное взаимодействие может давать вклад в сдвиг уровней энергии в атомах A и B , но только в двух случаях:

1. если состояния взаимодействующих атомов представляют собой суперпозицию дипольно-связанных состояний противоположной чётности,
2. если *одинаковые* атомы A и B находятся в разных, но дипольно связанных состояниях [43].

Для одинаковых атомов в одинаковых состояниях определенной чётности вклад диполь-дипольного взаимодействия (и всех нечетных взаимодействий, диполь-дипольных, октуполь-октупольных и т.д.) в первом порядке теории возмущений для $\hat{V}_{AB}(\mathbf{R})$ равен нулю. Поэтому энергию взаимодействия атомов в состояниях с ненулевыми угловыми моментами в первом порядке определяют четные электромультипольные моменты. Кроме того, высшие мультипольные взаимодействия (квадруполь-квадрупольное, и т.д.) следует учитывать для того, чтобы контролировать применимость диполь-дипольного приближения в высших порядках теории возмущений.

1.2. Теория возмущений первого порядка для асимптотического взаимодействия ридберговских атомов

Состояние двух одинаковых бесконечно удаленных друг от друга атомов в их $|nlJM\rangle$ ридберговских состояниях является многократно вырожденным с кратностью вырождения равной $(2J + 1)^2$. Очевидно, что оператор взаимодействия (1.3) не является диагональным в двухатомной системе собственных функций с различными магнитными квантовыми числами M . Тем не менее, для

определения индуцированного взаимодействием сдвига энергии ридберговского уровня, определяющего эффективность блокады возбуждения конкретного ридберговского состояния в двух атомах одновременно, может быть использована теория возмущений для невырожденных состояний.

Если волновая функция $\langle \mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B | AB \rangle$ (в обозначениях Дирака) определяет состояние изолированной системы двух невзаимодействующих атомов А и В ($\langle \mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B | AB \rangle = \langle \mathbf{r}_A | A \rangle \langle \mathbf{r}_B | B \rangle$) в их стационарных состояниях $\langle \mathbf{r}_{A(B)} | A(B) \rangle$ с главными квантовыми числами $n_{A(B)}$, ненулевыми орбитальными моментами $l_{A(B)} \geq 1$, и магнитными квантовыми числами $m_{A(B)}$ ($|A(B)\rangle = |n_{A(B)} l_{A(B)} m_{A(B)}\rangle$), тогда сдвиг энергии первого порядка

$$\Delta E_{AB}^{(1)} = \langle AB | \hat{V}_{AB}(\mathbf{R}) | AB \rangle$$

теории возмущений для взаимодействия (1.3) дает сумму вкладов от четных мультипольных моментов $Q_{2L} = C_{l_0 2L 0}^{l_0} \langle nl | r^{2L} | nl \rangle$ вида

$$\Delta E_{AB}^{(1)}(\mathbf{R}) = \sum_{L_A=1}^{l_A} \sum_{L_B=1}^{l_B} C_{l_A m_A 2L_A 0}^{l_A m_A} C_{l_B m_B 2L_B 0}^{l_B m_B} \frac{(2L)! Q_{2L_A}^A Q_{2L_B}^B}{(2L_A)! (2L_B)! R^{2L+1}} P_{2L}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{a}). \quad (1.6)$$

Здесь $L = L_A + L_B$, как и в формуле (1.4), и используются стандартные обозначения для коэффициентов Клебша-Гордана $C_{\alpha\beta}^{c\gamma}$, полинома Лежандра $P_{2L}(\cos \theta) = \mathbf{C}_{2L 0}(\theta, \varphi)$ [51] и матричных элементов $Q_{2L_{A(B)}}^{A(B)}$. Очевидно, что главный вклад в энергию взаимодействия первого порядка (1.6) дает слагаемое наименьшего порядка по степеням $1/R$ определяемого электрическим квадрупольными моментами $Q_2^{A(B)}$. Следующий член, описываемый взаимодействием моментов $Q_2^{A(B)}$ и $Q_4^{B(A)}$, имеет порядок n^4/R^2 относительно квадруполь-квадрупольного члена. Это отношение эквивалентное отношению среднеквадратичного радиуса орбиты ридберговского электрона $\langle nl | r^2 | nl \rangle \propto n^4$ к квадрату расстояния R между атомами, должно быть достаточно мало для обеспечения применимости дальнего действующего приближения (1.3), (1.4) для взаимодействия между атомами в области $R > R_{LR} \approx 5n^2$, где главный вклад в энергию первого порядка (1.6) дает слагаемое $2L_A = 2L_B = 2$, зависящее от расстояния как

R^{-5} . Число слагаемых в правой части (1.6) равно $N_{AB} = l_A l_B$, поэтому энергия первого порядка (1.6) равна нулю ($N_{AB} = 0$), если хотя бы один из атомов находится в nS -состоянии ($l_{A(B)} = 0$). Когда оба атома находятся в nP -состояниях, $N_{AB} = 1$, поэтому в правой части (1.6) остается только квадруполь-квадрупольное слагаемое. Оценка для (1.6) в этом случае может быть записана как $\Delta E_{AB}^{(1)} \propto n^8/R^5$. Для $n = 100$ дальнедействующее приближение применимо при $R > 5 \times 10^4$ а.е. ≈ 2.6 мкм. На этом расстоянии, $\Delta E_{AB}^{(1)} < 1$ ГГц. При этом сдвиг (1.6) будет равен нулю в узлах полинома $P_4(\mathbf{n} \cdot \mathbf{a})$ при углах между векторами \mathbf{n} и \mathbf{a} , равными $\theta = 30.6^\circ, 70.1^\circ, 109.9^\circ$ и 149.4° . Кроме того, $\Delta E_{AB}^{(1)}(\mathbf{R})$ обращается в нуль после усреднения по ориентациям вектора \mathbf{R} или после усреднения по ориентациям полного момента $\mathbf{J}_{A(B)}$ (по магнитным квантовым числам $M_{A(B)}$) атома $A(B)$.

1.3. Двухатомная функция Грина и высшие порядки теории возмущений

В теории возмущений второго порядка сдвиг двухатомной энергии определяется матричным элементом

$$\Delta E_{AB}^{(2)}(\mathbf{R}) = -\langle AB | \hat{V}_{AB}(\mathbf{R}) G'_{AB}(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B; \mathbf{r}'_A, \mathbf{r}'_B) \hat{V}_{AB}(\mathbf{R}) | AB \rangle \quad (1.7)$$

с двумя операторами дисперсионного взаимодействия (1.3) и редуцированной двухатомной функцией Грина которая включает суммы по связанным состояниям и интегралы по состояниям непрерывного спектра для невзаимодействующих атомов [56–58]:

$$G'_{AB}(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B; \mathbf{r}'_A, \mathbf{r}'_B) = \sum'_{n_1, n_2} \frac{\langle \mathbf{r}_A | n_1 \rangle \langle n_1 | \mathbf{r}'_A \rangle \langle \mathbf{r}_B | n_2 \rangle \langle n_2 | \mathbf{r}'_B \rangle}{E_{n_1} + E_{n_2} - E_A - E_B - i \cdot 0}. \quad (1.8)$$

Суммирование выполняется по полному базису собственных векторов

$$|n_i\rangle \equiv |n_i l_i J_i M_i\rangle, \quad (i = 1, 2)$$

гамильтониана невзаимодействующих атомов $\hat{H}_{AB} = \hat{H}_A + \hat{H}_B$, за исключением собственного вектора $\langle \mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B | AB \rangle$, соответствующего собственному значению $E_A + E_B = E_{AB}$, полной энергии бесконечно удаленных друг от друга атомов. Очевидно, что $\Delta E_{AB}^{(2)} \neq 0$, независимо от значений орбитальных моментов $l_{A(B)}$, поскольку функция Грина содержит все состояния и допускает произвольные мультипольные переходы второго порядка между состояниями согласно закону сохранения четности. Поэтому сдвиг второго порядка (1.7) включает в себя бесконечный ряд членов, возникающих из разложения оператора взаимодействия (1.3) по степеням $1/R$:

$$\Delta E_{AB}^{(2)}(\mathbf{R}) = - \sum_{q=0}^{\infty} \frac{C_{6+2q}^{(2)}(\mathbf{n})}{R^{6+2q}}. \quad (1.9)$$

Здесь бесконечная сумма учитывает все виртуальные мультипольные моменты атомов A и B в операторах $\hat{V}_{L_A L_B}(\mathbf{R})$ от $L_{A(B)} = 1$ до бесконечности. Следует иметь в виду, что сумма мультипольных индексов $L_{\Sigma}^{A(B)} = L_{A(B)} + L'_{A(B)}$ должна быть четным числом, если связанные состояния атомов $\langle \mathbf{r}_1 | A \rangle$, $\langle \mathbf{r}_2 | B \rangle$ имеют определенные четности. Поэтому сдвиг $\Delta E_{AB}^{(2)}(\mathbf{R})$ второго порядка теории возмущений разлагается по четным степеням параметра $1/R$. Тензорные компоненты $C_{6+2q}^{(2)}(\mathbf{n})$ включают в себя функции, зависящие от ориентации межатомной оси \mathbf{n} .

Основной вклад в $\Delta E_{AB}^{(2)}(\mathbf{R})$ дает слагаемое низшего порядка по $1/R$, поэтому $\Delta E_{AB}^{(2)}(\mathbf{R}) \approx -C_6^{(2)}(\mathbf{n})/R^6$. Постоянная Ван-дер-Ваальса $C_6^{(2)}(\mathbf{n})$ описывает второй порядок взаимодействия виртуальных электрических дипольных моментов атомов A и B . Следующий член ряда (1.9) $-C_8^{(2)}(\mathbf{n})/R^8$ определяется диполь-квадрупольным взаимодействием, которое для состояний с большими n является величиной порядка n^4/R^2 по сравнению с первым не исчезающим членом. Для коэффициентов выполняется общее соотношение $|C_{6+2(q+q')}^{(2)}/C_{6+2q}^{(2)}| \propto n^{4q'}$, $q' = 0, 1, 2, \dots$. Поэтому отношение $n^2/R < 1$ обеспечивает сходимость ряда (1.9).

Высшие порядки теории возмущений для дисперсионного взаимодействия

атомов в основных состояниях рассматривалась еще в 1980х годах (см. например [47, 57, 59] и ссылки в них). Численные данные были рассчитаны для коэффициентов, определяющих асимптотическое разложение третьего и четвертого порядков для энергии дисперсионного взаимодействия нейтральных атомов водорода и атомов щелочных металлов. Поправки к энергии асимптотического взаимодействия между атомами водорода в основных состояниях вплоть до десятого порядка теории возмущений были рассчитаны в [60]. Специфические свойства ридберговских атомов, в частности, увеличение вкладов от высших мультипольных взаимодействий уже в члене второго порядка $\Delta E_{AB}^{(2)}(\mathbf{R})$ стимулируют анализ высших порядков теории возмущений в асимптотическом взаимодействии (1.3).

Сдвиг энергии третьего порядка включает в себя матричные элементы с тремя операторами (1.3) и две редуцированные функции Грина G'_{AB} [59, 60]:

$$\begin{aligned} \Delta E_{AB}^{(3)}(\mathbf{R}) &= \langle AB | \hat{V}_{AB}(\mathbf{R}) G'_{AB} \hat{V}_{AB}(\mathbf{R}) G'_{AB} \hat{V}_{AB}(\mathbf{R}) | AB \rangle \\ &- \Delta E_{AB}^{(1)}(\mathbf{R}) \langle AB | \hat{V}_{AB}(\mathbf{R}) (G'_{AB})^2 \hat{V}_{AB}(\mathbf{R}) | AB \rangle. \end{aligned} \quad (1.10)$$

Соответствующее асимптотическое разложение для состояний с определенной четностью включает только нечетные степени $1/R$, начиная с $1/R^{11}$, и может быть записано как [59, 60]:

$$\Delta E_{AB}^{(3)}(\mathbf{R}) = \sum_{q=0}^{\infty} \frac{C_{11+2q}^{(3)}(\mathbf{n})}{R^{11+2q}}, \quad (1.11)$$

где коэффициенты $C_{11+2q}^{(3)}(\mathbf{n})$ могут быть разложены по тензорным компонентам зависящим от направления межатомной оси \mathbf{n} .

По аналогии с (1.7) и (1.10), четвертый порядок теории возмущений будет представлять энергию асимптотического взаимодействия $\Delta E_{AB}^{(4)}(\mathbf{R})$ в виде суперпозиции матричных элементов четвертого порядка и произведений энергии первого порядка (1.6) с матричным элементом третьего порядка и энергии второго порядка (1.9) с матричным элементом второго порядка включающим в

себя произведение двух функций Грина (1.8) между двумя операторами (1.3). Каждый член в суперпозиции эффективно содержит четыре оператора $\hat{V}_{AB}(\mathbf{R})$ и три функции Грина [59, 60]. Разложение энергии четвертого порядка может быть записано в виде ряда с четными степенями $1/R$ аналогично (1.9), начиная с $1/R^{12}$. Вообще говоря, энергия асимптотического взаимодействия между нейтральными атомами в их связанных состояниях с определенными орбитальными квантовыми числами может быть представлена в виде бесконечного ряда слагаемых $\Delta E_{AB}^{(N)}(\mathbf{R})$ N -го порядка теории возмущений для оператора (1.3)

$$\Delta E_{AB}(\mathbf{R}) = \sum_{N=1}^{\infty} \Delta E_{AB}^{(N)}(\mathbf{R}). \quad (1.12)$$

В свою очередь каждое слагаемое из этих рядов может быть разложено в степенные ряды по обратному межатомному расстоянию $1/R$:

$$\Delta E_{AB}^{(N)}(\mathbf{R}) = (-1)^{N+1} \sum_{q=q_0}^{\infty} \frac{C_{3N+2q}^{(N)}(\mathbf{n})}{R^{3N+2q}}, \quad (1.13)$$

где q пробегает положительные целые числа, начиная с $q_0 = 0$ для четного N , $q_0 = 1$ для нечетного N .

Таким образом ряды (1.12) в конечном итоге, преобразуются в степенные ряды по $1/R$:

$$\Delta E_{AB}(\mathbf{R}) = \sum_{s=s_0}^{\infty} \frac{C_s^{tot}(\mathbf{n})}{R^s}, \quad (1.14)$$

где коэффициенты $C_s^{tot}(\mathbf{n})$ являются суммами соответствующих коэффициентов $C_s^{(N)}(\mathbf{n})$ разложения (1.13) для различных порядков N теории возмущений:

$$C_s^{tot}(\mathbf{n}) = - \sum_{k=1}^{[s/6]} C_s^{(2k)}(\mathbf{n}), \quad \text{для четных } s = 6, 8, 10 \dots; \quad (1.15)$$

$$C_s^{tot}(\mathbf{n}) = \sum_{k=1}^{[(s+1)/6]} C_s^{(2k-1)}(\mathbf{n}), \quad \text{для нечетных } s = 5, 7, 9 \dots, \quad (1.16)$$

где $[a]$ используется для обозначения целой части положительного числа a .

Энергия первого порядка (1.6) не обращается в нуль только для состояний с ненулевыми орбитальными моментами $l_{A(B)} \geq 1$, и также описывается уравнением (1.13), где бесконечные ряды в правой части в случае $N = 1$ превращаются в сумму конечного числа слагаемых, оборванную при максимальном значении $q_{max} = l_A l_B$. Для $N \geq 2$ ряды (1.13) бесконечны и могут включать в себя члены с равными степенями по $1/R$ в различных порядках N теории возмущений.

Сравнение коэффициентов $C_{3N+2q}^{(N)}/C_{3N}^{(N)} \propto n^{4q}$ в одном и том же порядке N теории возмущений определяет условие сходимости ряда по $1/R$ (1.13) при $n^4/R^2 \ll 1$. В то время как условие сходимости ряда (1.12), определяемое отношением членов порядка $N + 2$ и N , где учтены члены низшего порядка (по R^{-1}), несколько сильнее:

$$\left| \Delta E_{AB}^{(N+2)}(\mathbf{R}) / \Delta E_{AB}^{(N)}(\mathbf{R}) \right| \propto n^{14}/R^6 \ll 1.$$

В то же время, сравнение членов от N -го и $(N+2k)$ -го порядка равных степеней $s = 3N + 2q = 3(N + 2k) + 2q'$ по $1/R$ (где $q' = q - 3k$)

$$\left| C_s^{(N+2k)}(\mathbf{n}) / C_s^{(N)}(\mathbf{n}) \right| \propto n^{2k}, \quad k = 1, 2, \dots, [q/3],$$

демонстрирует пренебрежимо малый вклад членов низшего порядка теории возмущений в константу C_s^{tot} асимптотического разложения (1.14). Эта закономерность вытекает из асимптотической природы оператора взаимодействия (1.3) и наблюдалась уже для атомов водорода в основном состоянии [60], но для довольно далеких членов $s \geq 30$ в рядах (1.14).

Важно обратить внимание на различные знаки в правых частях уравнений (1.15) и (1.16) для сумм четного и нечетного порядка коэффициентов $C_s^{(N)}(\mathbf{n})$, определяющих результирующее разложение (1.14) по степеням $1/R$ для энергии межатомного взаимодействия. Это правило следует из знаков матричных элементов высшего порядка в соответствующих выражениях теории возмущений (сравнить (1.7) и (1.10)). В частности, $C_s^{tot}(\mathbf{n}) = C_s^{(1)}(\mathbf{n})$ для $s = 5, 7, 9$ и $C_s^{tot}(\mathbf{n}) = -C_s^{(2)}(\mathbf{n})$ для $s = 6, 8, 10$. В дальнейшем мы ограничимся рассмот-

рением главным образом поправок второго порядка, описываемых с помощью $C_6^{(2)}$, для которых мы используем обозначение C_6 , опуская верхние индексы.

1.4. Ионизация при Ван-дер-Ваальсовом взаимодействии ридберговских атомов

Очевидно, что суммарной энергии двух атомов всегда достаточно, чтобы отправить ридберговский электрон атома $B(A)$ в континуум, в то время как электрона атома $A(B)$ перейдет в состояние с более низкой энергией $E_{n_{1(2)}} < E_A + E_B$. В этом случае интеграл по непрерывному спектру атома $B(A)$ в функции Грина (1.8) имеет особенность при энергии $\varepsilon_{B(A)} = E_A + E_B - E_{n_{1(2)}} > 0$. Согласно теореме Сохотского, мнимая часть функции Грина задается суммой произведений соответствующих радиальных волновых функций связанных состояний и состояний континуума:

$$\begin{aligned} \text{Im} \{G_{AB}(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B; \mathbf{r}'_A, \mathbf{r}'_B)\} = \\ \pi \sum_{n_1} \langle \mathbf{r}_A | n_1 \rangle \langle n_1 | \mathbf{r}'_A \rangle \langle \mathbf{r}_B | \varepsilon_2 \rangle \langle \varepsilon_2 | \mathbf{r}'_B \rangle + \\ \pi \sum_{n_2} \langle \mathbf{r}_B | n_2 \rangle \langle n_2 | \mathbf{r}'_B \rangle \langle \mathbf{r}_A | \varepsilon_1 \rangle \langle \varepsilon_1 | \mathbf{r}'_A \rangle, \end{aligned} \quad (1.17)$$

где $\varepsilon_{2(1)} = E_A + E_B - E_{n_{1(2)}} > 0$ это энергия состояния из континуума положительной энергии атома $B(A)$.

Таким образом, энергии второго порядка (1.7) взаимодействия между двумя ридберговскими атомами и константы соответствующего разложения (1.13) являются комплексными величинами, мнимые части которых определяют скорость ионизации для одного из атомов сопровождающейся одновременным де-возбуждением другого атома с переходом на более низкие энергетические уровни [61].

Этот эффект аналогичен процессу автоионизации двухэлектронных возбужденных состояний в многоэлектронных атомах, если энергия двухэлектронного

возбуждения превышает одноэлектронный потенциал ионизации. Кроме того, ионизацию ридберговских атомов, индуцированную взаимодействием Ван-дер-Ваальса, можно сравнить с так называемой "ионизацией Пеннинга" атома с низким потенциалом ионизации метастабильным атомом с достаточно высокой энергией возбуждения, рассмотренной в [57] как результат далекодействующего взаимодействия между атомами инертных газов в метастабильных состояниях и щелочных атомов в основных состояниях. Скорость этой ионизации без излучения была оценена как довольно низкая и быстро исчезающая с расстоянием (по крайней мере как R^{-12} , так как дипольный переход первого порядка между метастабильным и основным состояниями строго запрещен).

Мнимые части постоянных множителей C_s разложения (1.14) довольно малы по сравнению с действительными частями $\text{Re}\{C_s\}$. Они появляются уже в теории возмущений второго порядка из мнимой части двухатомной функции Грина (1.17) в интеграле по континууму атома $A(B)$ при энергии $E_{n_1(n_2)} = E_A + E_B - E_{n_2(n_1)} > 0$. Простые оценки показывают, что отношение между мнимой и вещественной частями постоянной C_6 может быть определено как

$$\frac{\text{Im}\{C_6\}}{\text{Re}\{C_6\}} \propto n^{-p}, \quad (1.18)$$

где показатель степени p изменяется от 10 до 3 в области главных квантовых чисел от $n \approx 10$ до $n \geq 1000$, тем самым поддерживая мнимую часть энергии Ван-дер-Ваальса на уровне от 9 до 10 порядков меньше по абсолютной величине, чем действительная часть во всей указанной области состояний. Таким образом, малые значения $\text{Im}\{C_6\}$ позволяют пренебречь уширением ридберговских уровней, вызванным ионизацией, которая в свою очередь индуцирована межатомным взаимодействием. Поэтому мы ограничимся вычислением только вещественных частей постоянных Ван-дер-Ваальса.

Противоположный далекодействующему случай Ридберг-Ридберг автоионизации, был рассмотрен в [62] для системы двух ридберговских атомов, разделенных на расстояниях $R \leq R_{LR}$, где скорость ионизации возрастает почти

экспоненциально с перекрыванием ридберговских орбит.

1.5. Разложение тензора C_6 на неприводимые части

Общее уравнение для постоянной Ван-дер-Ваальса, описывающее взаимодействие двух одинаковых атомов в одних и тех же ридберговских состояниях, скажем $|n_A l_A J_A M_A\rangle = |n_B l_B J_B M_B\rangle \equiv |nlJM\rangle$, можно получить на основе уравнения для постоянной Ван-дер-Ваальса, определяющего межатомное взаимодействие двух произвольных (одинаковых или различных) атомов в их произвольных (также одинаковых или различных) возбужденных состояниях [44]. Таким образом, постоянная Ван-дер-Ваальса для подобных атомов в ридберговских состояниях может быть представлена как функция магнитных квантовых чисел M и угла θ между единичными векторами межатомной оси \mathbf{n} и оси квантования \mathbf{a} (см. Рис 1), следующим образом:

$$C_6(\theta; nlJM) = R_{ss} - \frac{M^2}{12J^2}(3\cos^2\theta - 2)R_{aa} + \frac{3M^2 - J(J+1)}{2J(2J-1)}(3\cos^2\theta - 1)R_{sT} \\ + \frac{3}{2} \left[\frac{3M^2 - J(J+1)}{2J(2J-1)} \right]^2 (9\cos^4\theta - 8\cos^2\theta + 1)R_{TT}. \quad (1.19)$$

Из этого уравнения видно, что выполняется соотношение симметрии $C_6(\theta) = C_6(\pi - \theta)$. Первый член в левой части выражения не зависит от ориентации оси квантования и межатомной оси. При усреднении по ориентациям межатомной оси третий член в правой части исчезает и остается только зависимость от магнитных квантовых чисел:

$$\bar{C}_6 \equiv \int_{\Omega} C_6(\theta) \frac{d\Omega}{4\pi} = R_{ss} + \frac{M^2}{12J^2}R_{aa} \\ + \left[\frac{3M^2 - J(J+1)}{2J(2J-1)} \right]^2 \frac{R_{TT}}{5}. \quad (1.20)$$

Кроме того, предполагая ориентации угловых моментов независимыми (это может произойти в результате возбуждения неполяризованным излучением) и

усредняя по магнитным квантовым числам одного из попарно взаимодействующих атомов, все члены, зависящие от θ , исчезают. Таким образом, среднее значение постоянной Ван-дер-Ваальса, усредненное по магнитным квантовым числам M_A и M_B (что соответствует свободным ориентациям угловых моментов J_a и J_B взаимодействующих атомов), не зависит от угла θ :

$$\langle C_6 \rangle \equiv \frac{1}{(2J+1)^2} \sum_{M_A M_B} C_6(nlJ; M_A M_B) = R_{ss}$$

В данной диссертации рассматриваются только дублетные состояния (спин $S = 1/2$ и полный угловой момент $J = l \pm 1/2$) ридберговских серий щелочноземельных атомов. В этом случае неприводимые части R_{ss} , R_{aa} , R_{sT} , R_{TT} могут быть представлены в виде комбинаций радиальных матричных элементов второго порядка

$$\rho_{l_1, J_1; l_2, J_2} = \langle nlJ | \langle nlJ | r_A r_B g_{l_1, J_1; l_2, J_2} r'_A r'_B | nlJ \rangle | nlJ \rangle, \quad (1.21)$$

с двухатомной функцией Грина $g_{l_1, J_1; l_2, J_2}(r_A, r_B; r'_A r'_B)$. Соответствующие выражения могут быть записаны следующим образом

$$\begin{aligned} R_{ss} = \frac{1}{24J^2(J+1)^2} & \left[(J+1)^2(2J-1)^2 \rho_{l-1, J-1; l-1, J-1} + \rho_{\pm 1, J; \pm 1, J} \right. \\ & + J^2(2J+3)^2 \rho_{\pm 1, J+1; \pm 1, J+1} + 2(J+1)(2J-1) \rho_{l-1, J-1; \pm 1, J} \\ & \left. + 2J(J+1)(2J-1)(2J+3) \rho_{l-1, J-1; \pm 1, J+1} + 2J(2J+3) \rho_{\pm 1, J; \pm 1, J+1} \right], \quad (1.22) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} R_{aa} = \frac{3}{8J^2(J+1)^4} & \left[(J+1)^4(2J-1)^2 \rho_{l-1, J-1; l-1, J-1} + \rho_{\pm 1, J; \pm 1, J} \right. \\ & + J^4(2J+3)^2 \rho_{\pm 1, J+1; \pm 1, J+1} + 2(J+1)^2(2J-1) \rho_{l-1, J-1; l \pm 1, J} \\ & \left. - 2J^2(J+1)^2(2J-1)(2J+3) \rho_{l-1, J-1; \pm 1, J+1} - 2J^2(2J+3) \rho_{\pm 1, J; \pm 1, J+1} \right] \quad (1.23) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} R_{sT} = R_{Ts} = \frac{-(2J-1)}{24J^2(J+1)^3} & \left[(J+1)^3(2J-1) \rho_{l-1, J-1; l-1, J-1} - \rho_{\pm 1, J; \pm 1, J} \right. \\ & + J^3(2J+3) \rho_{\pm 1, J+1; \pm 1, J+1} - (J-2)(J+1) \rho_{l-1, J-1; \pm 1, J} \\ & \left. + J(J+1)(4J^2 + 4J + 3) \rho_{l-1, J-1; \pm 1, J+1} - J(J+3) \rho_{\pm 1, J; \pm 1, J+1} \right], \quad (1.24) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
R_{TT} = & \frac{(2J-1)^2}{24J^2(J+1)^4} \left[(J+1)^4 \rho_{l-1, J-1; l-1, J-1} + \rho_{\pm 1, J; \pm 1, J} \right. \\
& + J^4 \rho_{l+1, J+1; l+1, J+1} - 2(J+1)^2 \rho_{l-1, J-1; \pm 1, J} \\
& \left. - 2J^2 \rho_{\pm 1, J; l+1, J+1} + 2J^2 (J+1)^2 \rho_{l-1, J-1; l+1, J+1} \right]. \quad (1.25)
\end{aligned}$$

Для состояний с $J = |M|$ (орбита находится в плоскости, перпендикулярной оси квантования) множители $\sin^2 \theta$, зависящие от ориентации, появляются в нескольких членах постоянной C_6 и вклад в C_6 радиальных матричных элементов $\rho_{l-1, J-1; l-1, J-1}$ и $\rho_{l-1, J-1; \pm 1, J}$ исчезает при $\theta = 0$. Например

$$C_6 \Big|_{J=|M|=1/2} (\theta = 0) = \frac{2}{81} \left(2\rho_{\pm 1, J; \pm 1, J} + 11\rho_{l+1, J+1; l+1, J+1} + 14\rho_{\pm 1, J; l+1, J+1} \right), \quad (1.26)$$

$$\begin{aligned}
C_6 \Big|_{J=|M|=3/2} (\theta = 0) = & \frac{4}{1875} \left(3\rho_{\pm 1, J; \pm 1, J} + 63\rho_{l+1, J+1; l+1, J+1} \right. \\
& \left. + 125\rho_{l-1, J-1; l+1, J+1} + 34\rho_{\pm 1, J; l+1, J+1} \right), \quad (1.27)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C_6 \Big|_{J=|M|=5/2} (\theta = 0) = & \frac{4}{12005} \left(10\rho_{\pm 1, J; \pm 1, J} + 465\rho_{l+1, J+1; l+1, J+1} \right. \\
& \left. + 162\rho_{\pm 1, J; l+1, J+1} + 2058\rho_{l-1, J-1; l+1, J+1} \right). \quad (1.28)
\end{aligned}$$

1.6. Численные расчеты неприводимых компонент тензора C_6 для атомов рубидия в ридберговских состояниях

Радиальная функция Грина (1.8) в матричных элементах (1.21) может быть представлена как спектральное разложение в гильбертовом пространстве двухатомных состояний с фиксированными орбитальными l_1, l_2 и полными угловыми моментами J_1, J_2 следующим образом

$$g_{l_1, J_1; l_2, J_2}(r_A r_B; r'_A r'_B) = \sum_{n_1, n_2} \frac{\langle r_A | n_1 l_1 J_1 \rangle \langle n_1 l_1 J_1 | r'_A \rangle \langle r_B | n_2 l_2 J_2 \rangle \langle n_2 l_2 J_2 | r'_B \rangle}{E_{n_1 l_1 J_1} + E_{n_2 l_2 J_2} - E_A - E_B - i \cdot 0}, \quad (1.29)$$

где выполняется суммирование по полному набору радиальных собственных функций изолированных атомов A и B . Подстановка выражения (1.29) для

функции Грина превращает правую часть радиального матричного элемента (1.21) в двукратную бесконечную сумму по полному набору состояний, включая континуумы, произведений радиальных амплитуд первого порядка для дипольных переходов в атомах A и B .

Основные вклады в матричный элемент второго порядка дают слагаемые с наиболее близкими к n главными квантовыми числами n_1 и n_2 и в то же время с наименьшими по абсолютным величинам разностями энергий для обоих атомов $\delta_{n_{1(2)}} = E_{n_{1(2)}l_{1(2)}J_{1(2)}} - E_{A(B)}$. Максимальный вклад соответствует сумме энергий δ_1 и δ_2 с противоположными знаками, так что абсолютное значение суммарного энергетического дефекта

$$\delta = \delta_{n_1} + \delta_{n_2} \quad (1.30)$$

по крайней мере на порядок меньше, чем абсолютные значения отдельных величин $\delta_{n_{1(2)}}$.

Вклад остальных членов спектрального разложения (1.29) быстро уменьшается с увеличением абсолютных значений разностей между главными квантовыми числами $n - n_{1(2)}$. Численные расчеты для радиальных матричных элементов показывают довольно быструю сходимость ряда по связанным состояниям. Поэтому учет членов из области $|n_{1(2)} - n| \leq 8$ обеспечивает хорошую точность результатов вычисления матричных элементов (с относительной неопределенностью вклада остаточной бесконечной суммы по дискретному и интеграла по непрерывному спектру ниже 10^{-4} – 10^{-5}).

В рамках модельного потенциала Фьюса (см., например, [56]–[58]) в одноэлектронном приближении можно получить аналитическое представление для радиального матричного элемента в виде

$$\begin{aligned} \langle n l J | r | n' l' J' \rangle &= \frac{\Gamma(b)}{4Z} \left(\frac{2\nu}{\nu + \nu'} \right)^{\lambda'+2} \left(\frac{2\nu'}{\nu + \nu'} \right)^{\lambda+2} \\ &\times \sqrt{\frac{(c)_{n_r} (c')_{n'_r}}{n_r! n'_r! \Gamma(c) \Gamma(c')}} F_2 \left(b; -n_r, -n'_r; c; c'; \frac{2\nu'}{\nu + \nu'}, \frac{2\nu}{\nu + \nu'} \right), \end{aligned} \quad (1.31)$$

где $b = \lambda + \lambda' + 4$, $c = 2\lambda + 2$, $c' = 2\lambda' + 2$; и использованы обычные обозначения

для гамма функции Эйлера Γ и символа Похгаммера $(a)_n = \Gamma(a+n)/\Gamma(a)$ [63]. Здесь n_r представляет радиальное квантовое число, которое нумерует состояния заданных nlJ -серий и связано с эффективным главным квантовым числом $\nu = 1 + n_r + \lambda$, Z -заряд остаточного иона ($Z = 1$ для нейтрального атома).

F_2 - обобщенная гипергеометрическая функция (Функция Аппеля) пяти параметров и двух аргументов, которая может быть представлена в виде суммы произведений гипергеометрических функций Гаусса ${}_2F_1$. Точность вычисления гипергеометрической функции быстро уменьшается с ростом n_r , из-за сильного сокращения значащих цифр в соответствующих суммах знакопеременных слагаемых. Преобразование [63]

$$F_2(\alpha; -n_r, -n'_r; \gamma, \gamma'; x, y) = \sum_{p=0}^{\min(n_r, n'_r)} \frac{(\alpha)_p (-n_r)_p (-n'_r)_p}{p! (\gamma)_p (\gamma')_p} (xy)^p \times {}_2F_1(\alpha + p, p - n_r; \gamma + p; x) {}_2F_1(\alpha + p, p - n'_r; \gamma' + p; y) \quad (1.32)$$

оказывается наиболее полезным для ридберговских состояний, потому что основной вклад обеспечивают последние несколько членов ($p \sim n_r \sim n'_r$), имеющие одинаковые знаки.

Параметры модельного потенциала Фьюса (1.31) определяются из наиболее точных данных для уровней энергии атомов и ионов [64]. Основой для оценки параметров модельного потенциала может служить так называемый квантовый дефект уровня энергии $\mu_{nlJ} = n - \nu_{nlJ}$, который определяет разность между главным n и эффективным главным квантовым числом, определяемым по значению энергии $|nlJ\rangle$ -состояния $\nu_{nlJ} = Z/\sqrt{-2E_{nlJ}}$. Поскольку имеющиеся данные для энергий в каждой серии ограничены конечным числом уровней, квантовый дефект позволяет экстраполировать энергии и, следовательно, параметры волновых функций, вплоть до порога ионизации $n \rightarrow \infty$. Данные для квантовых дефектов из [65] (S- и D-состояния), [66, 67] (P-состояния) и [68] (F-состояния) использовались для определения параметров модельного потенциала для волновых функций ридберговских состояний, а также для вы-

числения двухатомных дефектов частот (1.30). Для экстраполяции квантовых дефектов использовано соотношение

$$\mu_{lJ}(n) = \mu_{lJ}^{(0)} + \frac{\mu_{lJ}^{(2)}}{\left(n - \mu_{lJ}^{(0)}\right)^2}. \quad (1.33)$$

Параметры $\mu_{lJ}^{(0,2)}$ являются постоянными для состояний nlJ -серий с фиксированными орбитальным l и полным J моментами и различными главными квантовыми числами n . В то же время абсолютные значения $\mu_{lJ}^{(0,2)}$ быстро убывают с увеличением орбитального момента l , так что для $l > 4$ можно положить $\mu_{lJ}(n) = 0$.

Состояния с довольно большими абсолютными значениями магнитных квантовых чисел $m_{A(B)}$ и, следовательно, с большими угловыми моментами ($l_{A(B)} \geq |m_{A(B)}| \geq 5$) эквивалентны вырожденным состояниям атома водорода. Эти состояния не имеют определенной четности и поэтому обладают как четными, так и нечетными постоянными электрическими мультипольными моментами, которые также могут давать вклад в сумму (1.14) [49]. Электрические дипольные моменты направлены вдоль оси квантования и могут быть записаны через параболические квантовые числа n_1, n_2 [43] и единичный вектор \mathbf{a} , в виде

$$\mathbf{d} = -\frac{3}{2}n(n_1 - n_2)\mathbf{a}. \quad (1.34)$$

Таким образом, диполь-дипольное взаимодействие (1.5) двух ридберговских атомов в вырожденных водородоподобных состояниях с $n > l \geq 5$, с фиксированными параболическими квантовыми числами $|nn_1n_2\rangle$, определяет действующий энергетический сдвиг, который для $R > R_{LR}$ может быть записан как

$$\Delta E_d = \langle nn_1n_2 | \hat{V}_{11} | nn_1n_2 \rangle = \frac{C_3(nn_1n_2; \theta)}{R^3},$$

где коэффициент

$$C_3(nn_1n_2; \theta) = \frac{9}{4}n^2q^2(1 - 3\cos^2\theta)$$

определяет индуцированные асимптотическим взаимодействием сдвиг и расщепление водородоподобного-вырожденного ридберговского состояния, пропорциональное квадрату произведения главного n и дипольного $q = n_1 - n_2$ квантовых чисел. Зависимость от ориентации пропорциональна полиному Лежандра второго порядка

$$P_2(\cos \theta) = (3 \cos^2 \theta - 1)/2,$$

что типично для взаимодействия двух постоянных электрических дипольных моментов (1.34), параллельных друг другу и направленных под углом θ относительно вектора межатомной оси \mathbf{R} .

Некоторые численные данные для постоянных Ван-дер-Ваальса двухатомных состояний с одинаково возбужденными атомами рубидия в $nD_{5/2M}$ состояниях с $n = 42, 43, 44$ представлены на Рисунке 1.2 как функции от угла ориентации θ для магнитных квантовых чисел $|M| = 1/2$ [График (1)] и $|M| = 5/2$ [График (2)]. Зависимость от θ постоянной C_6 для $|M| = 3/2$ состояний аналогична зависимостям для $|M| = 1/2$ и $5/2$ и ее абсолютные значения являются промежуточными между представленными на графиках (1) и (2). Величины с отрицательными (отталкивающими) значениями C_6 для $43D_{5/2}$ состояний превышают по абсолютному значению C_6 для состояний $42D_{5/2}$ и $44D_{5/2}$ более чем на один порядок. Это свойство обусловлено резонансным поведением спектра двухатомных $(n+2)P$ -, nD - и $(n-2)F$ -состояний: разность между энергией двух атомов в $43D_{5/2}$ состояниях и полной энергией одного атома в $45P_{3/2}$ и другого в $41F_{7/2}$ состоянии $\delta = E_{45P_{3/2}} + E_{41F_{7/2}} - 2E_{43D_{5/2}} \approx -8.75$ МГц примерно на два порядка меньше по величине, чем разность энергий других ближайших дипольно связанных двухатомных состояний. Поэтому взаимодействие атомов рубидия в состояниях $43D_{5/2}$ в определенной области межатомных расстояний $R_{LR} < R < R_F$, где $R_{LR} \approx 0.5 \mu\text{m}$ и $R_F \approx 7 \mu\text{m}$, следует рассматривать на основе теории возмущений для близких состояний. В области расстояний больше "радиуса Ферстера" $R > R_F$ сдвиг, индуцированный взаимодействием, меньше, чем

”резонансная расстройка” δ , и для постоянной Ван-дер-Ваальса $C_6(43D_{5/2M})$, представленной на Рисунке 1.2 кривой b , применима обычная теория возмущений для невырожденных состояний.

Кривые a и c для постоянных Ван-дер-Ваальса соседних состояний $C_6(42D_{5/2M})$ и $C_6(44D_{5/2M})$ построены для сравнения и для того чтобы продемонстрировать подобие θ -зависимостей энергий атомов рубидия в $nD_{5/2M}$ состояниях с различными проекциями полного момента. Отрицательные значения постоянных C_6 при $n = 42, 43$ соответствуют отталкиванию между атомами, в то время как положительные значения $C_6(44D_{5/2M})$ определяют притяжение. Важно отметить, что ван-дер-ваальсово взаимодействие не обращается в нуль в указанных ридберговских состояниях для всех ориентаций полных угловых моментов (определяемых магнитными квантовыми числами M) и для всех ориентаций межатомной оси (определяемых углами θ).

1.7. Асимптотическое представление C_6 для высоковозбужденных состояний

Представление рассчитанных данных для постоянной Ван-дер-Ваальса и его тензорных компонент (1.22)–(1.25) может быть сведено к табличным данным для нескольких констант, определяющих асимптотическую зависимость рассчитанных значений от главного квантового числа ридберговского состояния.

Результаты численных расчетов демонстрируют общие закономерности зависимости C_6 от квантовых чисел ридберговских состояний. Прежде всего мы исходим из зависимости (1.33) квантовых дефектов $\mu_{lJ}(n)$ для различных $n l J$ -серий, используемых для определения энергий и их разностей (1.30) в спектральном разложении функции Грина (1.29). Для ридберговских серий в атомах рубидия дефект энергии (1.30) является монотонно убывающей функцией n . В сериях состояний с орбитальными моментами $l \neq 0$ дефект δ для состояний, дающих наибольший вклад, может стремиться к нулю и менять свой знак между

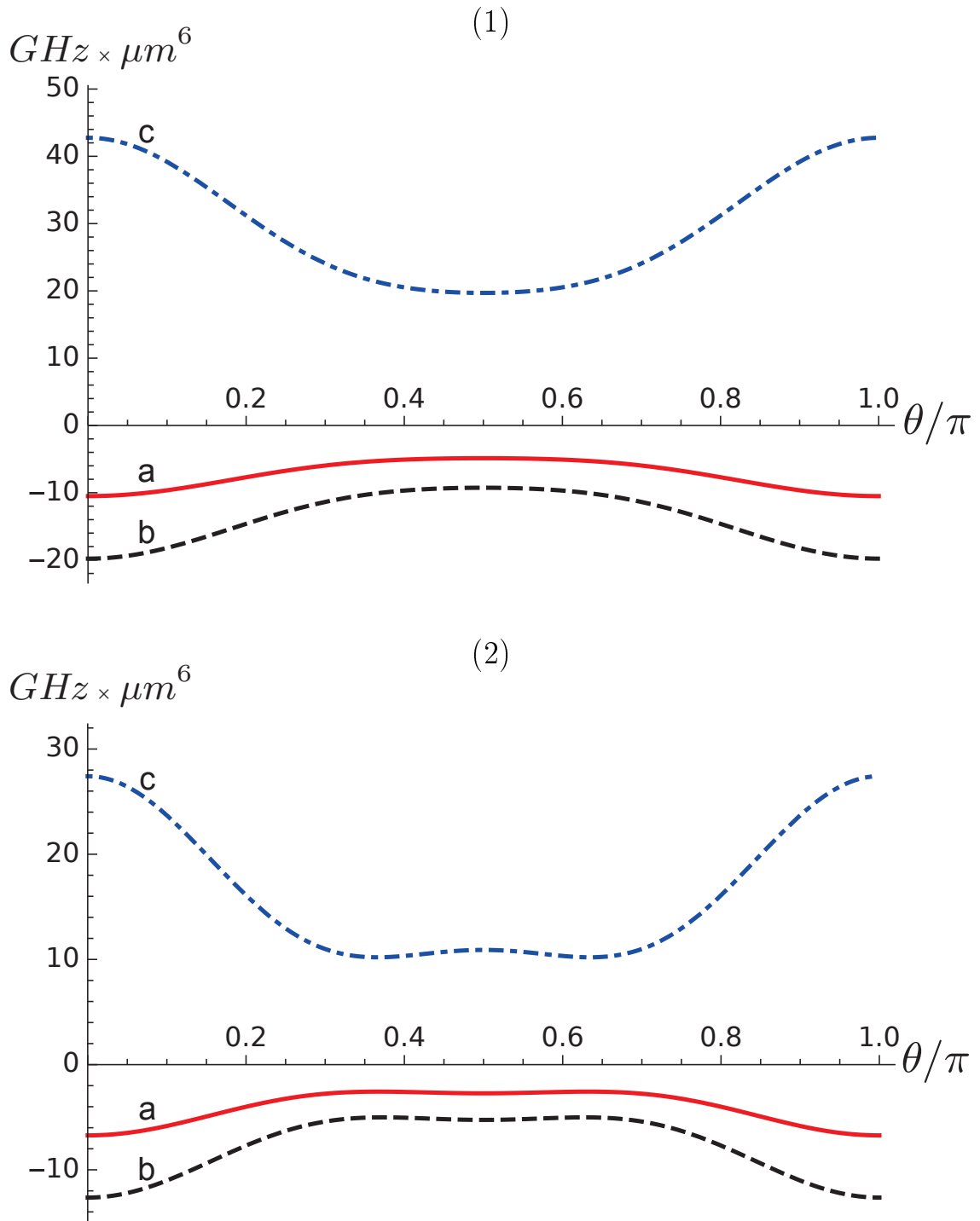


Рис. 1.2. Зависимость коэффициентов Ван-дер-Ваальса $C_6(nD_{5/2M})$ (в единицах ГГц $\times\mu\text{m}^6$) от угла θ между межатомной осью и осью квантования для атомов рубидия в состояниях $nD_{5/2M}$ с магнитными квантовыми числами: $|M| = 1/2$ [график (1)], $|M| = 5/2$ [график (2)]. Кривые а и б соответствуют главным квантовым числам $n = 42$ и $n = 44$. Кривые в дают значения $0.1 \times C_6(43D_{5/2M})$.

”резонансными” состояниями с главными квантовыми числами n_{res} и $n_{res} \pm 1$. Эта ситуация возникает для C_6 компонент P -, D - и F -состояний.

Тем не менее основное поведение постоянной Ван-дер-Ваальса и ее компонент, как функции главного квантового числа пары одинаковых ридберговских состояний, почти одно и то же, и может быть представлено в общей аналитической форме вида:

$$C_6(nlJ) = A(lJ)n^{11} \left(1 + \frac{a^{(1)}(lJ)}{n} + \frac{a^{(2)}(lJ)}{n^2} + \dots \right). \quad (1.35)$$

Однако коэффициенты $A(lJ)$ и $a^{(i)}(lJ)$ в правой части этого уравнения зависят от магнитных квантовых чисел M и от угла θ ориентации межатомной оси. Поэтому удобнее использовать асимптотический ряд вида (1.35) для независящих от M и θ неприводимых компонент (1.22)–(1.25) постоянной Ван-дер-Ваальса (1.19).

Асимптотический ряд в круглых скобках уравнения (1.35) может быть усечен до полинома по обратным степеням главного квантового числа. Численные расчеты показывают, что для $n \geq 30$, полином третьего порядка $\Pi_3(1/n)$ по степеням n^{-1} определяет компоненты постоянной C_6 с погрешностью ниже 1%. Поэтому мы ограничимся асимптотическим уравнением

$$R_{\alpha\beta}(nlJ) = A_{\alpha\beta}(lJ)n^{11}\Pi_3(1/n), \quad (1.36)$$

где в качестве α и β должны подставляться индексы s, a, T для обозначения соответствующих компонент постоянной C_6 (R_{ss}, R_{aa}, R_{sT} и R_{TT}). Полином третьего порядка

$$\Pi_3(x) = 1 + a_{\alpha\beta}^{(1)}(lJ)x + a_{\alpha\beta}^{(2)}(lJ)x^2 + a_{\alpha\beta}^{(3)}(lJ)x^3$$

асимптотически стремиться (при $n \rightarrow \infty$) к единице, $\Pi_3(0) = 1$. Коэффициенты $a_{\alpha\beta}^{(i)}(lJ)$, $i = 1, 2, 3$ могут быть определены из стандартной процедуры полиномиальной аппроксимации численно заданной кривой (см., например, [69, 70]). Таким образом, наиболее важная часть зависимости от главного квантового

числа компонент постоянной C_6 определяется множителем n^{11} с амплитудами $A_{ss}(lJ)$, $A_{aa}(lJ)$, $A_{sT}(lJ)$ и $A_{TT}(lJ)$. Отдельные слагаемые полинома $\Pi_3(1/n)$ учитывают более низкие степени (n^{10} , n^9 , n^8), вклады от которых постепенно исчезают, когда $n \rightarrow \infty$.

В случае ”резонансов”, когда дефект энергии (1.30) состояний дающих наибольший вклад меняет свой знак, асимптотическое уравнение (1.36) можно обобщить следующим образом:

$$R_{\alpha\beta}(nlJ) = \frac{A_{\alpha\beta}(lJ)}{(n - \tilde{n}_{\alpha\beta}^{(1)}(lJ))(n - \tilde{n}_{\alpha\beta}^{(2)}(lJ))} n^{13} \Pi_3(1/n), \quad (1.37)$$

где $\tilde{n}_{\alpha\beta}^{(1,2)}(lJ)$ - эмпирические значения, практически независимые от индексов $\alpha\beta$ между главными квантовыми числами $n_{1(2)} = n_{res}$ и $n_{res} \pm 1$ двух состояний в lJ сериях, для которых энергетические дефекты δ имеют противоположные знаки. Выражение (1.37) записано для двух возможных резонансов, которые появляются, например для $|nD_{3/2}\rangle$ состояний. В случае только одного резонанса достаточно положить $\tilde{n}_{\alpha\beta}^{(2)}(lJ) = 0$. Если резонансы отсутствуют в зависимости δ от главного квантового числа ридберговского состояния n , тогда $\tilde{n}_{\alpha\beta}^{(1)}(lJ) = \tilde{n}_{\alpha\beta}^{(2)}(lJ) = 0$, как это имеет место в случае состояний $|nS_{1/2}\rangle$ - и $|nP_{1/2}\rangle$ -серий рубидия (см. Таблицу 1.1).

Численные значения множителя $A_{\alpha\beta}(lJ)$, резонансные параметры $\tilde{n}_{\alpha\beta}^{(1,2)}(lJ)$ и полиномиальные коэффициенты $a_{\alpha\beta}^{(1,2,3)}(lJ)$ асимптотического представления (1.37) для неприводимых компонент постоянных Ван-дер-Ваальса атомов рубидия в одинаковых ридберговских состояниях $|nlJM\rangle$ представлены в Таблице 1.1.

Существенно отличающиеся от (1.37) асимптотические аппроксимации дисперсионного взаимодействия атомов были представлена в [71], где обсуждались межатомные потенциалы в двухатомных молекулах. В частности, зависимости от главных квантовых чисел n для постоянной Ван-дер-Ваальса вместе с основным членом $c_0 n^{11}$ для ns - ns и np - np асимптотических состояний, включают также члены $c_1 n^{12}$ и $c_2 n^{13}$, которые начинают доминировать уже при

Таблица 1.1. Коэффициенты (в атомных единицах) для аппроксимаций неприводимых компонент постоянной Ван-дер-Ваальса C_6 атомов рубидия в одинаковых ридберговских состояниях $|nlJM\rangle$

$R_{\alpha\beta}(nlJ)$	$A_{\alpha\beta}(lJ)$, а.е.	$\tilde{n}_{\alpha\beta}^{(1)}(lJ)$	$\tilde{n}_{\alpha\beta}^{(2)}(lJ)$	$a_{\alpha\beta}^{(1)}(lJ)$	$a_{\alpha\beta}^{(2)}(lJ)$	$a_{\alpha\beta}^{(3)}(lJ)$
$R_{ss}(nS_{1/2})$	-70.9493	0	0	-58.1774	1483.95	-15315.5
$R_{aa}(nS_{1/2})$	-8.31468	0	0	-86.5096	2941.02	-36108.9
$R_{ss}(nP_{1/2})$	-0.72910	0	0	-192.969	4250.76	-67452.7
$R_{aa}(nP_{1/2})$	27.4073	0	0	-16.4848	75.5419	3929.00
$R_{ss}(nP_{3/2})$	6.49104	38.0528	0	-6.79382	-289.414	3761.25
$R_{aa}(nP_{3/2})$	112.333	38.0528	0	-36.4838	552.365	-3521.18
$R_{sT}(nP_{3/2})$	-8.32662	38.0528	0	-21.0358	130.272	35.0750
$R_{TT}(nP_{3/2})$	10.1141	38.0528	0	-29.3512	360.584	-1924.71
$R_{ss}(nD_{3/2})$	40.3517	39.5728	58.4180	-84.9677	1336.23	17955.6
$R_{aa}(nD_{3/2})$	-206.652	39.5513	58.4180	-85.1857	1366.57	17228.2
$R_{sT}(nD_{3/2})$	-20.0634	39.6145	58.4181	-82.9888	1177.92	21554.6
$R_{TT}(nD_{3/2})$	6.45440	39.5728	58.4180	-82.5907	1146.66	22261.3
$R_{ss}(nD_{5/2})$	32.9534	43.1113	0	-44.2979	307.619	-5245.68
$R_{aa}(nD_{5/2})$	-204.812	43.1139	0	-45.7028	369.796	-5524.51
$R_{sT}(nD_{5/2})$	-21.4608	43.1133	0	-44.6768	322.812	-5277.76
$R_{TT}(nD_{5/2})$	9.57341	43.1209	0	-44.4747	306.531	-5000.21
$R_{ss}(nF_{5/2})$	30.5200	90.8537	0	-90.2408	-43.3648	2488.29
$R_{aa}(nF_{5/2})$	177.092	90.8537	0	-90.3121	-44.2493	2404.11
$R_{sT}(nF_{5/2})$	-10.2820	90.8537	0	-90.2957	-36.3784	2523.22
$R_{TT}(nF_{5/2})$	3.55565	90.8537	0	-90.4571	-20.7632	2561.81
$R_{ss}(nF_{7/2})$	30.4162	90.7199	0	-90.1068	-43.2921	2479.81
$R_{aa}(nF_{7/2})$	195.089	90.7199	0	-90.1811	-43.9872	2396.60
$R_{sT}(nF_{7/2})$	-11.9271	90.7199	0	-90.1622	-36.1657	2514.51
$R_{TT}(nF_{7/2})$	4.79304	90.7199	0	-90.3280	-19.9966	2553.14

$n > 50$ для всех симметрий двухатомных молекул, тем самым давая неправильную зависимость от n для C_6 высоковозбужденных ридберговских атомов с большими значениями n . Для асимптотических состояний np - np молекулярных симметрий $^1\Sigma_g^+$ и $^3\Sigma_u^+$ появляется дополнительный член "резонансного" типа $c_{-1}n^{11}/(n - 29.5)$. Также для состояний nd - nd члены c_1n^{12} включаются с дополнительными "резонансными" членами $c_{-1}n^{11}/(n - 35.14)$. Уравнение (1.37) и данные Таблицы 1.1 показывают, что расположения резонансов, представленные в 2005 году в работе [71], отличаются от представленных в таблице, которые были определены с помощью более современных данных о квантовых дефектах [65], [66]–[68] и уровней энергии [64].

Очевидно, полиномиальные аппроксимации для C_6 в [71] могут работать только в узкой области n между 30 и 90 и становятся неправильными для $n > 100$. Основной целью исследований в [71] были дальнедействующие молекулярные потенциалы. Индивидуальные атомные состояния там не рассматривались. Кроме того, данные для квантовых дефектов еще не были настолько подробными, как в настоящее время. Поэтому полиномиальные аппроксимации в [71] не могли учитывать ни современных данных о резонансах типа Ферстера, ни тонкой структуры ридберговских состояний.

Постоянные Ван-дер-Ваальса (1.19) также могут быть записаны в виде разложения по степеням геометрического множителя $\cos^2(\theta)$, следующим образом

$$C_6(\theta) = B_{nlJM}^{(0)} + B_{nlJM}^{(2)} \cos^2(\theta) + B_{nlJM}^{(4)} \cos^4(\theta), \quad (1.38)$$

где независящие от θ коэффициенты $B_{nlJM}^{(k)}$ ($k = 0, 2, 4$) могут быть представлены как комбинации неприводимых частей R_{ss} , R_{aa} , R_{sT} , и R_{TT} вместе с соот-

ветствующими множителями, зависящими от M . В частности,

$$\begin{aligned} B_{nlJM}^{(0)} &= R_{ss} + \frac{M^2}{6J^2} R_{aa} - U_{JM} R_{sT} + \frac{3}{2} (U_{JM})^2 R_{TT}; \\ B_{nlJM}^{(2)} &= -\frac{M^2}{4J^2} R_{aa} + 3U_{JM} R_{sT} - 12 (U_{JM})^2 R_{TT}; \\ B_{nlJM}^{(4)} &= \frac{27}{2} (U_{JM})^2 R_{TT}, \end{aligned} \quad (1.39)$$

где использовано обозначение

$$U_{JM} = \frac{3M^2 - J(J+1)}{2J(2J-1)}.$$

Наконец, коэффициенты $B_{nlJM}^{(k)}$ могут быть записаны как комбинации двухатомных радиальных матричных элементов (1.21), для которых также справедливо асимптотическое представление вида (1.37).

Численные значения для коэффициентов постоянной C_6 , определенные из уравнений (1.19)–(1.39) и из данных Таблицы 1.1, демонстрируют хорошее согласие с приближением для $|A\rangle = |B\rangle = |nS_{1/2}\rangle$ -состояний представленным в [71] внутри области $30 \leq n \leq 95$. Не представляется возможным сравнить результаты для P - и D -состояний, поскольку данные Таблицы 1.1 учитывают расщепление тонкой структуры и относительную ориентацию оси квантовая и межатомной оси, которые для данных из [71] являются скрытыми в молекулярных симметриях. Кроме того, численные результаты, приведенные в настоящей диссертации, демонстрируют удовлетворительное согласие с данными, приведенными в [53] для зависимости постоянной Ван-дер-Ваальса от ориентации межатомной оси (угол θ) для взаимодействия атомов рубидия в их $60D_{5/2}$ зеемановских состояниях. Некоторые расхождения могут быть вызваны различиями между новейшими данными квантовых дефектов и теми что использовались в работе [53].

Отрицательное асимптотическое значение $B_{nS_{1/2}1/2}^{(0)} = -72.3n^{11}$ указывает на отталкивающее взаимодействие Ван-дер-Ваальса между атомами в nS -состояниях, при любой ориентации межатомной оси, поскольку зависимость

от угла θ определяется асимптотической постоянной $B_{nS_{1/2}^{(2)}}^{(2)} = 2.08n^{11}$. Этот коэффициент существенно уступает абсолютному значению величины $B^{(0)}$, так что отталкивающее взаимодействие сохраняется вплоть до бесконечных главных квантовых чисел $|nS_{1/2}\rangle$ -состояний.

Для состояний $nP_{3/2}$, $nD_{5/2}$ и $nF_{5/2,7/2}$ особенности появляются в окрестностях $\tilde{n}_{\alpha\beta}(P_{3/2}) \approx 38$, $\tilde{n}_{\alpha\beta}(D_{5/2}) \approx 43$ и $\tilde{n}_{\alpha\beta}(F_{5/2,7/2}) \approx 91$, соответственно. Компонента R_{ss} дает основной вклад в постоянную C_6 , как следует из уравнения (1.19). Поскольку значения R_{ss} положительны для всех $|nlJ\rangle$ -серий представленных в Таблице 1.1 для $J \geq 3/2$, ван-дер-ваальсово взаимодействие атомов в состояниях с $n < \tilde{n}$ является отталкивающим ($C_6 < 0$), тогда как для $n > \tilde{n}$ взаимодействие становится притягивающим ($C_6 > 0$). Это свойство представляется довольно общим, но зависимости от магнитного квантового числа и угла θ явно демонстрируемые в правой части уравнения (1.19) могут привести к некоторым отклонениям от этой закономерности. В частности, серия $nP_{3/2}$ -состояний сохраняет эту закономерность только для состояний с магнитными квантовыми числами $M = \pm 1/2$. Состояния с $M = \pm 3/2$ демонстрируют значительное отклонение от указанного свойства для угла $\theta = 0$ (межатомная ось направлена вдоль оси квантования, которая при $|M| = J$ оказывается перпендикулярной к орбите ридберговского электрона). Постоянная C_6 для $\theta = 0$ равна сумме коэффициентов $B_{nP_{3/2}|M|=3/2}^{(0,2,4)}$ уравнения (1.38). Эта сумма на 3-4 порядка меньше положительного коэффициента $B_{nP_{3/2}|M|=3/2}^{(2)}$ который отличается от абсолютного значения суммы двух отрицательных коэффициентов $B_{nP_{3/2}|M|=3/2}^{(0)} + B_{nP_{3/2}|M|=3/2}^{(4)}$ в третьем или четвертом знаке. Этот эффект происходит из-за выпадания радиального матричного элемента $\rho_{l-1, J-1; l-1, J-1}$ из правой части выражения (1.19) при $\theta = 0$. Таким образом, отталкивающее взаимодействие атомов рубидия остается только при малых углах θ для всех $nP_{3/2}M = 3/2$ состояний ($n > 39$). Здесь имеет место следующая закономерность: чем больше n тем больше область "отталкивающих углов" $\theta < \theta_0$. В частности, $\theta_0 \approx 12.6^\circ$, 28.8° и 32.5° для $n = 39$, $n = 100$ и для всех $n > 3000$, соответственно.

Резонансные особенности соответствуют обращению в нуль двухатомной разности энергий. В частности,

$$\delta = E_{nS_{1/2}} + E_{(n+1)S_{1/2}} - 2E_{nP_{3/2}} \approx 0,$$

которая меняет свой отрицательный знак в состояниях $n \leq 38 < \tilde{n}_{\alpha\beta}(P_{3/2}) \approx 38.053$ на положительный для $n \geq 39 > \tilde{n}_{\alpha\beta}(P_{3/2})$, достигая минимума абсолютной величины в состоянии $n = 38$. Согласно выражению (1.27) для $|M| = 3/2$, вклад радиального матричного элемента с этой особенностью отсутствует при $\theta = 0$ вместе с особенностью в зависимости C_6 от главного квантового числа n . Этот эффект подтверждается асимптотическими значениями коэффициентов разложения (1.38), следующих из данных Таблицы 1.1: каждый коэффициент $B_{nP_{3/2}3/2}^{(k)}$ более чем на три порядка превосходит по абсолютной величине сумму $\sum_k B_{nP_{3/2}3/2}^{(k)}$, определяющую значение постоянной $C_6(\theta = 0)$.

”Резонансное” увеличение постоянной $C_6(38P_{3/2M})$ для атомов рубидия может привести к переходу от энергии взаимодействия Ван-дер-Ваальса вида $-C_6/R^6$ к выражению для энергии специфического вида, описываемого функцией $C_3(\theta)/R^3$. Однако эта зависимость от R имеет место только в области межатомных расстояний, ограниченной сверху и снизу до области $R_{min} < R < R_{max}$, где R_{min} и R_{max} зависят от дефекта энергии (1.30) и от матричных элементов дипольных переходов в резонансные состояния. Кроме того, угловая зависимость постоянной $C_3(\theta)$ не подчиняется закону полинома Лежандра $P_2(\cos \theta) = (3 \cos^2 \theta - 1)/2$, характерного для взаимодействия между постоянными диполями, и кроме того зависит от полного углового момента J и магнитного квантового числа M ридберговского состояния $|nlJM\rangle$, что будет показано в следующей главе диссертации.

Для состояний $nD_{3/2}$ резонансные особенности появляются вблизи $n = 39$ и $n = 58$. В обоих случаях имеются доказательства аномальной зависимости постоянной C_6 от главного квантового числа. Однако притягивающая природа взаимодействия Ван-дер-Ваальса для состояний с главными квантовыми чис-

лами $n < \tilde{n}_{\alpha\beta}^{(1)} \approx 39.6$ остается также притягивающей для $n \geq 40$ и становится отталкивающей только для состояний с $n \geq 55$ вплоть до $n = 58$. Для состояния $39D_{3/2}$ с магнитным квантовым числом $M = \pm 3/2$ знак постоянной Ван-дер-Ваальса зависит от угла θ , изменяясь от отталкивания ($C_6 < 0$) в области $0.1\pi < \theta < 0.3\pi$ до притяжения ($C_6 > 0$) в областях $\theta < 0.1\pi$ и $\theta > 0.3\pi$ с максимумом при $\theta = \pi/2$.

Особенность в $nD_{5/2}$ серии состояний появляется для состояния с $n = 43$. Однако знак постоянной $C_6(\theta; nD_{5/2})$ не зависит от θ , оставаясь отрицательным для $n \leq 43$ и положительным для $n \geq 44$ (см. Рисунок 1.2).

1.8. Выводы

В данной главе была изложена теория возмущений для изолированных состояний, которая позволяет описывать асимптотическое взаимодействие между ридберговскими атомами. Проведены численные расчеты для энергии ван-дер-ваальсова взаимодействия щелочных атомов в ридберговских состояниях, результаты расчетов представлены в виде простых аппроксимационных зависимостей от главного квантового числа для неприводимых компонент тензора Ван-дер-Ваальса. Данные аппроксимации справедливы для произвольных главных квантовых чисел и дают возможность получить постоянную C_6 в зависимости от ориентаций оси квантования относительно межатомной оси.

Глава 2

Резонансные эффекты в дисперсионном взаимодействии ридберговских атомов

При больших главных квантовых числах n появляются специфические ”резонансные” эффекты, когда знаменатели одного или нескольких слагаемых в (1.1) достигают почти нулевого значения. В случае n_1 и n_2 близких к n , эти ”резонансные” слагаемые дают основной вклад в двукратную сумму и делают абсолютное значение $C_6(nS)$ настолько большим, что в определенной области межатомных расстояний $R_{LR} < R < R_F$ величина ΔE_{vdW} становится сравнимой и даже превосходит величину разности энергий в знаменателе. В этом случае (известном в литературе как ”резонанс Ферстера” [1, 2, 54, 72]) теория возмущений для изолированных состояний может стать неприменимой. Следовательно в области расстояний меньше R_F (”радиуса Ферстера”) следует использовать теорию возмущений для состояний с близкими энергиями. При этом резонансные состояния необходимо удалить из гильбертова пространства функции Грина (из суммы по n_1, n_2 в (1.1)) и рассматривать их как отдельное подпространство вырожденных состояний, где оператор межатомного взаимодействия должен быть диагонализирован. Редуцированная функция Грина будет появляться в матричных элементах высших порядков [73]. Диагональные матричные элементы второго порядка добавляются к расстройке $\delta = E_{n_1} + E_{n_2} - 2E_n$ двухатомных состояний бесконечно удаленных друг от друга атомов. Такая сумма становится зависящей от расстояния R расстройкой $\Delta(R)$, которая при определенном расстоянии $R = R_0$ может обратиться в нуль, тем самым увеличивая роль недиагонального матричного элемента с зависимостью R^{-3} и, следовательно, усиливая энергию межатомного взаимодействия в указанной выше области расстояний. Таким образом, при $R \approx R_0$ состояния каждого атома могут перемешиваться с состояниями противоположной четности, создавая вырожденное состояние с

большим постоянным электрическим дипольным моментом, аналогичным тому, которое создается под действием электрического и/или магнитного поля [74].

Детальный анализ на основе данных для квантовых дефектов ридберговских состояний Rb обнаруживает указанный тип вырождения для $38P_{3/2}$, $39D_{3/2}$, $43D_{5/2}$ и $58D_{3/2}$ состояний [65] – [53]. Энергия двух атомов в этих состояниях отделена от ближайших дипольно-связанных двухатомных уровней энергетической щелью δ всего лишь в несколько мегагерц, что по крайней мере на два порядка меньше, чем разделение порядка гигагерца от любого другого состояния. Энергия резонансного взаимодействия обычно рассматривается как энергия диполь-дипольного взаимодействия первого порядка с зависимостью от расстояния как R^{-3} [3, 45, 52, 53]. Энергия Ван-дер-Ваальса, оцененная как квадратичная диполь-дипольная энергия деленная на независимую от межатомного расстояния R расстройку δ [53], соответствует учету только одного резонансного слагаемого в бесконечном ряде, представленным в правой части уравнения (1.1). Однако резонансная оценка для значения C_6 справедлива только в том случае, когда вклад нерезонансных слагаемых в бесконечное суммирование в (1.1) не существенен.

В данной главе определяется энергия асимптотического взаимодействия с использованием теории возмущений высших порядков для близких состояний [73]. Преобразование зависимости сдвига энергии, индуцированного взаимодействием, из закона Ван-дер-Ваальса $\Delta E_{\text{vdW}} = -C_6/R^6$ в диполь-дипольный закон $\Delta E_d = C_3/R^3$, можно определить как качественно, так и количественно из общих уравнений учитывающих изменение резонансной расстройки, вызванное взаимодействием атомов. В качестве численного примера ниже рассмотрен случай двухатомных состояний атомов рубидия в состояниях $38P_{3/2}$, которые всего на 4 МГц больше совместной энергии $39S$ - и $38S$ -состояний [1], а также $43D_{5/2}$ -состояния, двухатомная энергия которых больше суммы $45P_{3/2}$ и $41F_{5/2}$ -состояний всего на 6 МГц.

2.1. Теория возмущений для резонансного асимптотического взаимодействия

Если условие теории возмущений $|\Delta E_{\text{vdW}}/\delta| \ll 1$ не выполняется для одного из расщеплений $\delta = E_2 - E_1$ между энергиями $E_1 \equiv E_{\text{AB}} = E_{\text{A}} + E_{\text{B}} = 2E_n$ начального двухатомного состояния $\langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | 1 \rangle = \langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | \text{AB} \rangle = \langle \mathbf{r}_1 | n \rangle \langle \mathbf{r}_2 | n \rangle$ и $E_2 \equiv E_{n_1 n_2} = E_{n_1} + E_{n_2}$ промежуточного состояния $\langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | 2 \rangle = \langle \mathbf{r}_1 | n_1 \rangle \langle \mathbf{r}_2 | n_2 \rangle = \langle \mathbf{r}_2 | n_1 \rangle \langle \mathbf{r}_1 | n_2 \rangle$ в сумме, определяющей двухатомную функцию Грина (1.8), тогда должна применяться теория возмущений для близких состояний. Очевидно, что для одинаковых индивидуальных состояний $|A\rangle = |B\rangle = |nlJM\rangle$ взаимодействующих атомов в двухатомном состоянии $|1\rangle$, в близком к нему состоянии $\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | 2 \rangle = \langle \mathbf{r}_1 | n_1 l_1 J_1 \rangle \langle \mathbf{r}_2 | n_2 l_2 J_2 \rangle$ одноатомные волновые функции $\langle \mathbf{r}_1 | n_1 l_1 J_1 \rangle$ и $\langle \mathbf{r}_2 | n_2 l_2 J_2 \rangle$ будут разными. В состоянии $|2\rangle$, выполняется суммирование по магнитным квантовым числам M_1 и M_2 , как это подразумевается в уравнении для функции Грина (1.8), поэтому проекции орбитальных моментов здесь даже не упоминаются.

Обмен индивидуальными состояниями между атомами соответствует третьему близкому состоянию $\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | 3 \rangle = \langle \mathbf{r}_1 | n_2 l_2 J_2 \rangle \langle \mathbf{r}_2 | n_1 l_1 J_1 \rangle$, равному по энергии состоянию $\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | 2 \rangle$, и также участвующему в полном наборе двухатомных состояний разложения функции Грина (1.8). Следовательно подпространство близких состояний включает в себя по крайней мере три различных двухатомных состояния: $|1\rangle$, $|2\rangle$ и $|3\rangle$, где последние два состояния имеют одинаковые двух-атомные энергии $E_3 = E_2 = E_{n_1} + E_{n_2}$. Состояния $|2\rangle$ и $|3\rangle$ могут быть объединены в пару альтернативных резонансных состояний, $|\pm\rangle = (|2\rangle \pm |3\rangle) / \sqrt{2}$. Однако состояние $|-\rangle$ не взаимодействует с начальным состоянием $|1\rangle$ и не дает вклада в резонансное усиление C_6 ("темное состояние"), поэтому в дальнейшем в качестве базиса близких состояний мы принимаем состояния: $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$.

В этом случае энергия взаимодействия между атомами ΔE может быть определена в произвольных порядках оператора (1.3) из решения уравнения

третьего порядка:

$$\det||W_{ij} + (\varepsilon_i - \Delta E)\delta_{ij}|| = 0, \quad (2.1)$$

которое эквивалентно диагонализации матрицы 3×3 (здесь δ_{ij} - символ Кронекера, для краткости в матричном элементе опущен аргумент \mathbf{R}) [73, 75]:

$$W_{ij} = \left\langle i \left| \hat{V}_{AB}(\mathbf{R}) \left\{ 1 + G'_{\bar{E}} \left[\hat{V}_{AB}(\mathbf{R}) - \Delta E \right] \right\}^{-1} \right| j \right\rangle, \quad (2.2)$$

где: $i, j = 1, 2, 3$ соответствуют близким состояниям, которые исключаются из двухкратного спектрального суммирования в функции Грина (1.8). Сдвиг, индуцированный взаимодействием $\Delta E = E - \bar{E}$, относится к энергии функции Грина, которую можно принять за среднюю энергию близких состояний $\bar{E} = (E_1 + E_2 + E_3)/3$ [73]. Однако, поскольку мы ищем сдвиг $\Delta E = E - E_1$ уровня энергии E_1 , и энергии двух уровней одинаковы, $E_2 = E_3$, удобно положить $\bar{E} = E_1$. Тогда сдвиги $\varepsilon_i = E_i - \bar{E}$ уравнения (2.1) $\varepsilon_1 = 0$ и $\varepsilon_2 = \varepsilon_3 = \delta$ определяют три решения $\Delta E_{1(2,3)} = \varepsilon_{1(2,3)}$ кубического уравнения для бесконечно удаленных друг от друга атомов ($R \rightarrow \infty$, где матричные элементы W_{ij} равны нулю).

Формальное разложение оператора взаимодействия $\hat{V}_{AB}(\mathbf{R})$ в степенной ряд по $1/R$ для матричного элемента (2.2)

$$W_{ij} = \sum_{k=1}^{\infty} W_{ij}^{(k)} \quad (2.3)$$

позволяет получить соответствующие ряды для энергии Ван-дер-Ваальса [60]

$$\Delta E = \sum_{k=1}^{\infty} E^{(k)}. \quad (2.4)$$

Как следует из разложения (1.3), каждое слагаемое из ряда для матричных элементов (2.3) и каждое слагаемое из ряда для энергии (2.4) также могут быть разложены по степеням $1/R$.

Поэтому в первом порядке ($k = 1$) мы имеем сумму конечного числа слагаемых, которые включают только разрешенные мультипольные переходы между

начальными и конечными состояниями атомов A и B , аналогично сдвигу первого порядка (1.6) для изолированного состояния $|AB\rangle$

$$W_{ij}^{(1)} = \langle i | \hat{V}_{AB}(\mathbf{R}) | j \rangle = \sum_{q=q_1}^{L_\Sigma+1} \frac{w_{ij}^{(1)}(q, \mathbf{n})}{R^q}, \quad (2.5)$$

где: $L_\Sigma = l_A(i) + l_A(j) + l_B(i) + l_B(j)$ это сумма всех орбитальных моментов обоих атомов в их начальных $|i\rangle$ и конечных $|j\rangle$ состояния ($i, j = 1, 2, 3$). Начальный индекс q_1 также зависит от орбитальных моментов двухатомных состояний $|i\rangle$ и $|j\rangle$. Если состояния $|i\rangle$ и $|j\rangle$ являются дипольно связанными для обоих атомов ($\Delta l_{A(B)} = |l_{A(B)}(i) - l_{A(B)}(j)| = 1$), тогда суммирование в недиагональном матричном элементе (2.5) начинается с $q_1 = 3$. В противном случае, если состояния являются дипольно связанными только для одного из атомов, а для другого разрешен квадрупольный переход, тогда $q_1 = 4$; если дипольные переходы запрещены, а квадрупольные переходы разрешены для обоих атомов, то сумма для матричного элемента первого порядка (2.5) начинается с квадруполь-квадрупольного слагаемого, как в разложении для энергии первого порядка (1.6), определяемой диагональным элементом $W_{ii}^{(1)}$, где минимальная степень $q_1 = 5$.

Член второго порядка в разложении (2.3) может быть представлен в виде бесконечного ряда

$$W_{ij}^{(2)} = - \langle i | \hat{V}_{AB}(\mathbf{R}) G'_E \hat{V}_{AB}(\mathbf{R}) | j \rangle = \sum_{q=q_2}^{\infty} \frac{w_{ij}^{(2)}(q, \mathbf{n})}{R^q}, \quad (2.6)$$

где сумма для диагональных матричных элементов $W_{ii}^{(2)}$ выполняется по четным степеням $1/R$, начиная с $q_2 = 6$. Четность и начальное значение q_2 степени q для недиагональных матричных элементов $W_{12}^{(2)} = W_{13}^{(2)}$ зависят от соотношения между четностями индивидуальных одноатомных состояний в начальном $|1\rangle$ и конечных $|2\rangle, |3\rangle$ двухатомных состояниях. В случае противоположных четностей только для одного из двух атомов, $q_2 = 7$ и сумма (2.6) включает в себя только нечетные индексы q . В случае противоположных четностей состояний для обоих атомов, сумма начинается с $q_2 = 8$ и включает в себя только

четные степени q . Однако мы ограничимся наиболее интересным случаем дигипольно связанных состояний $|1\rangle$ и $|2\rangle$ ($|3\rangle$), поэтому достаточно учесть только дипольный член превого порядка $W_{12}^{(1)} \propto 1/R^3$.

С учетом матричных элементов низшего порядка (2.5) и (2.6) и тождеств

$$\begin{aligned} W_{12}^{(1)} &= W_{21}^{(1)} = W_{13}^{(1)} = W_{31}^{(1)}, \\ W_{22}^{(2)} &= W_{33}^{(2)}, \quad W_{23}^{(2)} = W_{32}^{(2)}, \end{aligned}$$

решения уравнения (2.1) могут быть представлены в виде:

$$\begin{aligned} \Delta E_{1,2} &\equiv \Delta E_{\pm} = W_{11}^{(2)} + \frac{\Delta(\mathbf{R})}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\Delta(\mathbf{R})}{2}\right)^2 + 2|W_{12}^{(1)}|^2}, \\ \Delta E_3 &= \delta + W_{22}^{(2)} - W_{23}^{(2)} \end{aligned} \quad (2.7)$$

где $\Delta(\mathbf{R}) = \delta - W_{11}^{(2)} + W_{22}^{(2)} + W_{23}^{(2)}$ - дефект энергий резонансных состояний с учетом нерезонансных ван-дер-ваальсовских сдвигов. Решение ΔE_3 соответствует расщеплению полностью вырожденных состояний $|2\rangle$ и $|3\rangle$, причем второе решение $\Delta E_2 = \Delta E_+ = \delta + W_{22}^{(2)} + W_{23}^{(2)}$ будет соответствовать расщеплению состояний $|2\rangle$ и $|3\rangle$ в отсутствие взаимодействия с начальным состоянием $|1\rangle$ (положив $W_{12}^{(1)} \equiv 0$ и предполагая $\Delta(\mathbf{R}) > 0$). Следует отметить, что такое вырождение двухатомных состояний, связанное с перестановкой между атомами А и В индивидуальных одноатомных состояний, всегда должно учитываться при расчете ван-дер-ваальсовского взаимодействия между одинаковыми атомами [43].

Диагональные матричные элементы являются быстро убывающими функциями от межатомного расстояния, как видно из асимптотических зависимостей как в первом порядке $W_{ii}^{(1)} \propto n^8/R^5$ так и во втором порядке $W_{ii}^{(2)} \propto n^{11}/R^6$. Поэтому, на больших расстояниях $R > n^3$ основной вклад в $\Delta(\mathbf{R})$ дает независимая от R разность двухатомных энергий δ . В частности, для $n \approx 50$ состояний и $|\delta| > 100$ МГц, относительная разница между $\Delta(\mathbf{R})$ и δ составит менее 10% при $R > 10$ мк. Недиagonalный матричный элемент $W_{12}^{(1)} \propto n^4/R^3$ также является быстро убывающей функцией расстояния R , поэтому в указанной

области $R > n^3$ имеет место неравенство $|\Delta(\mathbf{R})|^2 \gg 8|W_{12}^{(1)}|^2$ и приближенные решения для (2.1) будут иметь вид (предполагая $\Delta(\mathbf{R}) > 0$)

$$\begin{aligned}\Delta E_1 \equiv \Delta E_- &= W_{11}^{(2)} - \frac{2|W_{12}^{(1)}|^2}{\Delta(\mathbf{R})}, \quad \left(\lim_{R \rightarrow \infty} \Delta E_1 \rightarrow \varepsilon_1 = 0 \right); \\ \Delta E_2 \equiv \Delta E_+ &= \Delta(\mathbf{R}) + W_{11}^{(2)} + \frac{2|W_{12}^{(1)}|^2}{\Delta(\mathbf{R})}, \quad \left(\lim_{R \rightarrow \infty} \Delta E_2 \rightarrow \varepsilon_2 = \delta \right),\end{aligned}$$

которые описывают сдвиги Ван-дер-Ваальса верхнего $|1\rangle$ и одного из нижних ($|2\rangle$ и $|3\rangle$) двухатомных состояний соответственно. Очевидно, что дробь с удвоенным квадратом недиагонального элемента первого порядка $W_{12}^{(1)}$ в числителе заменяет опущенные члены в редуцированной функции Грина.

В противоположном случае $8|W_{12}^{(1)}|^2 \gg |\Delta(R)|^2$, когда расщеплением δ между двумя близкими уровнями можно пренебречь, основной вклад дается вторым слагаемым подкоренного выражения уравнения (2.7). Тогда два решения (2.7) будут:

$$\Delta E_{\pm} \approx \pm \sqrt{2}|W_{12}^{(1)}| \left[1 + \frac{(\Delta(\mathbf{R}))^2}{16|W_{12}^{(1)}|^2} \right] + W_{11}^{(2)} + \frac{\Delta(\mathbf{R})}{2}. \quad (2.8)$$

Этот случай характерен для так называемого "резонанса Ферстера", когда зависимость для энергии Ван-дер-Ваальсова взаимодействия 6-й степени $\Delta E = -C_6/R^6$ может превращаться в зависимость 3-й степени для энергии диполь-дипольного взаимодействия $\Delta E = C_3/R^3$ [1, 72], определяемую недиагональным матричным элементом первого порядка $W_{12}^{(1)}$. На самом деле такой "резонанс" для близких состояний $|1\rangle$, $|2\rangle$ и $|3\rangle$ полностью эквивалентен двухатомному резонансу в электромагнитных восприимчивостях двух асимптотически взаимодействующих атомов во внешнем поле, зависящем от частоты [47]. Однако, и $|W_{12}^{(1)}|$, и $|\Delta(R)|$ являются функциями зависящими от R , поэтому неравенство $8|W_{12}^{(1)}|^2 \gg |\Delta(R)|^2$ нарушается как на малых расстояниях, когда $|W_{12}^{(1)}|/|\Delta(R)|$ стремится к нулю как $\propto R^3$ при $R \rightarrow 0$, так и на больших расстояниях, когда $|W_{12}^{(1)}|/|\Delta(R)|$ стремится к нулю как $\propto R^{-3}$ при $R \rightarrow \infty$ (с учетом только членов низших порядков для (2.3) и (2.5)). Поэтому диапазон расстояний R , где

выполняется соотношение (2.8), ограничен как снизу, так и сверху. Более того, зависимость матричного элемента от ориентации межатомного вектора \mathbf{R} (от угла θ) подчиняется функции близкой к корню квадратному от функции угла θ из уравнения (1.19) для резонансной части $C_6(\theta)$ и может быть представлена следующим образом:

$$W_{12}^{(1)}(R, \theta) = \frac{d^{AB}}{R^3} \mathcal{Z}_{J_1; J_2}^{J, M}(\theta) \quad (2.9)$$

где редуцированный матричный элемент диполь-дипольного взаимодействия $d^{AB} \equiv \langle 1 \| \mathbf{Q}_1^A \mathbf{Q}_1^B \| 2 \rangle$ выделен в отдельный коэффициент и выполнено суммирование по магнитным квантовым числам M_1, M_2 резонансного двухатомного состояния $|2\rangle = |n_1 l_1 J_1 M_1\rangle |n_2 l_2 J_2 M_2\rangle$ при расчете квадрата матричного элемента $W_{12}^{(1)}$ в подкоренном выражении решения (2.8). Поэтому уравнения (2.8) и (2.9) явно свидетельствуют о наличии сдвига Ферстеровского типа для диполь-дипольной энергии

$$\Delta E_{\pm} = \pm \frac{C_3(M, \theta)}{R^3}, \quad (2.10)$$

но только в ограниченной области расстояний. Эта область может быть расширена в случае точного резонанса $\delta = 0$, когда уравнения (2.8), (2.10) и соответствующее условие $8|W_{12}^{(1)}|^2 \gg |\Delta(R)|^2$ справедливы для любых расстояний $R > R_{LR}$ вплоть до $R \rightarrow \infty$. Поэтому для детального изучения пространственной зависимости взаимодействия Ферстера используются различные методы снижения энергетического дефекта во внешних статических или радио-частотных полях [54], [52], [50], [55], [76].

2.2. Резонансное взаимодействие атомов рубидия в ридберговских состояниях

Множитель $C_3(M, \theta)$, зависящий от M и θ , может быть явно выражен из уравнений (2.8) – (2.9):

$$C_3 = \sqrt{2}|d^{AB}| \mathcal{Z}_{J_1; J_2}^{J, M}(\theta), \quad (2.11)$$

где введены обозначения:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_{J_1; J_2}^{J, M}(\theta) = & \left\{ \frac{2}{3(2J+1)^2} + \left[\frac{2M}{(2J)_3} \right]^2 \frac{X_1 X_2}{2} (2 - 3 \cos^2 \theta) \right. \\ & + \frac{[3M^2 - J(J+1)](Y_1 + Y_2)}{3(2J+1)(2J-1)_5} (1 - 3 \cos^2 \theta) \\ & \left. + \left[\frac{3M^2 - J(J+1)}{(2J-1)_5} \right]^2 Y_1 Y_2 (1 - 8 \cos^2 \theta + 9 \cos^4 \theta) \right\}^{1/2}, \quad (2.12) \end{aligned}$$

здесь $X_{1(2)} = J(J+1) + 2 - J_{1(2)}(J_{1(2)} + 1)$ и $Y_{1(2)} = 3X_{1(2)}(X_{1(2)} - 1) - 8J(J+1)$.

В отличие от электростатической энергии двух независимых диполей, сдвиг (2.10) не исчезает ни при усреднении по ориентациям межатомной оси, ни при усреднении по ориентациям орбитальных моментов (по магнитным квантовым числам M). Важно отметить, что суммирование по магнитным квантовым числам состояний $|2\rangle$ и $|3\rangle$ было выполнено при определении квадрата матричного элемента $\left| W_{12}^{(1)}(R, \theta) \right|^2$ в подкоренном выражении (2.7), так как все зеемановские подуровни резонансных состояний $|2\rangle$ и $|3\rangle$ имеют равные энергии и поэтому были введены в подпространство близких состояний $|1\rangle$ и $|2\rangle$.

На Рисунке 2.1, представлены множители (1) $\mathcal{Z}_{7/2; 3/2}^{5/2, M}(\theta)$ и (2) $\mathcal{Z}_{5/2; 3/2}^{5/2, M}(\theta)$ которые определяют угловую зависимость матричного элемента первого порядка (2.9) диполь-дипольного перехода между двухатомными состояниями $|1\rangle = \langle \mathbf{r}_1 | nD_{5/2M} \rangle \langle \mathbf{r}_2 | nD_{5/2M} \rangle$ и $|2\rangle = \langle \mathbf{r}_1 | n_1 F_{7/2, 5/2} \rangle \langle \mathbf{r}_2 | n_2 P_{3/2} \rangle$ для различных квантовых чисел $M = 1/2, 3/2$ и $5/2$. Очевидное различие между угловыми зависимостями для состояний тонкой структуры $J = 5/2$ и $7/2$ резонанса $n_1 F_J$ видно явно из (2.12), а также из Рис. 2.1. Однако при $\theta = 0$ множитель $Z(\theta)$

для $J = 7/2$ превосходит такой же множитель для $J = 5/2$, оставаясь около $0.12 \div 0.14$ и почти равными друг другу при $\theta \neq 0$.

Аналогичное различие имеет место для угловых множителей $Z_{1/2;1/2}^{3/2,M}(\theta)$ ($M = 1/2, 3/2$) и $Z_{5/2;3/2}^{3/2,3/2}(\theta)$, представленных на Рисунке 2.2. Первый из них определяет угловую зависимость матричного элемента первого порядка (2.9) диполь-дипольного перехода из состояния $|1\rangle = \langle \mathbf{r}_1 | nP_{3/2M} \rangle \langle \mathbf{r}_2 | nP_{3/2M} \rangle$ в состояние $|2\rangle = \langle \mathbf{r}_1 | nS_{1/2} \rangle \langle \mathbf{r}_2 | nS_{1/2} \rangle$ при $M = 1/2, 3/2$ (кривые а и б соответственно), второй - из состояния $|1\rangle = \langle \mathbf{r}_1 | nD_{3/2,3/2} \rangle \langle \mathbf{r}_2 | nD_{3/2,3/2} \rangle$ в состояние $|2\rangle = \langle \mathbf{r}_1 | nF_{5/2} \rangle \langle \mathbf{r}_2 | nP_{3/2} \rangle$ (кривая с). Здесь наблюдается очевидная разница в множителях угловых зависимостей как между резонансами на различных двухатомных состояниях, так и между разными значениями проекций орбитального момента M состояния $|1\rangle$. Так например резонанс между состояниями $2 \times (nP_{3/2,3/2}) \rightarrow n_1S_{1/2} + n_2S_{1/2}$ исчезает при углах $\theta = k\pi$, где $k = 0, 1$.

Из данных Таблицы 1.1, можно видеть области двухатомных резонансов, которые локализуются вблизи главных квантовых чисел n порядка \tilde{n} , однако диапазон расстояний R , где недиагональный член подкоренного выражения в уравнении (2.7) существенно превосходит первый член, представляется довольно узкой. Кроме того, угловая зависимость матричного элемента (2.9) не зависит от диполь-дипольного взаимодействия, описываемого полиномом Лежандра $P_2(\cos \theta)$.

2.2.1. Резонанс на состояниях $38P_{3/2}$

Для двух атомов рубидия в одинаковых состояниях $|nP_{3/2} M = 1/2, 3/2\rangle$, наименьший по абсолютной величине Ферстеровский дефект энергий имеет место при $n = 38$:

$$\delta(38P_{3/2}) = E(39S_{1/2}) + E(38S_{1/2}) - 2E(38P_{3/2}) \approx -4.62 \text{ МГц}, \quad (2.13)$$

$\delta(nP_{3/2})$ изменяет свой знак с положительного на отрицательный при переходе из состояния с $n = 38$ в состояние $n = 39$. Численные данные Таблицы 1.1 могут

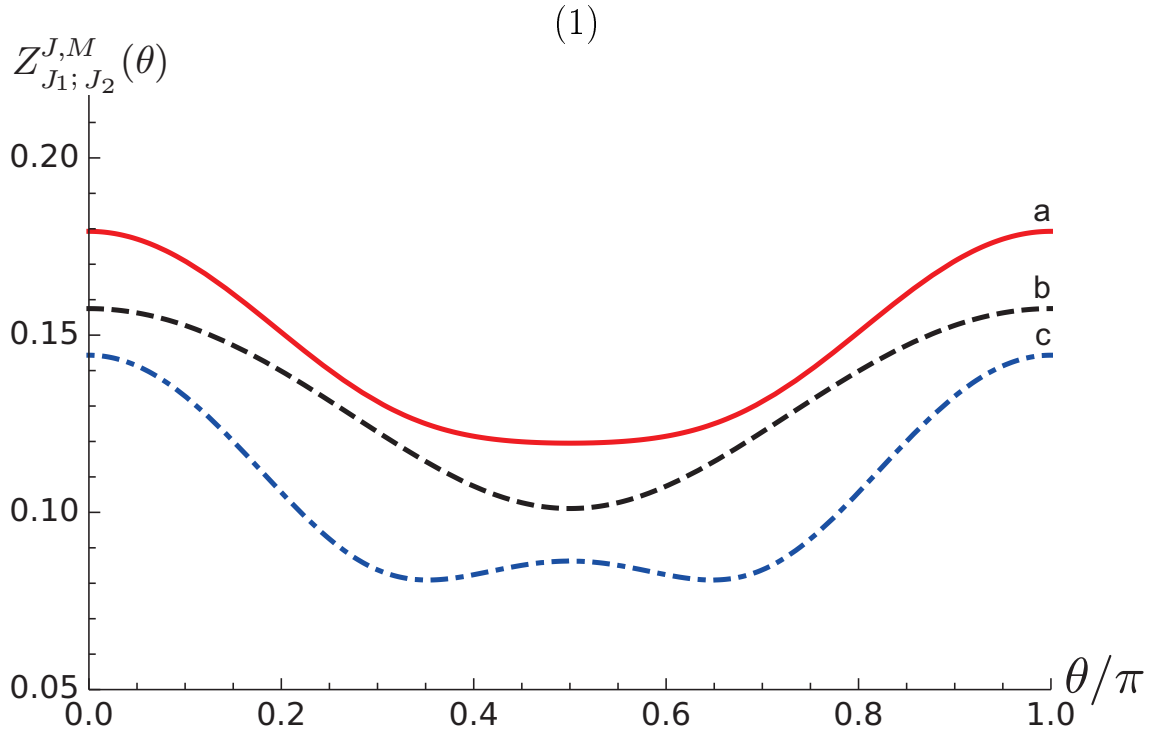


Рис. 2.1. Множитель угловой зависимости $Z_{J_1; J_2}^{5/2, M}(\theta)$ матричного элемента первого порядка (2.9) для диполь-дипольного перехода между близкими двухатомными состояниями:

(1) $2 \times (nD_{5/2, M}) \rightarrow n_1 F_{7/2} + n_2 P_{3/2}$;

(2) $2 \times (nD_{5/2, M}) \rightarrow n_1 F_{5/2} + n_2 P_{3/2}$ состояния:

$M = 1/2$ (a), $M = 3/2$ (b), $M = 5/2$ (c).

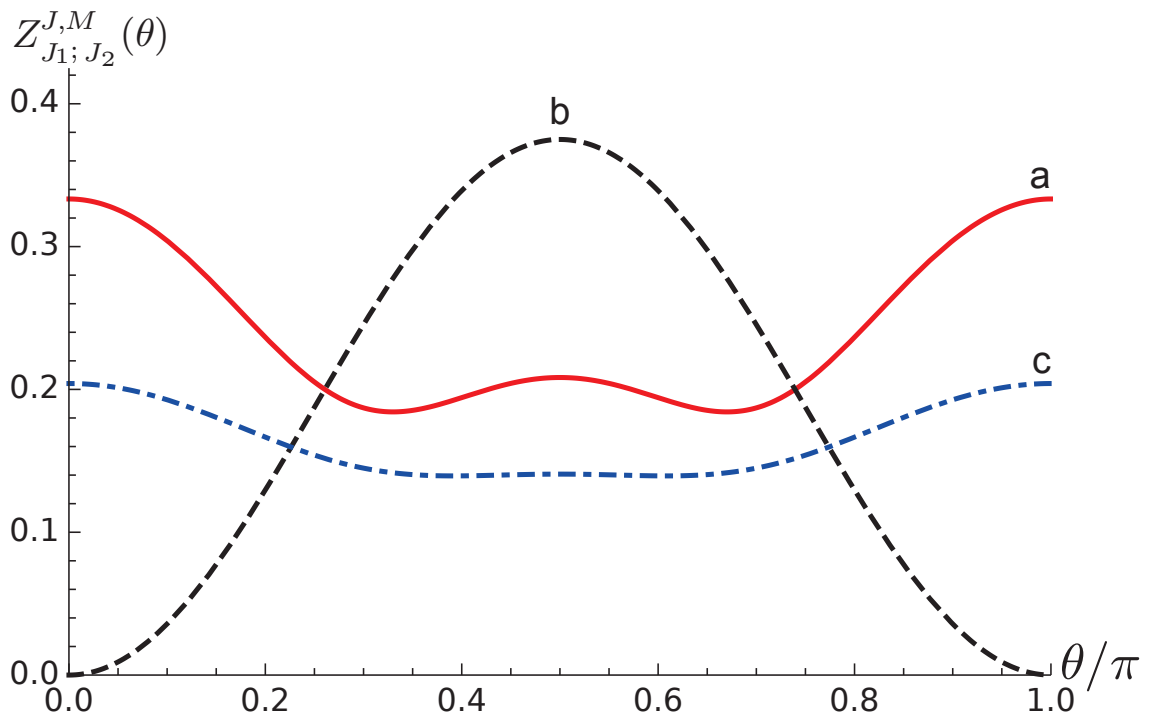


Рис. 2.2. Множитель угловой зависимости $Z_{J_1; J_2}^{J, M}(\theta)$ матричного элемента первого порядка (2.9) для диполь-дипольного перехода между близкими двухатомными состояниями:

$2 \times (nP_{3/2, M}) \rightarrow n_1S_{1/2} + n_2S_{1/2}$, $M = 1/2$ (a), $M = 3/2$ (b);

$2 \times (nD_{3/2, 3/2}) \rightarrow n_1F_{5/2} + n_2P_{3/2}$ (c).

быть использованы для вычисления матричного элемента второго порядка

$$W_{11}^{(2)} = -\frac{\tilde{C}_6(38P_{3/2}M)}{R^6}, \quad (2.14)$$

где $\tilde{C}_6(38P_{3/2}M) = C_6(38P_{3/2}M) - 2(W_{12}^{(1)})^2/\delta$ представляет собой постоянную Ван-дер-Ваальса вычисленную с редуцированной функцией Грина. Диагональный матричный элемент второго порядка, вычисленный методом модельного потенциала Фьюса (в атомных единицах):

$$W_{22}^{(2)} = W_{33}^{(2)} = -\tilde{R}_{ss}/R^6 = 5.144 \times 10^{18}/R^6; \quad (2.15)$$

при этом недиагональный матричный элемент:

$$W_{23}^{(2)} = 4.097 \times 10^{18}/R^6 \quad (2.16)$$

Сумма по зеемановским подуровням исключает вклад R_{aa} компоненты в тензор $\tilde{C}_6 = C_6(38S - 39S) - 2(W_{12}^{(1)})^2/\delta$ для атомов взаимодействующих в состояниях $38S_{1/2}$ и $39S_{1/2}$ оставляя только \tilde{R}_{ss} член. Вычисление радиальных матричных элементов диполь-дипольных переходов дает не зависящий от угла θ и расстояния R коэффициент в недиагональном матричном элементе первого порядка (2.9)

$$d^{AB} = \frac{4}{3} \langle 38P_{3/2} | r_A | 38S_{1/2} \rangle \langle 38P_{3/2} | r_B | 39S_{1/2} \rangle = -2.544 \times 10^6 \text{ (a.e.)} \quad (2.17)$$

и позволяет определить сдвиги (2.7) – (2.8), вызванные дисперсионным взаимодействием атомов. Зависимость от R отношения подкоренных слагаемых $\chi(R, \theta) = 8|W_{12}(R, \theta)/\Delta(R, \theta)|^2$ уравнения (2.7), представленная на Рисунке 2.3, позволяет оценить область межатомных расстояний R , где ван-дер-ваальсовская зависимость для сдвига уровня энергии $\Delta E_{vdW} = -C_6/R^6$ превращается в зависимость диполь-дипольного типа $\Delta E_{d-d} = C_3/R^3$. Как видно из рисунка, в области $1 < R < 5.5$ мкм, абсолютное значение матричного элемента $W_{12}^{(1)}$ перехода между двухатомными состояниями $|1\rangle$ и $|2(3)\rangle$ существенно превосходит по своей величине расстройку двухатомной энергии $\Delta(R)$ (первое

слагаемое подкоренного выражения в уравнении (2.7)), которая обращается в нуль при $R \approx 2.61$ мкм. Это отношение зависит от угла между осью квантования и межатомной осью, достигая своего максимального значения при $\theta = 0$.

В состояниях с магнитным квантовым числом $M = 3/2$ зависимость от угла θ R -области где выполняется неравенство $\chi(R, \theta) \gg 1$ становится еще сильнее так как $W_{12}^{(1)} = (R, \theta = 0) \equiv 0$ и область зависимости вида (2.10) при $\theta = 0$ вообще не существует. Для $\theta = \pi/6$ эта область сводится к интервалу $1.8 < R < 3.7$ мкм; для $\theta = \pi/2$ неравенство $\chi(R, \theta) \gg 1$ выполняется в области $1.2 < R < 5.8$ мкм которая совпадает с областью $\chi(R, \theta = 0) \gg 1$ для состояний с $M = 1/2$.

2.2.2. Резонанс на состояниях $43D_{5/2}$

Еще один интересный случай представляет другой резонанс, где два атома рубидия находятся в одинаковых состояниях $|43D_{5/2} M = 1/2, 3/2, 5/2\rangle$ и, наименьший по абсолютной величине, Ферстеровский дефект энергии равен:

$$\delta(43D_{5/2}) = E(41F_{5/2(7/2)}) + E(45P_{3/2}) - 2E(43D_{5/2}) \approx -6.1(-8.7) \text{ МГц}, \quad (2.18)$$

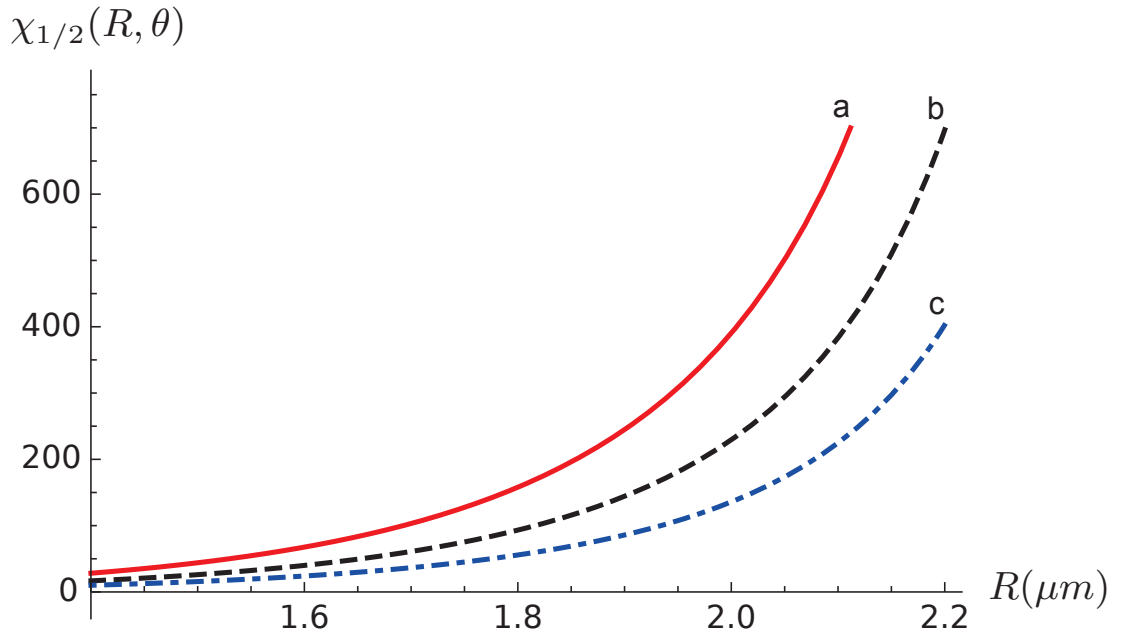
где $\delta(nD_{5/2})$ изменяет свой знак с отрицательного на положительный при переходе от $n = 43$ к $n = 44$.

На основе данных из Таблицы 1.1 вычисляется матричный элемент второго порядка аналогичный (2.14) с постоянной Ван-дер-Ваальса $\tilde{C}_6(43D_{5/2} M, \theta) = C_6(43D_{5/2} M, \theta) - (C_3(M, \theta))^2 / \delta$, определяемой с редуцированной функцией Грина. Метод модельного потенциала Фьюса дает для диагонального матричного элемента второго порядка (в атомных единицах):

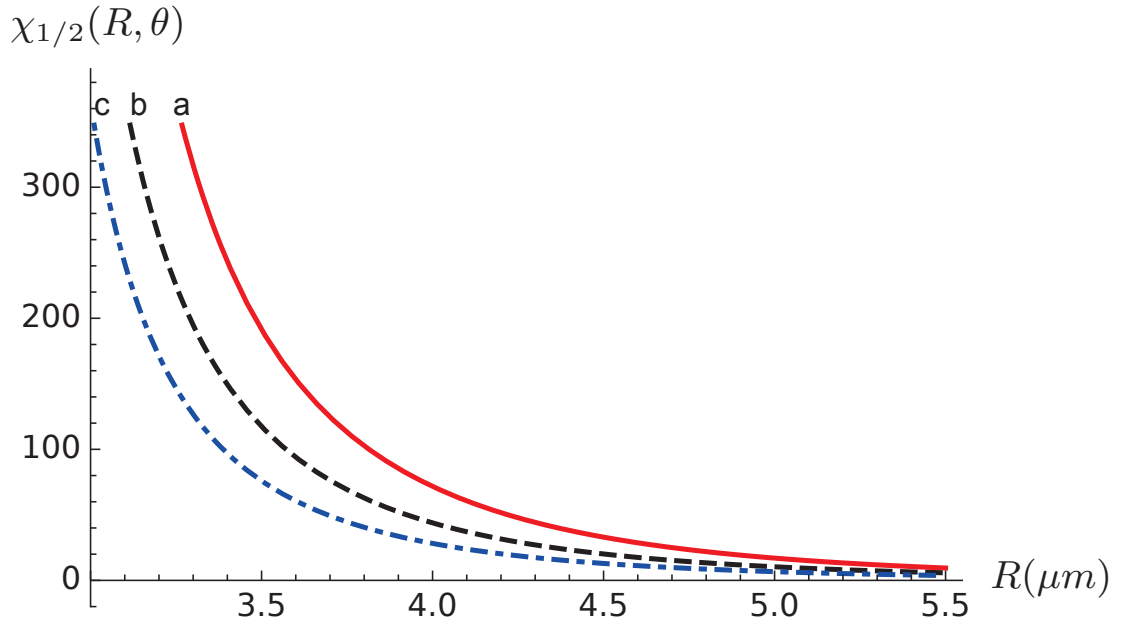
$$W_{22}^{(2)} = W_{33}^{(2)} = -32 \frac{\tilde{R}_{ss}}{R^6} = 1.845 \times 10^{20} / R^6, \quad (2.19)$$

и для недиагонального:

$$W_{23}^{(2)} = 2.786 \times 10^{17} / R^6. \quad (2.20)$$



(1)



(2)

Рис. 2.3. Зависимость отношения подкоренных членов уравнения (2.7) $\chi(R, \theta) = 8|W_{12}(R, \theta)/\Delta(R, \theta)|^2$ от межатомного расстояния R для атомов рубидия в состояниях $38P_{3/2, M=1/2}$ при углах $\theta = 0$ (кривые а), $\theta = \pi/6$ (b) и $\theta = \pi/2$ (c). Две области, где $\chi(R, \theta) > 10$, разделены щелью сингулярности: график (1) отражает область $1.5 \text{ мкм} < R < 2.2 \text{ мкм}$ в то время как график (2) представляет область $3.2 \text{ мкм} < R < 5.5 \text{ мкм}$. Между этими областями (для $2.2 \text{ мкм} < R < 3.2 \text{ мкм}$) $\chi(R, \theta)$ стремится к бесконечности из-за узла ферстеровского энергетического дефекта $\Delta(R, \theta) = 0$ в точке $R \approx 2.61 \text{ мкм}$, практически не зависящей от θ .

В данном случае суммирование по зеемановским подуровням исключает вклад R_{aa}, R_{sT}, R_{TT} компонент в $\tilde{C}_6 = C_6(41F_{7/2} - 45P_{3/2}) - 2(W_{12}^{(1)}R^3)^2/\delta$, оставляя только изотропную компоненту $32\tilde{R}_{ss}(41F_{7/2} - 45P_{3/2})$. Матричный элемент диполь-дипольного перехода в выражении (2.9) будет равен:

$$\begin{aligned} d^{AB} &= -\sqrt{\frac{288}{35}} \langle 43D_{5/2} | r_A | 41F_{7/2} \rangle \langle 43D_{5/2} | r_B | 45P_{3/2} \rangle \\ &= 5.373 \times 10^6 \text{ а.е.} \end{aligned} \quad (2.21)$$

Все эти данные для матричных элементов позволяют определить сдвиги, индуцированные дисперсионным взаимодействием по формулам (2.7) – (2.8).

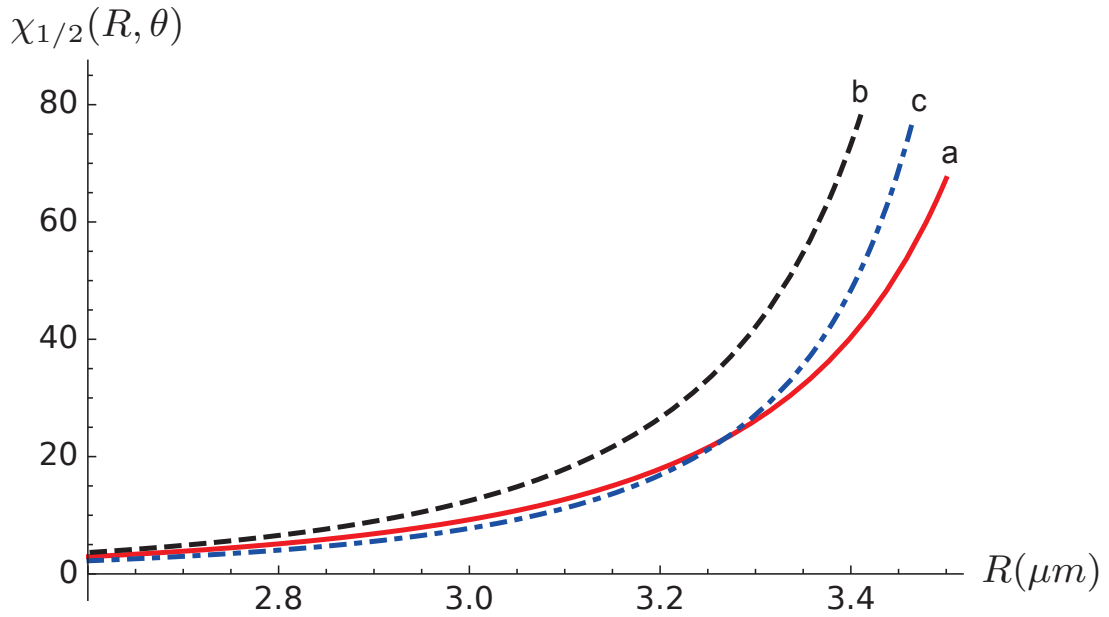
Упомянутое в (2.18) различие между резонансными расстройками из-за тонкой структуры состояния $41F_J$ ($J = 5/2, 7/2$) не компенсирует разницу между угловыми множителями: $\sqrt{72/175}$ для $J = 5/2$, примерно в 4.5 раза меньшим чем множитель $\sqrt{288/35}$ для $J = 7/2$ уравнения (2.21). В то же время соответствующие радиальные матричные элементы совпадают до 5-го десятичного знака. Кроме того, зависящие от θ множители $\mathcal{Z}_{7/2;3/2}^{5/2,M}(\theta)$ и $\mathcal{Z}_{5/2;3/2}^{5/2,M}(\theta)$ не демонстрируют существенной разницы (сравните соответствующие графики на Рисунке 2.1) и даже могут усилить доминирование вклада от состояния $41F_{7/2}$, в окрестности $\theta \approx 0$. Таким образом, вклад резонанса на состоянии $41F_{5/2}$ в энергию (2.7) составляет менее 5 процентов от вклада резонанса на состоянии $41F_{7/2}$ и поэтому может быть опущен в нашем рассмотрении.

Зависимость от R отношения $\chi_{1/2}(R, \theta) = 8|W_{12}^{(1)}(R, \theta)/\Delta(R, \theta)|^2$ для подкоренных членов уравнения (2.7), представленная на Рисунке 2.4, позволяет аналогичным образом оценить область межатомных расстояний R , где ван-дерваальсова зависимость $\Delta E_{vdW} = -C_6/R^6$ сдвига уровня энергии $43D_{5/2 M=1/2}$ превращается в диполь-дипольный сдвиг $\Delta E_{d-d} = C_3/R^3$. На рисунке видно, что в области $2 < R < 5$ мкм, абсолютное значение матричного элемента $W_{12}^{(1)}$ превосходит на порядок и более значение двухатомной отстройки энергии $\Delta(R)$, которая зависит от расстояния и обращается в нуль при $R \approx 3.9$ мкм. Отношение $\chi(R, \theta) = 8|W_{12}^{(1)}(R, \theta)/\Delta(R, \theta)|^2$ зависит от угла между осью квантования и

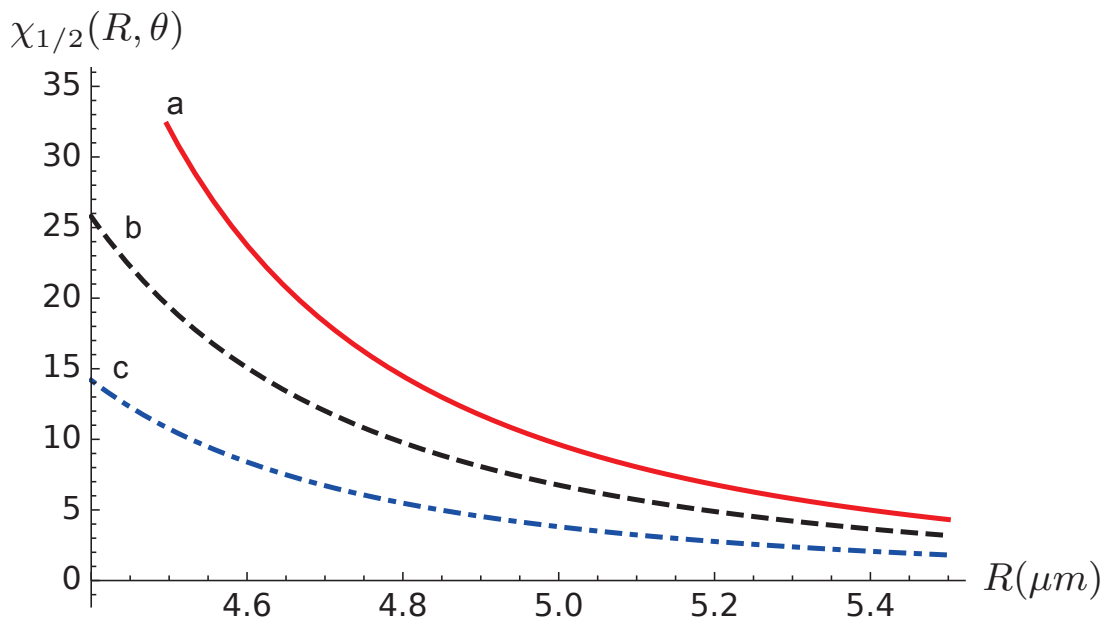
межатомной осью и достигает максимума при $\Delta(\mathbf{R}) \approx 0$. В состояниях с магнитными квантовыми числами $M = 3/2, 5/2$ зависимость от угла θ области R , где выполняется неравенство $\chi(R, \theta) \gg 1$, проявляется сильнее, так как матричный элемент первого порядка уменьшается по сравнению со случаем $M = 1/2$.

Область диполь-дипольного взаимодействия между ридберговскими атомами ограничена конечным значением энергетического дефекта δ между дипольно-связанными двухатомными уровнями энергии: чем меньше $|\delta|$, тем шире область межатомных расстояний, где выполняется диполь-дипольный закон взаимодействия первого порядка (2.10) между атомами. Поэтому были разработаны и экспериментально подтверждены различные методы расширения области диполь-дипольного взаимодействия Ферстера с использованием статических и/или радиочастотных электрических полей для уменьшения величины дефекта энергии δ [50, 52, 54, 55, 76]. Однако в современной литературе отсутствуют последовательные теоретические рассмотрения резонанса Ферстера, индуцированного внешним полем, с учетом одновременного действия поля и межатомного взаимодействия ридберговских атомов. Решение этой задачи может быть основано на использовании теории возмущений высших порядков для атомно-полевых и атомно-атомных взаимодействий по аналогии со случаем атомов в основных состояниях в поле [47]. Соответствующие восприимчивости двухатомной системы описывают зависимость энергетического сдвига от амплитуды внешнего поля и от относительной ориентации векторов межатомной оси \mathbf{R} и оси квантования.

Вне области Ферстера энергия взаимодействия между ридберговскими атомами следует закону Ван-дер-Ваальса $\Delta E_{vdW} = -C_6/R^6$. Численные расчеты показывают, что вклад в индуцированный взаимодействием сдвиг энергии состояний $38P_{3/2}$ и $43D_{5/2}$, от всех оставшихся "нерезонансных" членов двухатомного базиса для функции Грина (1.8) в области "ферстеровских расстояний" соответственно $1 \text{ мкм} < R < 6 \text{ мкм}$ и $2 \text{ мкм} < R < 5 \text{ мкм}$ будет более чем на 3 порядка меньше чем вклад от резонансных членов. Вне этой области (для



(1)



(2)

Рис. 2.4. Зависимость соотношения подкоренного член уравнения (2.7) $\chi(R, \theta) = 8|W_{12}(R, \theta)/\Delta(R, \theta)|^2$ от межатомного расстояния R в атомов рубидия в $43D_{5/2, M=1/2}$ состояниях при углах $\theta = 0$ (кривые а), $\theta = \pi/6$ (b) и $\theta = \pi/2$ (c). Две области, где $\chi(R, \theta) > 10$, разделены щелью сингулярности: график (1) отражает область $2.6 \text{ мкм} < R < 3.5 \text{ мкм}$ в то время как график (2) представляет область $4.4 \text{ мкм} < R < 5.5 \text{ мкм}$. Между этими областями (для $3.5 \text{ мкм} < R < 4.5 \text{ мкм}$) $\chi(R, \theta)$ стремится к бесконечности из-за узла ферстеровского энергетического дефекта $\Delta(R, \theta) = 0$ в точке $R \approx 3.88 \text{ мкм}$, практически не зависящей от θ .

$R > 5$ мкм и $R > 6$ мкм соответственно) этот сдвиг следует обычному закону Ван-дер-Ваальса $\Delta E_{vdW} = -C_6/R^6$ с постоянной C_6 выражения (1.19), где асимптотическое уравнение (1.37) и численные данные Таблицы 1.1 могут быть использованы для определения неприводимых компонент (1.22) – (1.25).

2.3. Выводы

В рамках теории возмущений для вырожденных состояний определены условия превращения зависимости вида $-C_6/R^6$ для энергии асимптотического межатомного взаимодействия в условиях ферстеровского резонанса в зависимость вида C_3/R^3 . Определены межатомные расстояния, на которых такое изменение зависимостей возникает. Определена постоянная $C_3(\theta, nlJM)$ магнитного квантового числа M и угла ориентации оси квантования относительно межатомной оси.

Глава 3

Вероятности радиационных переходов из ридберговских состояний атомов

Поскольку ридберговские атомы очень чувствительны к внешним полям, важной задачей является изучение их взаимодействия со слабыми полями, например, с полем теплового излучения. Такое взаимодействие приводит к термоиндуцированным сдвигам и уширениям ридберговских уровней. В частности, изучение абсолютно черного тела индуцирует вынужденные процессы радиационного распада, возбуждения, ионизации и штарковского сдвига уровней. Кроме того, свой вклад в уширение вносят также и процессы спонтанного распада ридберговских состояний. Основной вклад в амплитуды таких процессов дают электродипольные переходы.

В данной главе будут аналитически получены асимптотики для амплитуд радиационных переходов из циркулярных ридберговских состояний атомов. В качестве примера на основе этих асимптотик будут выведены аналитические зависимости сечений пороговой и надпороговой ионизаций циркулярных состояний от главного квантового числа n .

Циркулярные ридберговские состояния представляют собой атомные состояния с большими главными квантовыми числами n и максимально возможными орбитальными квантовыми числами $l = n - 1$. В таких состояниях пространственное распределение электронной плотности внешнего электрона оказывается близким к циркулярной боровской орбите что делает их квазиклассическими системами с особыми свойствами и позволяет описывать такие состояния во всех атомах одними и теми же волновыми функциями [77].

Поскольку циркулярные ридберговские состояния идентичны соответствующим состояниям атома водорода, начнем рассмотрение с радиальной волновой

функции водородоподобного атома в связанном состоянии

$$R_{nl}(r) = \frac{2Z^{3/2}}{n^2} \sqrt{\frac{(2l+2)_{n_r}}{n_r! \Gamma(2l+2)}} \left(\frac{2Zr}{n}\right)^l \exp\left(-\frac{Zr}{n}\right) {}_1F_1\left(-n_r; 2l+2; \frac{2Zr}{n}\right) \quad (3.1)$$

где:

${}_1F_1(a; c; x)$ - конфлюэнтная (вырожденная) гипергеометрическая функция, $(a)_k = a(a+1)(a+2)\cdots(a+k-1)$ - символ Похгаммера, n - главное, l - орбитальное, $n_r = n - l - 1$ - радиальное квантовые числа, Z -заряд остова.

Радиальный матричный элемент дипольного перехода между связанными состояниями может быть выражен через обобщенную гипергеометрическую функцию двух переменных $F_2(a; b_1, b_2; c_1, c_2; x, y)$:

$$\begin{aligned} \langle n', l' | r | n, l \rangle &= \frac{\Gamma(l+l'+4)}{4Z \sqrt{\Gamma(2l+2)\Gamma(2l'+2)}} \sqrt{\frac{(2l+2)_{n_r} (2l'+2)_{n'_r}}{n_r! n'_r!}} \left(\frac{2n'}{n+n'}\right)^{l'+2} \\ &\times \left(\frac{2n}{n+n'}\right)^{l'+2} F_2\left(l+l'+4; -n_r, -n'_r; 2l+2, 2l'+2; \frac{2n'}{n+n'}, \frac{2n}{n+n'}\right) \end{aligned} \quad (3.2)$$

где для целых отрицательных параметров $-n_r$ и $-n'_r$ функцию F_2 удобно представить в виде однократной суммы гипергеометрических функций Гаусса ${}_2F_1$ [63]:

$$F_2(a; -n_r, -n'_r; c_1, c_2; x, y) = \sum_{k=0}^{n_r} \frac{(a)_k (-n_r)_k}{(c)_k k!} x^k {}_2F_1(a+k, -n'_r; c_2; y), \quad (3.3)$$

где каждая функция ${}_2F_1$ в свою очередь представляет собой полином n'_r -го порядка от аргумента y .

Для циркулярных состояний $l = n - 1$ и радиальное квантовое число равно нулю $n_r = 0$, следовательно от суммы в (3.3) остается только одно слагаемое с $k = 0$ и матричный элемент (3.2) приобретает вид:

$$\begin{aligned} \langle n', l' | r | n, l = n - 1 \rangle &= \frac{\Gamma(n+l'+3)}{4Z \sqrt{\Gamma(2n)\Gamma(2l'+2)}} \sqrt{\frac{(2l'+2)_{n'_r}}{n'_r!}} \\ &\times \left(\frac{2n'}{n+n'}\right)^{n+1} \left(\frac{2n}{n+n'}\right)^{l'+2} {}_2F_1\left(n+l'+3, -n'_r; 2l'+2; \frac{2n}{n+n'}\right). \end{aligned} \quad (3.4)$$

Для матричных элементов циркулярно-циркулярных переходов $n_r = 0$ и $n'_r = 0$, функция ${}_2F_1$ обращается в единицу. В частности, для переходов в состояния с бóльшим на единицу орбитальным моментом $l' = l + 1$ ($n' = n + 1$) получим:

$$\langle n', l + 1 | r | n, l = n - 1 \rangle = \frac{n'}{Z} \sqrt{\frac{(n' - 1)^3}{n' - \frac{1}{2}}} \left(1 - \frac{1}{(2n' - 1)^2} \right)^{n'}, \quad (3.5)$$

а с меньшим на единицу орбитальным моментом $l' = l - 1$ ($n' = n - 1$):

$$\langle n', l - 1 | r | n, l = n - 1 \rangle = \frac{(n' + 1)}{Z} \sqrt{\frac{(n')^3}{n' + \frac{1}{2}}} \left(1 - \frac{1}{(2n' + 1)^2} \right)^{n'+1}. \quad (3.6)$$

Выражения (3.5) и (3.6) демонстрируют в явном виде пропорциональность матричных элементов квадрату главного квантового числа при больших n .

3.1. Асимптотики дискретно-дискретных переходов из циркулярных состояний

Для матричных элементов дипольных переходов из циркулярных ридберговских состояний $n \gg 1$ в произвольные ридберговские с $n' \gg n$ может быть получена только асимптотика. Для того, чтобы сократить число слагаемых $(n'_r + 1)$ в сумме для функции ${}_2F_1$, можно воспользоваться соотношением Куммера [78]

$${}_2F_1(a, b; c; z) = (1 - z)^{c-a-b} {}_2F_1(c - a, c - b; c; z), \quad (3.7)$$

позволяющим записать ${}_2F_1$ в виде суммы двух (для $l' = l + 1$) или четырех (для $l' = l - 1$) слагаемых. Используя также асимптотику Гамма-функции [63]:

$$\Gamma(z) \sim z^{z-\frac{1}{2}} \exp(-z) \sqrt{2\pi} \quad (3.8)$$

получим асимптотические выражения для матричного элемента (3.4) дипольных переходов между ридберговскими состояниями с главными квантовыми

числами $1 \ll n \ll n'$. В частности, для переходов из циркулярных состояний в состояние $|n'l'\rangle$ с орбитальным моментом $l' = l + 1$:

$$\langle n', l + 1 | r | n, l \rangle \rightarrow \frac{2^{n+2}}{Z} \sqrt[4]{\frac{n}{\pi}} e^{-n} \frac{n^2}{n'^{\frac{3}{2}}}, \quad (3.9)$$

в то время как для переходов в состояния с орбитальным моментом $l' = l - 1$:

$$\langle n', l - 1 | r | n, l \rangle \rightarrow \frac{2n^{\frac{5}{4}} \left(\frac{2}{e}\right)^n}{\sqrt[4]{\pi} Z n'^{\frac{3}{2}}}. \quad (3.10)$$

где e -основание натурального логарифма.

Эти соотношения демонстрируют экспоненциальное убывание амплитуд дипольных переходов в состояния дискретного спектра с ростом n , что позволяет, в частности, пренебрегать вкладом возбуждений в выше лежащие связанные состояния, индуцируемых тепловым излучением для ридберговского атома в циркулярном состоянии. Очевидно, аналогичное экспоненциальное убывание должно наблюдаться и для сечений ионизационных переходов в состояния континуума.

3.2. Сечение пороговой ионизации ридберговского атома из циркулярных состояний

Чтобы получить радиальную волновую функцию электрона в состоянии непрерывного спектра с нулевой энергией и орбитальным моментом l , необходимо взять предел волновой функции (3.1) при $n_r \rightarrow \infty$:

$$R_{E=0} l(r) = \lim_{n_r \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{n^3}{Z^2}} R_{nl}(r) = 2 \frac{\sqrt{Z} (2Zr)^l}{\Gamma(2l+2)} {}_0F_1(2l+2; -2Zr) = \sqrt{\frac{2}{r}} J_{2l+1}(2\sqrt{2Zr}) \quad (3.11)$$

где $J_p(x)$ -функция Бесселя. Множитель $\sqrt{n^3/Z^2}$ учитывает различие между нормировкой волновых функции дискретного и непрерывного спектров. Из этой волновой функции может быть получено асимптотическое поведение волновой

функции связанного состояния (3.1) при $n \gg 1$ [79]:

$$R_{nl}(r) \approx \sqrt{\frac{Z^2}{n^3}} R_{E=0l}(r) \exp\left(-\frac{Zr}{n}\right) \quad (3.12)$$

Радиальный матричный элемент дипольного перехода из связанного состояния в пороговое выражается через волновые функции (3.1) и (3.11):

$$\langle E = 0, l' | r | n, l \rangle = \int_0^\infty R_{E=0l}^*(r) r R_{nl}(r) r^2 dr. \quad (3.13)$$

Этот интеграл может быть вычислен аналитически как предел при $n' \rightarrow \infty$ матричного элемента (3.2):

$$\begin{aligned} \langle E = 0, l' | r | n, l \rangle &= \lim_{n' \rightarrow \infty} \langle n', l' | r | n, l \rangle = \frac{2^l (2n)^{l'+2} \Gamma(l + l' + 4)}{Z^2 \Gamma(2l + 2) \Gamma(2l' + 2)} \sqrt{\frac{\Gamma(2l + 2 + n_r)}{n_r!}} \\ &\times \Psi_1(l + l' + 4; -n_r; 2l + 2, 2l' + 2; 2, -2n) \end{aligned} \quad (3.14)$$

где $\Psi_1(a; b; c_1, c_2; x, y)$ - вырожденный ряд двух переменных [63], который появляется как предел функции (3.3) и для целых отрицательных n_r может быть представлен в виде суммы конфлюэнтных гипергеометрических функций ${}_1F_1$:

$$\Psi_1(a; -n_r; c_1, c_2; x, y) = \sum_{k=0}^{n_r} \frac{(a)_k (-n_r)_k}{k! (c_1)_k} x^k {}_1F_1(a + k; c_2; y) \quad (3.15)$$

Для циркулярных связанных начальных состояний от суммы по k в (3.15) остается только одно слагаемое с $k = 0$ и матричный элемент (3.14) приобретает вид:

$$\langle E = 0, l' | r | n, l = n - 1 \rangle = \frac{2^{n-1} (2n)^{l'+2} \Gamma(n + l' + 3)}{Z^2 \sqrt{\Gamma(2n)} \Gamma(2l' + 2)} {}_1F_1(n + l' + 3; 2l' + 2; -2n) \quad (3.16)$$

Для того чтобы бесконечный ряд ${}_1F_1$ стал конечным, воспользуемся преобразованием Куммера [63]:

$${}_1F_1(a; b; z) = \exp(z) {}_1F_1(b - a; b; -z). \quad (3.17)$$

Используя асимптотику Гамма функции (3.8), получаем асимптотики для матричных элементов дипольных переходов из циркулярных ридберговских состояний в пороговые ($n' \rightarrow \infty$). В частности, для переходов в пороговые состояния с орбитальным моментом $l' = l + 1$:

$$\langle n' \rightarrow \infty, l + 1 | r | n, l \rangle \rightarrow \frac{4n^{\frac{9}{4}}}{Z^2 \sqrt[4]{\pi}} \left(\frac{2}{e} \right)^n, \quad (3.18)$$

в то время как для переходов в пороговые состояния с орбитальным моментом $l' = l - 1$ будут иметь вид:

$$\langle n' \rightarrow \infty, l - 1 | r | n, l \rangle \rightarrow \frac{2n^{\frac{5}{4}}}{Z^2 \sqrt[4]{\pi}} \left(\frac{2}{e} \right)^n. \quad (3.19)$$

Пороговая ионизация представляет собой частный случай однофотонной ионизации при частоте фотона ω , равной по абсолютной величине энергии связанного состояния атома $|E_{nl}|$, с сечением

$$\sigma_{nl}^{thr} = \sigma_{nl}(\omega = |E_{nl}|), \quad (3.20)$$

где сечение фотоионизации излучением частоты ω (c -скорость света):

$$\sigma_{nl}(\omega) = \frac{4\pi\omega}{3c(2l+1)} (l|\langle \epsilon l - 1 | r | nl \rangle|^2 + (l+1)|\langle \epsilon l + 1 | r | nl \rangle|^2) \quad (3.21)$$

выражается через матричные элементы дискретно-непрерывных дипольных переходов в состояния континуума с орбитальными моментами $l' = l \pm 1$. Так как циркулярные ридберговские состояния произвольного многоэлектронного атома практически совпадают с водородоподобными, в качестве энергии E_{nl} можно взять боровскую энергию $E_{nl} = -\frac{Z^2}{2n^2}$.

Подставив в (3.20) асимптотики (3.18) и (3.19) можно получить сечение пороговой ионизации циркулярных состояний в виде:

$$\sigma_{n,l=n-1}^{thr} = \frac{16\pi^{3/2}n^{5/2}}{3Z^2c} \left(\frac{2}{e} \right)^{2n} \left(1 + \frac{1}{2n} + \frac{1}{2n^2} + o\left(\frac{1}{n^3} \right) \right). \quad (3.22)$$

Как видно на Рисунке 3.1, сечение пороговой ионизации для циркулярных состояний убывает экспоненциально с ростом главного квантового числа n .

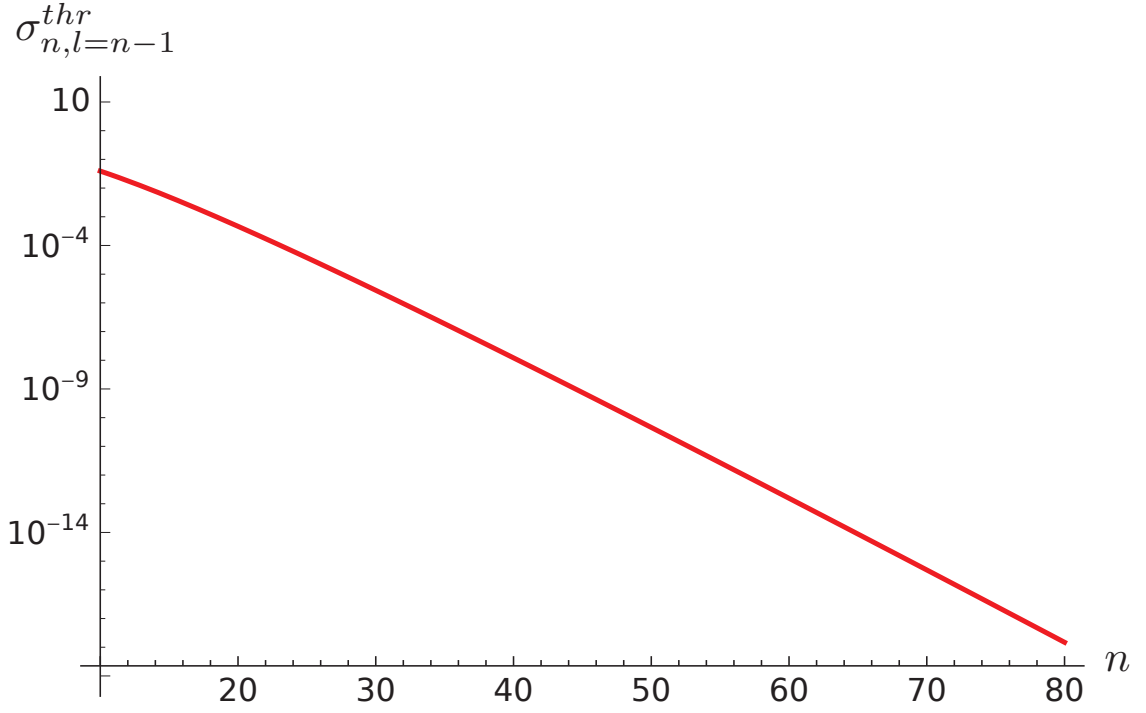


Рис. 3.1. Зависимость сечения пороговой ионизации (3.22) циркулярных состояний с $l = n - 1$ от главного квантового числа n . Вертикальная ось представлена в логарифмическом масштабе.

3.3. Сечение надпороговой ионизации ридберговского атома из циркулярных состояний

Чтобы получить сечение надпороговой ионизации, необходима радиальная волновая функция электрона водородоподобного атома в состоянии непрерывного спектра с энергией $E > 0$:

$$R_{El}(r) = \frac{|\Gamma(2l + 1 + \frac{iZ}{\kappa})|}{\Gamma(2l + 2)} \sqrt{\frac{2\kappa}{\pi}} \exp\left(\frac{\pi Z}{2\kappa} - i\kappa r\right) (2\kappa r)^l {}_1F_1\left(l + 1 + \frac{iZ}{\kappa}; 2l + 2; 2i\kappa r\right) \quad (3.23)$$

где: $\kappa = \sqrt{2E}$ - импульс свободного электрона.

Радиальный матричный элемент дипольного перехода из связанного состояния в континуум выражается через волновые функции (3.1) и (3.23)

$$\langle E, l' | r | n, l \rangle = \int_0^{\infty} R_{El}^*(r) r R_{nl}(r) r^2 dr. \quad (3.24)$$

Этот интеграл может быть вычислен аналитически и выражен через обобщенную гипергеометрическую функцию двух переменных F_2 как:

$$\begin{aligned} \langle E, l' | r | n, l \rangle &= \frac{\Gamma(l + l' + 4) |\Gamma(2l' + 1 + \frac{iZ}{\kappa})|}{4\kappa Z \Gamma(2l' + 2) \sqrt{2\pi Z \kappa}} \exp\left(\frac{\pi Z}{2\kappa}\right) \sqrt{\frac{(2l + 2)_{n_r}}{\Gamma(2l + 2) n_r!}} x_1^{l+2} \\ &\times (-ix)_2^{l'+2} F_2\left(l + l' + 4; -n_r, l' + 1 + \frac{iZ}{\kappa}; 2l + 2, 2l' + 2; x_1, x_2\right) \end{aligned} \quad (3.25)$$

где: $x_1 = \frac{2Z}{Z + i\kappa n}$, $x_2 = 2 - x_1 = \frac{2i\kappa n}{Z + i\kappa n}$. Энергия свободного электрона будет зависеть от частоты поглощенного фотона ω :

$$E = \omega - \frac{Z^2}{2n^2}. \quad (3.26)$$

Используя формулы (3.3) и (3.8) аналогично получаем асимптотики для дипольных переходов из связанных циркулярных в произвольные непрерывные состояния с орбитальным моментом $l' = l + 1$:

$$\begin{aligned} \langle E, l + 1 | r | n, l \rangle &\rightarrow \frac{4n^{\frac{9}{4}}}{Z^2 \sqrt[4]{\pi} (\sqrt{1 + \varepsilon})^{7/4}} \left(\frac{2}{e}\right)^n \left(\frac{\exp\left(1 - \frac{\text{arctg } \sqrt{\varepsilon}}{\sqrt{\varepsilon}}\right)}{\sqrt{1 + \varepsilon}}\right)^n \\ &= \frac{\langle n' \rightarrow \infty, l + 1 | r | n, l \rangle}{(\sqrt{1 + \varepsilon})^{7/4}} \left(\frac{\exp\left(1 - \frac{\text{arctg } \sqrt{\varepsilon}}{\sqrt{\varepsilon}}\right)}{\sqrt{1 + \varepsilon}}\right)^n, \end{aligned} \quad (3.27)$$

и с орбитальным моментом $l' = l - 1$:

$$\begin{aligned} \langle E, l - 1 | r | n, l \rangle &\rightarrow \frac{2n^{\frac{5}{4}}}{Z^2 \sqrt[4]{\pi} (\sqrt{1 + \varepsilon})^{7/4}} \left(\frac{2}{e}\right)^n \left(\frac{\exp\left(1 - \frac{\text{arctg } \sqrt{\varepsilon}}{\sqrt{\varepsilon}}\right)}{\sqrt{1 + \varepsilon}}\right)^n \\ &= \frac{\langle n' \rightarrow \infty, l - 1 | r | n, l \rangle}{(\sqrt{1 + \varepsilon})^{7/4}} \left(\frac{\exp\left(1 - \frac{\text{arctg } \sqrt{\varepsilon}}{\sqrt{\varepsilon}}\right)}{\sqrt{1 + \varepsilon}}\right)^n, \end{aligned} \quad (3.28)$$

где $\varepsilon \equiv \frac{E}{|E_{nl}|} = \frac{\kappa^2 n^2}{Z^2}$ - отношение энергии свободного электрона (3.26) к абсолютному значению Боровской энергии $E_{nl} = -\frac{Z^2}{2n^2}$. Подставляя асимптотики (3.27) и (3.28) в выражение (3.21), находим сечение надпороговой ионизации циркулярных состояний:

$$\sigma_{n, l=n-1} = \sigma_{n, l=n-1}^{thr} f_n(\omega) \quad (3.29)$$

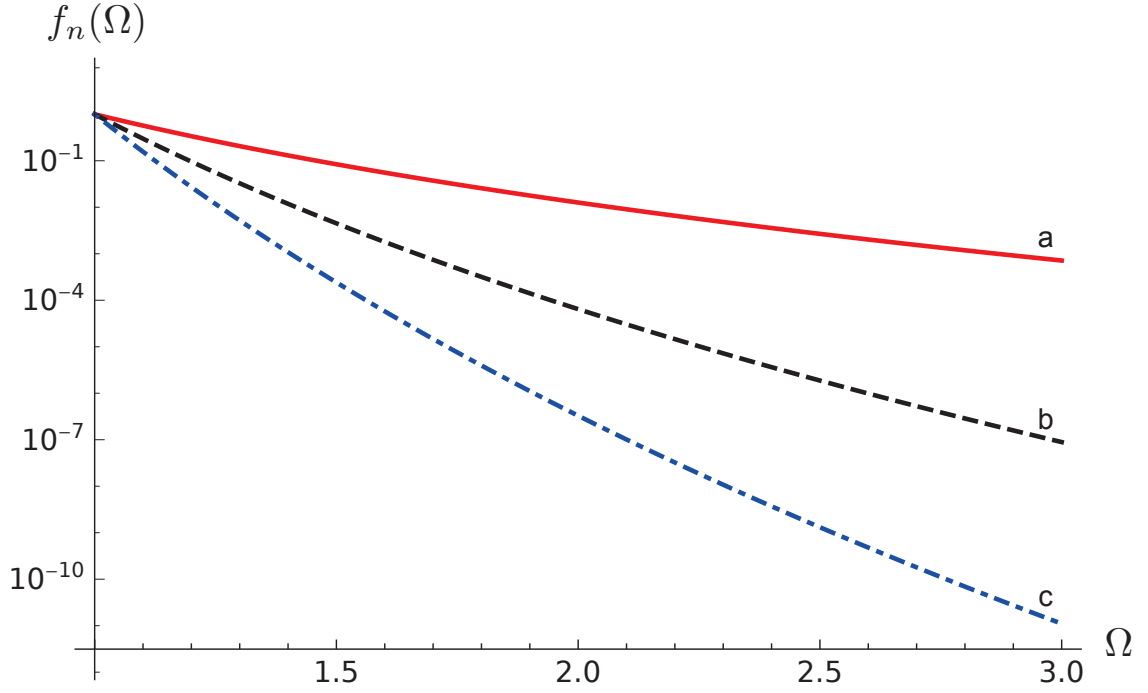


Рис. 3.2. Зависимость фактора (3.30) для сечения надпороговой фотоионизации (3.29) от нормированной частоты фотона $\Omega = \omega/|E_{nl}|$ для циркулярных ридберговских стояний с $n = 10$ (кривая а), $n = 20$ (кривая б) и $n = 30$ (кривая с). Вертикальная ось представлена в логарифмическом масштабе.

где $\sigma_{n,l=n-1}^{thr}$ -сечение пороговой ионизации (3.22),

$$f_n(\omega) = \frac{1}{\Omega^{5/2}} \left(\frac{\exp\left(1 - \frac{\arctan \sqrt{\Omega-1}}{\sqrt{\Omega-1}}\right)}{\sqrt{\Omega}} \right)^{2n} \quad (3.30)$$

где $\Omega = \omega/|E_{nl}| = \varepsilon + 1$. Как видно на Рисунке 3.2, множитель (3.30) является быстро убывающим с ростом частоты фотона и главного квантового числа. Это свойство является существенным аргументом для возможности пренебречь вкладом процессов ионизации в уширение циркулярных ридберговских состояний излучением черного тела.

3.4. Выводы

В настоящей главе были получены асимптотики амплитуд для дискретно-дискретных, дискретно-пороговых и дискретно-непрерывных радиационных пе-

переходов из циркулярных состояний ридберговских атомов. Поскольку амплитуды радиационных переходов экспоненциально убывают с увеличением разности $|n' - n|$ пропорционально $\exp(-|n' - n|)$, основной вклад в скорость спонтанного распада и депопуляции, индуцированной излучением черного тела, для состояний с большими орбитальными моментами l , дают переходы в ближайшие верхние и нижние состояния $n' = n \pm 1$. Также аналитически получена зависимость сечения пороговой и надпороговой ионизаций циркулярных состояний от главного квантового числа n . Так как данные сечения быстро убывают с ростом n , вклад континуума в сдвиги и уширения состояний с высокими l и n пренебрежимо мал.

Эффекты высших порядков во взаимодействии нормальных и метастабильных атомов с полем оптической решетки

4.1. Оптические решетки с магической длиной волны

В настоящее время наилучшие результаты по созданию оптических стандартов частоты и времени на холодных атомах и ионах были достигнуты на ионах Al^+ в электромагнитной ловушке Пауля [23] с относительной погрешностью порядка $\sim 10^{-18}$ и на нейтральных атомах Sr в оптической решетке [80] с неопределенностью на уровне 2×10^{-18} . Однако дальнейшее увеличение точности оптических стандартов частоты наталкивается на ряд фундаментальных физических проблем и ограничений, связанных, в частности с излучением абсолютно черного тела, что приводит к существованию предела воспроизводимости и стабильности частоты измеряемых переходов. С другой стороны, достижение в оптических стандартах частоты относительной погрешности воспроизведения единиц измерения времени и частоты $10^{-17} - 10^{-18}$ требует оценки роли высших порядков оптической нелинейности, обусловленных влиянием оптической решетки на сдвиг частоты часового перехода. Основным подходом к решению этой важной проблемы является использование так называемой магической длины волны лазерного поля, формирующего оптическую решетку для удержания атомов в стандарте частоты.

Захват охлажденных щелочно-земельно-подобных атомов в ловушку оптической решетки с магической длиной волны λ_{mag} дает возможность наблюдать часовые переходы между основным $6s^{21}(S_0)$ - и возбужденным метастабильным $6s6p(^3P_0)$ -состояниями атомов, свободные от штарковских и доплеровских сдви-

гов частоты. Лазерное охлаждение и захват атомов в оптическую решетку позволяет локализовать их в областях много меньших длины волны детектирующего лазера устранив таким образом линейный эффект Доплера [81]. В то время как на магической длине волны динамический эффект Штарка приводит к одинаковым сдвигам энергий основного и возбужденного часовых уровней, что позволяет в принципе полностью компенсировать эффект Штарка в часовом переходе оптического стандарта частоты [82]. Важно отметить, что совпадение значений линейных по интенсивности I поля динамических поляризуемостей $\alpha_e(\omega_{mag}) = \alpha_g(\omega_{mag})$ на магической длине волны $\lambda_{mag} = 2\pi c/\omega_{mag}$, вовсе не гарантирует эквивалентности поправок нелинейных по интенсивности. В первую очередь это касается гиперполяризуемостей $\beta_e(\omega_{mag})$ и $\beta_g(\omega_{mag})$, которые квадратичны по интенсивности поля решетки.

Кроме того, помимо дипольных поляризуемостей $\alpha_{e(g)}^{E1}(\omega_{mag})$ ($E1$) существуют ещё и мультипольные поляризуемости высшего порядка, в первую очередь магнито-дипольная $\alpha_{e(g)}^{M1}(\omega_{mag})$ ($M1$) и электрическая квадрупольная $\alpha_{e(g)}^{E2}(\omega_{mag})$ ($E2$) поляризуемости, которые вносят ненулевой вклад в линейный по интенсивности поля I динамический эффект Штарка. Хотя поправки на мультипольные взаимодействия и имеют порядок малости $10^{-6} - 10^{-7}$, по отношению к электрическому дипольному взаимодействию ($E1$), их пространственное распределение в решетке существенно отличается от распределения $E1$ -взаимодействия и должно быть учтено в прецизионных измерениях частоты. В частности, поправки от $E2$ и $M1$ -взаимодействий могут влиять на магические длины волн в зависимости от конкретных условий эксперимента. Например, в бегущей волне пространственное распределение интенсивности поля вдоль оси лазерного пучка является однородным, линейный по интенсивности I и штарковский сдвиг определяется суммой поляризуемостей

$$\alpha_{e(g)}^{\Sigma} = \alpha_{e(g)}^{E1}(\omega_{mag}^t) + \alpha_{e(g)}^{qm}(\omega_{mag}^t) \quad (4.1)$$

где: $\alpha_{e(g)}^{qm}(\omega_{mag}^t) = \alpha_{e(g)}^{E2}(\omega_{mag}^t) + \alpha_{e(g)}^{M1}(\omega_{mag}^t)$ - сумма $E2$ - и $M1$ -поляризуемостей. Между тем в стоячей волне оптической решетки $E2$ - и $M1$ -взаимодействия отстают по фазе на четверть длины волны от $E1$ -взаимодействия и, следовательно, соответствующие поляризуемости необходимо вычесть из $E1$ -поляризуемости путем введения комбинированной дипольно-мультипольной поляризуемости $\alpha_{e(g)}^{dqm}(\omega_{mag}^s) = \alpha_{e(g)}^{E1}(\omega_{mag}^s) - \alpha_{e(g)}^{qm}(\omega_{mag}^s)$ и поэтому магическая длина волны $\lambda_{mag}^{t(s)} = 2\pi c / \omega_{mag}^{t(s)}$ определяется по-разному для бегущей (t) и стоячей (s) волн оптической решетки. Так для бегущей волны магическая длина волны определяется условием:

$$\alpha_e^{\Sigma}(\omega_{mag}^t) = \alpha_g^{\Sigma}(\omega_{mag}^t) \quad (4.2)$$

в то время как для стоячей волны подобное условие будет иметь вид:

$$\alpha_e^{dqm}(\omega_{mag}^s) = \alpha_g^{dqm}(\omega_{mag}^s) \quad (4.3)$$

[83]. Важно подчеркнуть, что в настоящее время в принципе возможно экспериментально измерить разность магических длин волн в бегущей λ_{mag}^t и стоячей волне λ_{mag}^s оптической решетки, однако даже минимальная отстройка длины волны от магической может быть использована для контроля вклада эффектов высшего порядка в погрешность оптических стандартов частоты и времени. В дополнение к определению магической длины волны, представленным формулами (4.2-4.3), существует также промежуточный случай эквивалентности только дипольных поляризуемостей основного и возбужденного состояний:

$$\alpha_g^{E1}(\omega_{mag}^d) = \alpha_e^{E1}(\omega_{mag}^d) \quad (4.4)$$

Именно такое определение для магической длины волны наиболее часто используется на практике. В работе [84] было впервые отмечено, что влияние мультипольных эффектов может вызвать появление дополнительных вкладов в погрешность оптических стандартов частоты и времени.

Помимо различия магических частот для бегущей и стоячей волн, магические длины волн разделяются еще на два типа по способу захвата ультрахолодных атомов в ловушку:

1. магическая длина волны с "красной" отстройкой: в ловушке реализуются притягивающие потенциалы, в которых потенциальная энергия атомов имеет минимум и захваченные атомы локализируются в окрестностях пучностей лазерной решетки;
2. магическая длина волны с "голубой" отстройкой: в ловушке реализуются отталкивающие потенциалы и атомы локализируются в окрестностях узлов лазерной решетки с $I = 0$.

Очевидно, что в последнем случае, роль эффектов высших порядков существенной снижается по сравнению со случаем красной отстройки. Однако для голубой отстройки магической длины волны необходима трехмерная модификация конструкции оптической решетки, поскольку из-за свойств отталкивающих потенциалов ее одномерный вариант практически невозможен.

В данной главе рассматриваются оба варианта оптической решетки, с целью анализа эффектов, которые не могут быть скомпенсированы подходящим выбором магической длины волны и, следовательно, должны корректно учитываться при анализе результатов измерений частоты часового перехода. В качестве примера рассмотрено влияние эффектов высших порядков на неопределенности стандартов частоты на атомах магния.

4.2. Нелинейные, недипольные и ангармонические эффекты во взаимодействии атома с полем оптической решетки

4.2.1. Оптические решетки с красной магической длиной волны

Сдвиг частоты вследствие взаимодействия с полем решетки представляет собой разность штарковских энергий для основного и возбужденного состояний часового перехода. Штарковские сдвиги энергии часовых уровней определяют потенциальную энергию атома в решетке. Вектор напряженности электрического поля стоячей электромагнитной волны оптической решетки можно представить в виде

$$\mathbf{E}(X, t) = 2\mathbf{E}_0 \cos(kX) \cos(\omega t), \quad (4.5)$$

осциллирующем во времени с частотой ω и распределенным в пространстве с периодом, равным половине длины волны $\lambda = 2\pi/k$, где k - волновое число, определяющее абсолютную величину волнового вектора лазерного излучения $\mathbf{k} = k\mathbf{e}_x$ ($k = \omega/c$); X - смещение атома относительно положения равновесия - в пучности стоячей волны решетки. Взаимодействие атома с решеткой описывается оператором $\hat{V}(X, t) = \text{Re}[\hat{V}(X) \exp(-i\omega t)]$ в этом выражении пространственный фактор $\hat{V}(X)$ определяется как [83]

$$\hat{V}(X) = \hat{V}_{E1} \cos(kX) + (\hat{V}_{E2} + \hat{V}_{M1}) \sin(kX), \quad (4.6)$$

где операторы E1-, E2- и M1-взаимодействий имеют вид

$$\begin{aligned} \hat{V}_{E1} &= \mathbf{r}\mathbf{E}_0; \\ \hat{V}_{E2} &= \frac{\alpha\omega}{\sqrt{6}} r^2 (\{\mathbf{E}_0 \otimes \mathbf{n}\}_2 \mathbf{C}_2(\theta, \varphi)); \\ \hat{V}_{M2} &= \frac{\alpha}{2} \left\{ [\mathbf{n} \times \mathbf{E}_0] (\hat{\mathbf{J}} + \hat{\mathbf{S}}) \right\}. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Здесь: $\mathbf{r} = r\mathbf{n}$ - радиус-вектор валентного электрона; $\mathbf{C}_2(\theta, \varphi)$ - модифицированная сферическая функция угловых переменных θ и φ радиус-вектора оптиче-

ского электрона; $\hat{\mathbf{J}}$ и $\hat{\mathbf{S}}$ - полный угловой и спиновый моменты атома.

Учитывая члены второго и четвертого порядка по взаимодействию атомов с полем решетки (т.е. линейных и квадратичных по интенсивности поля решетки I [82]) формулы (4.7) определяют потенциальные ямы U решетки [83] в основном или возбужденном состоянии

$$U_{g(e)}^{latt}(X, I) \approx -D_{g(e)}(I) + U_{g(e)}^{harm}(I)X^2 - U_{g(e)}^{anh}(I)X^4 + \dots \quad (4.8)$$

где потенциальная энергия отсчитывается от ее наименьшего значения $U_{g(e)}^{latt}(0, I) = -D_{g(e)}(I)$ - глубина потенциальных ям

$$D_{g(e)} = \alpha_{g(e)}^{E1}(\omega)I + \beta_{g(e)}(\omega)I^2 \quad (4.9)$$

определяется электродипольными поляризуемостями $\alpha_{g(e)}^{E1}(\omega)$ и гиперполяризуемостями $\beta_{g(e)}(\omega)$ атомов в основном или возбужденном состоянии. Коэффициент перед квадратом смещения

$$U_{g(e)}^{harm}(I) = \left[\alpha_{g(e)}^{dqm}(\omega)I + 2\beta_{g(e)}(\omega)I^2 \right] k^2 = \frac{M\Omega_{g(e)}^2(I)}{2} \quad (4.10)$$

где M - масса атома, определяется зависящей от интенсивности собственной частотой осцилляций $\Omega_{g(e)}(I)$ для основного и возбужденного состояний атома в потенциальной яме (4.8). Коэффициент перед четвертой степенью X определяет ангармоническую поправку низшего порядка штарковского потенциала в стоячей волне решетки, зависящую от комбинаций $E1$ -, $E2$ -, и $M1$ -поляризуемостей $\alpha_{g(e)}^{dqm}(\omega) = \alpha_{g(e)}^{E1}(\omega) - \alpha_{g(e)}^{qm}(\omega)$ и гиперполяризуемостей

$$U_{g(e)}^{anh}(I) = \left[\alpha_{g(e)}^{dqm}(\omega)I + 5\beta_{g(e)}I^2 \right] \frac{k^4}{3} \quad (4.11)$$

Уравнение (4.8) описывает потенциал решетки в пространственной области $|X| \ll \lambda/4$, где λ - длина волны лазерного излучения, создающего стоячую волну решетки; атомы в решетке локализованы с пространственной периодичностью $\lambda/2$. Атом, захваченный в лазерную решетку, совершает колебания в

стационарном состоянии с энергией

$$\mathcal{E}_{g(e)}^{vib}(I, n) = -D_{g(e)}(I) + \Omega_{g(e)}(I) \left(n + \frac{1}{2} \right) - \mathcal{E}_{g(e)}^{anh}(I) \left(n^2 + n + \frac{1}{2} \right), \quad (4.12)$$

где второе слагаемое представляет собой энергию гармонического осциллятора в состоянии с колебательным квантовым числом n , а третье учитывает ангармонические поправки, связанные с последним членом в выражении для потенциальной энергии (4.8). Таким образом, сдвиг частоты, индуцированный полем решетки, возникает как разность осцилляторных энергий (4.12) атома в основном и возбужденном состояниях.

Если предположить, что колебательные квантовые числа n для переходов между часовыми состояниями являются одинаковыми (режим Лэмба-Дике), то сдвиг частоты этого перехода определяется выражением

$$\begin{aligned} \Delta\nu_{cl}^{latt}(I, n) &= \mathcal{E}_e^{vib}(I, n) - \mathcal{E}_g^{vib}(I, n) = \\ &= -\Delta D(I) + \Delta\Omega(I) \left(n + \frac{1}{2} \right) - \Delta\mathcal{E}^{anh}(I) \left(n^2 + n + \frac{1}{2} \right), \end{aligned} \quad (4.13)$$

где:

$$\begin{aligned} \Delta D(I) &= D_e(I) - D_g(I); \\ \Delta\Omega(I) &= \Omega_e(I) - \Omega_g(I); \\ \Delta\mathcal{E}^{anh}(I) &= \mathcal{E}_e^{anh}(I) - \mathcal{E}_g^{anh}(I). \end{aligned} \quad (4.14)$$

Разности (4.14) соответствуют:

1. глубинам потенциальных барьеров (4.9);
2. частотам гармонических осцилляций атома в потенциале (4.8)

$$\Omega_{g(e)}(I) = 2\sqrt{\mathcal{E}^{rec} \left[\alpha_{g(e)}^{dqm}(\omega)I + \beta_{g(e)}(\xi, \omega)I^2 \right]}, \quad (4.15)$$

которые определяются энергиями отдачи фотона $\mathcal{E}^{rec} = k^2/(2M)$ и коэффициентом (4.10) гармонической части потенциала (4.8) (ξ -степень циркулярной поляризации ($-1 \leq \xi \leq 1$));

3. ангармоническим поправкам к колебаниям атомов в ловушке с разделенными потенциальными барьерами оптической решетки

$$\mathcal{E}_{g(e)}^{anh}(I) = \frac{\mathcal{E}^{rec}}{2} \left[1 + \frac{3\beta_{g(e)}(\xi, \omega)I}{\alpha_{g(e)}^{dqm}(\omega)} \right], \quad (4.16)$$

которые соответствуют последнему члену в правой части формулы (4.8).

Разность мультипольных и дипольных поляризуемостей $\alpha_{g(e)}^{dqm}(\omega)$ (вместо суммы $\alpha_{g(e)}^{\Sigma}(\omega) = \alpha_{g(e)}^{E1}(\omega) + \alpha_{g(e)}^{qm}(\omega)$, которая появляется в случае взаимодействия атома с бегущей волной решетки) возникает из-за сдвига на четверть периода как для временной, так и для пространственных переменных между $E1$ - и $(E2 + M1)$ -взаимодействиями атома со стоячей волной оптической решетки [84]. Как следует из уравнений (4.9)-(4.16), зависящие от интенсивности разности энергий, определяющие сдвиг частоты (4.13), могут быть представлены в виде [83, 85]

$$\begin{aligned} \Delta D &= [\alpha_e^{E1}(\omega) - \alpha_g^{E1}(\omega)] I + [\beta_e(\xi, \omega) - \beta_g(\xi, \omega)] I^2; \\ \Delta \Omega &= 2 \left[\sqrt{\alpha_e^{dqm}(\omega) + 2\beta_e(\xi, \omega)I} - \sqrt{\alpha_g^{dqm}(\omega) + 2\beta_g(\xi, \omega)I} \right] \sqrt{\mathcal{E}^{rec}I}; \\ \Delta \mathcal{E}^{anh} &= \frac{3}{2} \mathcal{E}^{rec} \left[\frac{\beta_e(\xi, \omega)}{\alpha_e^{dqm}(\omega)} - \frac{\beta_g(\xi, \omega)}{\alpha_g^{dqm}(\omega)} \right] I. \end{aligned} \quad (4.17)$$

В итоге, сдвиг частоты часового перехода индуцированный лазерным полем решетки с учетом поправок, квадратичных по интенсивности I поля, можно представить в виде [85]

$$\Delta \nu_{cl}^{latt}(n, \xi, I) = c_{1/2}(n)I^{1/2} + c_1(n, \xi)I + c_{3/2}(n, \xi)I^{3/2} + c_2(\xi)I^2. \quad (4.18)$$

Перестраивая частоту излучения оптической решетки в окрестности магической, можно добиться оптимальных значений не зависящих от интенсивности поля коэффициентов $c_i (i = 1/2, 1, 3/2, 2)$, позволяющих достичь минимальных значений сдвига частоты (4.18). Дробные показатели степени у интенсивности I в формуле (4.18) возникают из-за корневой зависимости от I собственных частот (4.15). Например, коэффициент $c_{1/2}$ определяется разностью комбинаций

поляризуемостей $\alpha_{g(e)}^{dqm}(\omega)$. Линейный по I член зависит главным образом от разности электрических дипольных поляризуемостей $\alpha_{g(e)}^{E1}(\omega)$ (существенно меньшая по амплитуде поправка на гиперполяризуемость для линейного по I члена появляется из-за ангармонической поправки в (4.17)). Коэффициенты $c_{3/2}$ и c_2 зависят от разности гиперполяризуемостей $\Delta\beta(\xi, \omega) = \beta_e(\xi, \omega) - \beta_g(\xi, \omega)$ входящих в формулы для собственных частот $\Omega_{g(e)}$ и глубин потенциальных ям $D_{g(e)}$. Гиперполяризуемости помимо частоты лазерной решетки также зависят от поляризации лазерного излучения [86]. Эту зависимость можно представить в виде линейной комбинации тензорных компонент гиперполяризуемости:

$$\beta_{g(e)}(\xi, \omega) = \beta_{g(e)}^{lin}(\omega) + \xi^2 \left[\beta_{g(e)}^{circ}(\omega) - \beta_{g(e)}^{lin}(\omega) \right] \quad (4.19)$$

где: $\beta_{g(e)}^{lin(circ)}$ - гиперполяризуемость для линейной (циркулярной) поляризации поля лазерной решетки. Противоположные знаки величин $\Delta\beta^{lin}$ и $\Delta\beta^{circ}$ обеспечивают существование "магической эллиптичности", которой соответствует "магическая степень циркулярной поляризации"

$$\xi_{mag} = \pm \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{\Delta\beta^{circ}}{\Delta\beta^{lin}}}} \quad (4.20)$$

при которой разность гиперполяризуемостей для часового перехода в (4.19) может обращаться в нуль. Этот эффект имеет место, в частности, на магических длинах волн в атомах иттербия и ртути [85, 87].

4.2.2. Оптические решетки с синей магической длиной волны

Для магической длины волны, соответствующей отталкивающим потенциалам оптической решетки, численные значения дипольной поляризуемости отрицательны, $\alpha_{g(e)}^{E1}(\omega) < 0$, а штарковская энергия - положительна, поэтому положения равновесия атомов находятся вблизи узлов стоячей волны решетки с вектором напряженности электрического поля

$$\mathbf{E}(X, t) = 2\mathbf{E}_0 \sin(kX) \sin(\omega t). \quad (4.21)$$

Пространственная часть оператора взаимодействия атома с полем решетки (4.21) определяется выражением

$$\hat{V}(X) = \hat{V}_{E1} \sin(kX) + (\hat{V}_{E2} + \hat{V}_{M1}) \cos(kX) \quad (4.22)$$

с операторами $E1$ -, $E2$ - и $M1$ -взаимодействий в виде (4.7). Захватывающий потенциал оптической решетки с магической длиной волны учитывающей зависимость от эффектов гиперполяризуемости и ангармонизма, может быть представлен аналогично случаю магической длины волны с красной отстройкой в виде (4.8). Основное преимущество отталкивающего потенциала состоит в том, что области локализации атомов располагаются вблизи узлов стоячей волны решетки, где поле решетки обращается в нуль. Следовательно, эффекты гиперполяризуемости не могут возникать в областях минимума потенциальной энергии и влиять на собственные частоты колебательных уровней:

$$\begin{aligned} U_{g(e)}^{(0)}(I) &\equiv U_{g(e)}^{latt}(X=0, I) = -\alpha_{g(e)}^{qm}(\omega)I \\ \Omega_{g(e)} &= 2\sqrt{-\mathcal{E}^{rec}\alpha_{g(e)}^{dqm}(\omega)I} \end{aligned} \quad (4.23)$$

Энергии колебательных уровней атома в окрестностях узлов стоячей волны с синей магической частотой определяются выражением

$$\mathcal{E}_{g(e)}^{vib}(I, n) = U_{g(e)}^0 + \Omega_{g(e)} \left(n + \frac{1}{2} \right) - \mathcal{E}_{g(e)}^{anh}(I) \left(n^2 + n + \frac{1}{2} \right), \quad (4.24)$$

в котором гиперполяризуемости могут появляться только в ангармонической поправке, внося линейный по интенсивности вклад в энергию колебаний (4.24):

$$\mathcal{E}_{g(e)}^{anh}(I) = \frac{1}{2}\mathcal{E}^{rec} \left[1 - \frac{3\beta_{g(e)}(\omega)I}{\alpha_{g(e)}^{dqm}(\omega)} \right]. \quad (4.25)$$

Разность вибрационных энергий (4.24) определяет сдвиг частоты стандарта:

$$\Delta\nu_{cl}^{latt}(\omega_{mag}, I, n) = \mathcal{E}_e^{vib} - \mathcal{E}_g^{vib} = c_{1/2}(n)I^{1/2} + c_1(n)I, \quad (4.26)$$

где:

$$c_{1/2}(n) = \sqrt{\mathcal{E}^{rec}} \left(\sqrt{-\alpha_e^{dqm}(\omega_{mag})} - \sqrt{-\alpha_g^{dqm}(\omega_{mag})} \right) (2n + 1);$$

$$c_1(n) = -\Delta\alpha^{qm}(\omega_{mag}) + \frac{3\mathcal{E}^{rec}}{2} \left[\frac{\beta_e(\omega_{mag})}{\alpha_e^{dqm}(\omega_{mag})} - \frac{\beta_g(\omega_{mag})}{\alpha_g^{dqm}(\omega_{mag})} \right] \left(n^2 + n + \frac{1}{2} \right).$$

Отсутствие слагаемых, пропорциональных интенсивности I в степени выше первой, существенно упрощает измерение и контроль сдвига (4.26) по сравнению со сдвигом (4.18) в поле решетки с красной магической частотой. Главный вклад в сдвиг частоты часового перехода (4.26), индуцированный полем оптической решетки, описывается вторым членом в правой части уравнения (4.24). Поэтому выбор магической частоты заключается в обеспечении равенства собственных частот колебаний (4.23) атомов в основном и возбужденном состояниях: $\Omega_g = \Omega_e$, которые имеют корневую зависимость от интенсивности лазерного поля I . При таком равенстве коэффициент $c_{1/2}(n)$ может обратиться в нуль, и в результате в выражении (4.26) остается лишь линейная по I зависимость.

4.3. Операционная магическая длина волны

Очевидно, что главный вклад в шатрковскую энергию атома (4.12) в ловушке на магической длине волны определяется $E1$ -поляризуемостью, которая превышает $M1$ - и $E2$ -поляризуемости более чем на шесть порядков. Поэтому различие в магических длинах волн, определяемых формулами (4.2-4.4), может проявляться лишь на уровне шестого десятичного знака. Тем не менее это различие может существенно влиять на численные значения коэффициентов при интенсивностях лазерного поля в целых и дробных степенях и, следовательно, на сдвиг частоты часового перехода (4.18). В данном разделе будут рассмотрены способы определения операционных магических длин волн, минимизирующих индуцируемые полем решетки сдвиги с учетом поляризационно-частотных зависимостей линейных и нелинейных восприимчивостей атомов.

4.3.1. Эквивалентность сдвигов часовых уровней в бегущей волне

Электрическое дипольное ($E1$), электрическое квадрупольное ($E2$) и магнитодипольное ($M1$) взаимодействия атома в поле бегущей волны являются синхронными. Поэтому сдвиг частоты часового перехода в первом порядке по интенсивности поля I определяется суммой дипольных и мультипольных поляризуемостей $\alpha_{g(e)}^{\Sigma}(\omega)$ (4.1). Для того чтобы исключить этот сдвиг, производится настройка частоты поля оптической решетки на магическую частоту $\omega = \omega_{mag}^t$, для которой выполняется условие (4.2). На этой частоте глубина потенциала (4.9) и все коэффициенты в (4.18) имеют ненулевые значения:

$$\begin{aligned} c_{1/2}^t(n) &= -2\Delta\alpha_t^{qm} \sqrt{\frac{\mathcal{E}_t^{rec}}{\alpha_t^{\Sigma}}} \left(n + \frac{1}{2} \right); \\ c_1^t(\xi, n) &= \Delta\alpha_t^{qm} - \frac{3\mathcal{E}_t^{rec}}{2\alpha_t^{\Sigma}} \Delta\beta_t(\xi) \left(n^2 + n + \frac{1}{2} \right); \\ c_{3/2}^t(\xi, n) &= 2\Delta\beta_t(\xi) \sqrt{\frac{\mathcal{E}_t^{rec}}{\alpha_t^{\Sigma}}} \left(n + \frac{1}{2} \right); \\ c_2^t(\xi) &= -\Delta\beta_t(\xi). \end{aligned} \quad (4.27)$$

Где индекс t соответствует бегущей волне. Поправки на эффекты гиперполяризуемости для низших колебательных уровней с $n < 3$ пренебрежимо малы при интенсивностях, необходимых для захвата атомов в ловушку.

4.3.2. Равенство сдвигов часовых уровней в стоячей волне

В стоячей волне оптической решетки атомы охлаждаются до температур $T < \Omega/2 \approx \mathcal{E}^{rec}/k_b \approx 1$ мК, что делает возможным захват атомов в ловушку с наименьшей вибрационной энергией, соответствующей состоянию с колебательным квантовым числом $n = 0$. Исключить корневой по интенсивности поля член в правой части выражения (4.18) можно при выполнении условий

$$\alpha_g^{dqm}(\omega_{mag}^s) = \alpha_e^{dqm}(\omega_{mag}^s) \equiv \alpha_s^{dqm}. \quad (4.28)$$

В этих условиях $c_{1/2}^s = 0$ и сдвиг частоты часового перехода принимает вид

$$\Delta\nu_{cl}^s(\xi, n, I) = c_1^s(\xi, n)I + c_{3/2}^s(\xi, n)I^{3/2} + c_2^s(n)I^2; \quad (4.29)$$

где:

$$\begin{aligned} c_1^s(\xi, n) &= -\Delta\alpha_s^{qm} - \frac{3\mathcal{E}_s^{rec}}{2\alpha_s^{dqm}}\Delta\beta_s(\xi) \left(n^2 + n + \frac{1}{2} \right); \\ c_{3/2}^s(\xi, n) &= 2\Delta\beta_s(\xi) \sqrt{\frac{\mathcal{E}_s^{rec}}{\alpha_s^{dqm}}} \left(n + \frac{1}{2} \right); \\ c_2^s(\xi) &= -\Delta\beta_s(\xi). \end{aligned} \quad (4.30)$$

Индекс s соответствует стоячей волне. Как и в случае бегущей волны, основная поправка к сдвигу определяется линейным по I членом, зависящим главным образом от разности мультипольных поляризуемостей $\Delta\alpha_s^{qm}$.

4.3.3. Равенство дипольных поляризуемостей для часовых переходов

В случае $\alpha_g^{E1}(\omega_{mag}^{E1}) = \alpha_e^{E1}(\omega_{mag}^{E1}) \equiv \alpha_{mag}^{E1}$ поправки первого порядка для глубины потенциала (4.9) являются одинаковыми. Следовательно, главная поправка к коэффициенту c_1 , определяемая в (4.27) и (4.30) разностью мультипольных поляризуемостей $\Delta\alpha_{t(s)}^{qm}$, исчезает, и остается лишь поправка на гиперполяризуемость. Одновременно коэффициент $c_{1/2}^{E1}$ равен лишь половине коэффициента $c_{1/2}^t$ в выражении (4.27). В этом случае коэффициенты в правой части выражения (4.18) могут быть представлены в следующем виде:

$$\begin{aligned} c_{1/2}^{E1}(n) &= -\Delta\alpha_{mag}^{qm} \sqrt{\frac{\mathcal{E}_{E1}^{rec}}{\alpha_{mag}^E}} \left(n + \frac{1}{2} \right); \\ c_1^{E1}(\xi, n) &= -\frac{3\mathcal{E}_{E1}^{rec}}{2\alpha_{mag}^{E1}} \Delta\beta^{E1}(\xi) \left(n^2 + n + \frac{1}{2} \right); \\ c_{3/2}^{E1}(\xi, n) &= 2\Delta\beta^{E1}\xi \sqrt{\frac{\mathcal{E}_{E1}^{rec}}{\alpha_{mag}^E}} \left(n + \frac{1}{2} \right); \\ c_2^{E1}(\xi) &= -\Delta\beta^{E1}(\xi). \end{aligned} \quad (4.31)$$

Таким образом, в случае равных дипольных поляризуемостей коэффициент $c_1^{E1}(\xi, n)$ существенно меньше коэффициента c_1^t для бегущей волны, поскольку

ку вместе с коэффициентами $c_{3/2}^{E1}(\xi, n)$ и $c_2^{E1}(\xi)$ он пропорционален разности гиперполяризуемостей $\Delta\beta^{E1}(\xi)$.

4.4. Влияние эффектов высших порядков на неопределенности стандартов частоты на атомах магния

В последнее время был достигнут прогресс в экспериментальном обнаружении часового перехода ${}^3P_0 - {}^1S_0$ в нейтральных атомах магния и определении магической длины волны $\lambda_{mag} = 468.46$ нм [88], что открывает путь к разработке нового стандарта времени и частоты на атомах магния в оптической решетке. Для того чтобы обеспечить неопределенность частоты ниже 10^{-17} , необходимо оценить роль нелинейных и недипольных эффектов, обусловленных влиянием оптической решетки на сдвиг частоты часового перехода. Охлажденные атомы магния захватываются в оптическую решетку, созданную стоячей волной магической частоты с красной отстройкой - такой выбор является оптимальным для удержания атомов, компенсации штарковского сдвига частоты часового перехода и противодействия разогреванию атомов фотонами оптической решетки.

Основные вклады в сдвиг (4.13) дают разности электрических дипольных поляризуемостей $\Delta\alpha^{E1}(\omega) = \alpha_e^{E1}(\omega) - \alpha_g^{E1}(\omega)$. Эта разность должна обращаться в нуль на "магической частоте" определяемой условием (4.4). Равенство $E1$ -поляризуемостей означает эквивалентность только линейных по интенсивности I членов в выражении (4.9) для глубин потенциальных ям. Однако неизбежная на практике неопределенность магической частоты $\Delta\omega_{mag}$ может вносить соответствующие неопределенности в разности электрических дипольных поляризуемостей, которые входят в ΔD и $\Delta\Omega$ формул (4.17). В частности, эта неопределенность повлияет на коэффициенты $c_{1/2}^{E1}(n) \equiv c_{1/2}(n, \omega_{mag}^d)$ и $c_1^{E1}(n) \equiv c_1(n, \xi, \omega_{mag}^d)$ в выражении (4.18) на магической частоте ω_{mag}^d . Однако,

помимо описанных выше стратегий, существует еще одна возможность уменьшить сдвиг (4.18) - путем настройки лазерной решетки на такую операционную магическую частоту, в которой учитывается зависимость дипольной поляризуемости от частоты лазера [85], [87]. Для этого можно перестроить частоту магической решетки $\omega = \omega_{mag}^d + \Delta\omega_{mag}$ таким образом, чтобы минимизировать коэффициенты $c_{1/2}^{E1}(n)$ и $c_1^{E1}(\xi, n)$ (4.31) с учетом этой зависимости:

$$\begin{aligned} c_{1/2}^{E1}(n) &= \left(\frac{\partial \Delta\alpha_{mag}^{E1}}{\partial \omega} \Delta\omega_{mag} - \Delta\alpha_{mag}^{qm} \left(1 + \frac{1}{2} \right) \right) \sqrt{\frac{\mathcal{E}_{E1}^{rec}}{\alpha_{mag}^E}}; \\ c_1^{E1}(\xi, n) &= -\frac{\partial \Delta\alpha_{mag}^{E1}}{\partial \omega} \Delta\omega_{mag} - \frac{3\mathcal{E}_{E1}^{rec}}{2\alpha_{mag}^{E1}} \Delta\beta^{E1}(\xi) \left(n^2 + n + \frac{1}{2} \right), \end{aligned} \quad (4.32)$$

где $\Delta\alpha_{mag}^{E1} = \alpha_e^{E1}(\omega) - \alpha_g^{E1}(\omega)$ - разность дипольных поляризуемостей часовых уровней на произвольной частоте ω ,

$\frac{\partial \Delta\alpha_{mag}^{E1}}{\partial \omega} = \frac{\partial \Delta\alpha^{E1}(\omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega=\omega_{mag}^d}$ - производная этой разности на магической частоте $\omega = \omega_{mag}^d$.

Таким образом, расстройку $\Delta\omega_{mag}$ можно рассматривать как дополнительный параметр для настройки частоты решеточного лазера, который можно использовать в дополнение к квантовому числу осциллятора n и степени циркулярной поляризации ξ для того, чтобы уменьшить сдвиг, вызванный взаимодействием атома с решеткой до такой величины, которая обеспечит минимально возможную неопределенность частоты стандарта. Для этого параметр $\Delta\omega_{mag}$ следует выбирать таким образом, чтобы обеспечить минимально возможные отклонения сдвига $\Delta\nu_{cl}^{latt}(n, \xi, \Delta\omega_{mag}, I)$ в максимально широком диапазоне рабочих интенсивностей лазера I .

Для получения численного значения сдвига (4.13) должны быть известны $E1$ -, $E2$ -, $M1$ -поляризуемости и гиперполяризуемости на магической частоте. Для описания волновых функций в одноэлектронном приближении был использован метод модельного потенциала Фьюса [56]–[58], с модификациями, введенными для наиболее точного описания состояний валентных электронов $3s^2$ оболочки [56, 85]. Модификации параметров потенциала Фьюса выполнялись также для учета вклада $3s$ электрона в поляризуемость метастабильного ча-

сового состояния $3s3p(^3P_0)$. Результаты расчетов характеристик атома магния представлены в Таблице 4.1. Эти данные позволяют определить оптимальные значения ξ и $\Delta\omega_{mag}$.

Таблица 4.1. Характеристики атома магния в оптической решетке на магической длине волны 468.46 нм.

ν_{clock}	655 (ТГц)
α_{mag}^{E1}	$17.5 \left(\frac{\text{кГц}}{\text{кВт/см}^2} \right)$
α_{mag}^{qm}	$5.48 \left(\frac{\text{МГц}}{\text{кВт/см}^2} \right)$
$\Delta\beta_{mag}^l$	$111 + 5.88\iota \left(\frac{\text{мкГц}}{(\text{кВт/см}^2)^2} \right)$
$\Delta\beta_{mag}^c$	$1735 + 8.69\iota \left(\frac{\text{мкГц}}{(\text{кВт/см}^2)^2} \right)$
$\frac{\partial\Delta\alpha_{mag}^{E1}}{\partial\omega}$	$0.42 \left(\frac{10^{-9}}{\text{кВт/см}^2} \right)$
\mathcal{E}_{E1}^{rec}	37.9 (кГц)

На Рисунке 4.1 представлена зависимость от интенсивности лазера I сдвига часовой частоты в атомах магния, индуцированного влиянием оптической решетки. Неопределенность сдвига, индуцированного взаимодействием атома с полем решетки, из-за неоднородности распределения интенсивности по расположению атомов магния в оптической решетке между 140 и 160 кВт/см² достигает 23 мГц при отстройке магической частоты $\Delta\omega_{mag} = -75$ МГц. Чтобы уменьшить неопределенность $\Delta\nu_{cl}^{latt}$ до уровня 0.5 мГц, относительная неопределенность распределения операционной интенсивности по позициям атомов магния в решетке не должна превышать 2% в окрестности $I = 145$ кВт/см².

4.5. Выводы

В данной главе представлена теория нелинейных, недипольных и ангармонических эффектов, на основе которой получены оценки неопределенности

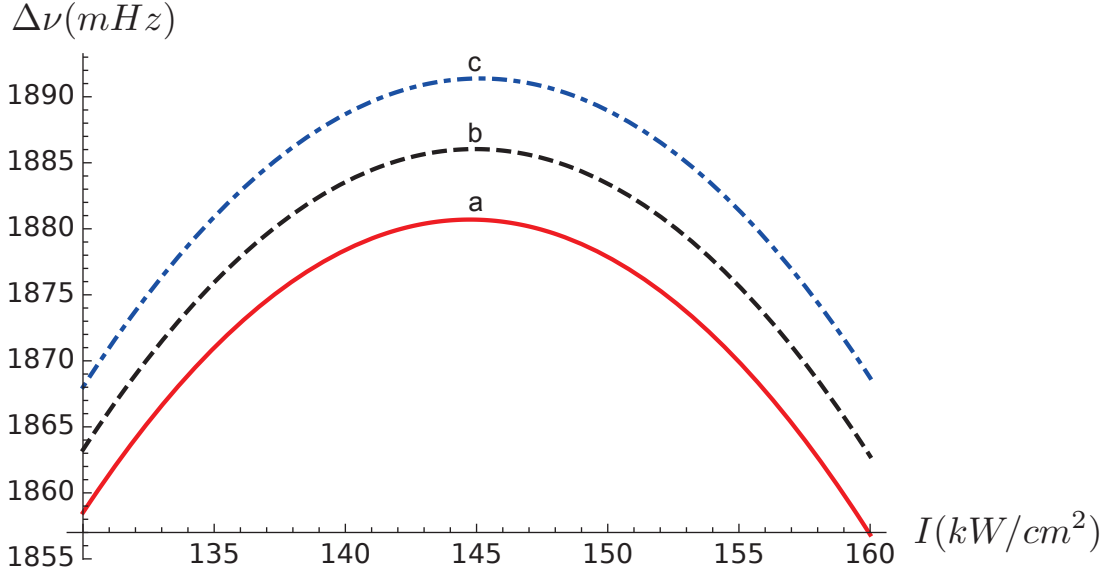


Рис. 4.1. Зависимость от интенсивности лазера сдвига часовой частоты, индуцированного влиянием оптической решетки в атомах магния. Кривая (а) представляет сдвиг магической частоты $\Delta\omega_{mag} = -74.9$ МГц, кривая (b) - $\Delta\omega_{mag} = -75.0$ МГц, кривая (c) - $\Delta\omega_{mag} = -74.9$ МГц.

стандарта частоты, индуцируемые взаимодействием атома с полем оптической решетки магической частоты.

На основе численных значений дипольных и мультипольных поляризуемостей атомов магния, рассчитанных в работах [29, 31], предложена стратегия определения операционной магической длины волны оптической решетки, обеспечивающей минимальные значения неопределенностей.

Для всех трех описанных выше стратегий определения магических длин волн коэффициенты $c_{3/2}$, c_2 пропорциональны $\Delta\beta(\xi)$. Коэффициент при корневой зависимости от интенсивности I исчезает для магической частоты стоячей волны, $c_{1/2}^s = 0$, в то время как для магических частот, определяемых уравнениями (4.2) и (4.4), эти коэффициенты практически одинаковы $c_{1/2}^{E1} \approx 0.5c_{1/2}^t$ и пропорциональны разности мультипольных поляризуемостей $\Delta\alpha_{mag}^{qm}$.

Определены верхние и нижние границы интенсивности поля оптической решетки, обеспечивающие точность измерения частоты стандарта на атомах магния на уровне 17-18-го десятичного знака.

Заключение

В настоящей диссертации проведено теоретическое исследование эффектов межатомного взаимодействия и радиационных процессов в ридберговских атомах, а также эффектов высших порядков во взаимодействии атомов с полем оптической решетки в стандартах частоты на атомах магния. В частности, было изучено ван-дер-ваальсово взаимодействие щелочных атомов в ридберговских состояниях и условия проявления в нем резонансов Ферстера. Полученные характеристики могут оказаться полезными для проектирования и разработки квантовых логических элементов. Получены асимптотические формулы для вероятностей радиационных переходов из циркулярных ридберговских состояний. Этот результат может быть использован для оценки параметров теплового излучения и его влияния на энергии атомных уровней. Помимо этого были определены количественные характеристики эффектов высших порядков во взаимодействии атомов магния с оптической решеткой магической частоты. Учет этих характеристик позволит контролировать точность стандарта частоты на атомах магния.

Основные результаты данной диссертационной работы можно сформулировать следующим образом:

1. Получены аналитические выражения для зависимости постоянной ван-дер-ваальсова взаимодействия двух одинаковых ридберговских атомов от ориентации межатомной оси и орбитальных моментов. Тензорные компоненты постоянной Ван-дер-Ваальса для щелочных атомов в ридберговских состояниях представлены в виде полиномов от главных квантовых чисел. Для S-, P-, D- и F-серий атомов рубидия получены численные значения коэффициентов полиномов.
2. Определены количественные критерии проявления резонансов Ферстера в энергиях ван-дер-ваальсова взаимодействия ридберговских атомов.

3. Получены аналитические выражения для амплитуд радиационных переходов из циркулярных ридберговских состояний, с помощью которых могут быть определены вклады состояний дискретного и непрерывного спектров в сдвиг и уширение ридберговских уровней излучением черного тела. Продемонстрировано быстрое уменьшение относительного вклада удаленных дискретных состояний и континуума в термоиндуцированные сдвиги и уширения ридберговских состояний с ростом главного квантового числа.
4. Получены количественные характеристики неопределенностей частоты часового перехода в атомах магния, индуцируемых взаимодействием атомов с оптической решеткой магической частоты.

Список литературы

1. *Walker, T. G.* Consequences of Zeeman degeneracy for the van der Waals blockade between Rydberg atoms / T. G. Walker, M. Saffman // *Phys. Rev. A.* — 2008. — Mar. — Vol. 77. — P. 032723. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.77.032723>.
2. *Saffman, M.* Quantum information with Rydberg atoms / M. Saffman, T. G. Walker, K. Mølmer // *Rev. Mod. Phys.* — 2010. — Aug. — Vol. 82. — P. 2313–2363. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.82.2313>.
3. *Browaeys, A.* Experimental investigations of dipole–dipole interactions between a few Rydberg atoms / A. Browaeys, D. Barredo, T. Lahaye // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics.* — 2016. — Vol. 49, no. 15. — P. 152001. — <http://stacks.iop.org/0953-4075/49/i=15/a=152001>.
4. *Ryabtsev, I. I.* Applicability of Rydberg atoms to quantum computers / I. I. Ryabtsev, D. B. Tretyakov, I. I. Beterov // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics.* — 2005. — Vol. 38, no. 2. — P. S421. — <http://stacks.iop.org/0953-4075/38/i=2/a=032>.
5. Спектроскопия холодных ридберговских атомов рубидия для применений в квантовой информатике / И. И. Рябцев, И. И. Бетеров, Д. Б. Третьяков и др. // *Усп. физ. наук.* — 2016. — Т. 186, № 2. — С. 206–219. — <https://ufn.ru/ru/articles/2016/2/1/>.
6. Rydberg-blockade controlled-not gate and entanglement in a two-dimensional array of neutral-atom qubits / K. M. Maller, M. T. Lichtman, T. Xia et al. // *Phys. Rev. A.* — 2015. — Aug. — Vol. 92. — P. 022336. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.92.022336>.
7. *Shi, X.-F.* Annulled van der Waals interaction and fast Rydberg quantum gates / Xiao-Feng Shi, T. A. B. Kennedy // *Phys. Rev. A.* — 2017. — Apr. —

- Vol. 95. — P. 043429. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.95.043429>.
8. *Shi, X.-F.* Rydberg quantum gates free from blockade error / Xiao-Feng Shi // *Phys. Rev. Applied.* — 2017. — Jun. — Vol. 7. — P. 064017. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevApplied.7.064017>.
 9. *Qian, J.* Robust quantum switch with rydberg excitations / J. Qian // *Scientific Reports.* — 2017. — Vol. 7, no. 1. — P. 12952. — <https://doi.org/10.1038/s41598-017-13045-4>.
 10. High-fidelity Rydberg quantum gate via a two-atom dark state / D. Petrosyan, F. Motzoi, M. Saffman, K. Mølmer // *Phys. Rev. A.* — 2017. — Oct. — Vol. 96. — P. 042306. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.96.042306>.
 11. Optical control of the resonant dipole-dipole interaction between Rydberg atoms / S. de Léséleuc, D. Barredo, V. Lienhard et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2017. — Aug. — Vol. 119. — P. 053202. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.119.053202>.
 12. Rydberg-atom-based scheme of nonadiabatic geometric quantum computation / P. Z. Zhao, Xiao-Dan Cui, G. F. Xu et al. // *Phys. Rev. A.* — 2017. — Nov. — Vol. 96. — P. 052316. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.96.052316>.
 13. *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. — Aug. — Vol. 107. — P. 093003. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.107.093003>.
 14. An optical lattice clock with accuracy and stability at the 10^{-18} level / B. J. Bloom, T. L. Nicholson, J. R. Williams et al. // *Nature.* — 2014. — Feb. — Vol. 506, no. 7486. — P. 71–75. — Letter. <http://dx.doi.org/10.1038/nature12941>.
 15. A fermi-degenerate three-dimensional optical lattice clock / S. L. Campbell,

- R. B. Hutson, G. E. Marti et al. // *Science*. — 2017. — Vol. 358, no. 6359. — P. 90–94. — <http://science.sciencemag.org/content/358/6359/90>.
16. Ultrastable optical clock with two cold-atom ensembles / M. Schioppo, R. C. Brown, W. F. McGrew et al. // *Nat Photon*. — 2017. — Jan. — Vol. 11, no. 1. — P. 48–52. — Letter. <http://dx.doi.org/10.1038/nphoton.2016.231>.
17. Optical atomic clocks / A. D. Ludlow, M. M. Boyd, J. Ye et al. // *Rev. Mod. Phys.* — 2015. — Jun. — Vol. 87. — P. 637–701. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.87.637>.
18. Comparison of two independent sr optical clocks with 1×10^{-17} stability at 10^3 s / T. L. Nicholson, M. J. Martin, J. R. Williams et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2012. — Dec. — Vol. 109. — P. 230801. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.109.230801>.
19. An atomic clock with 10^{-18} instability / N. Hinkley, J. A. Sherman, N. B. Phillips et al. // *Science*. — 2013. — Vol. 341, no. 6151. — P. 1215–1218. — <http://science.sciencemag.org/content/341/6151/1215>.
20. Cryogenic optical lattice clocks / I. Ushijima, M. Takamoto, M. Das et al. // *Nature Photonics*. — 2015. — Feb. — Vol. 9. — P. 185. — <http://dx.doi.org/10.1038/nphoton.2015.5>.
21. Systematic evaluation of an atomic clock at 2×10^{-18} total uncertainty / T. L. Nicholson, S. L. Campbell, R. B. Hutson et al. // *Nature Communications*. — 2015. — Apr. — Vol. 6. — P. 6896. — Article. <http://dx.doi.org/10.1038/ncomms7896>.
22. Realization of a timescale with an accurate optical lattice clock / C. Grebing, A. Al-Masoudi, S. Dörscher et al. // *Optica*. — 2016. — Jun. — Vol. 3, no. 6. — P. 563–569. — <http://www.osapublishing.org/optica/abstract.cfm?URI=optica-3-6-563>.
23. Frequency comparison of two high-accuracy Al^+ optical clocks / C. W. Chou, D. B. Hume, J. C. J. Koelemeij et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2010. —

- Feb. — Vol. 104. — P. 070802. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.104.070802>.
24. High-accuracy optical clock based on the octupole transition in $^{171}\text{Yb}^+$ / N. Huntemann, M. Okhapkin, B. Lipphardt et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2012. — Feb. — Vol. 108. — P. 090801. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.108.090801>.
25. $^{88}\text{Sr}^+$ 445-THz Single-ion reference at the 10^{-17} level via control and cancellation of systematic uncertainties and its measurement against the SI second / A. A. Madej, P. Dubé, Z. Zhou et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2012. — Nov. — Vol. 109. — P. 203002. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.109.203002>.
26. Single-ion atomic clock with 3×10^{-18} systematic uncertainty / N. Huntemann, C. Sanner, B. Lipphardt et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2016. — Feb. — Vol. 116. — P. 063001. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.116.063001>.
27. Atomic clock with 1×10^{-18} room-temperature blackbody stark uncertainty / K. Beloy, N. Hinkley, N. B. Phillips et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2014. — Dec. — Vol. 113. — P. 260801. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.113.260801>.
28. 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. Ovsianikov // *The European Physical Journal D.* — 2015. — Jan. — Vol. 69, no. 1. — P. 1. — <https://doi.org/10.1140/epjd/e2014-50648-6>.
29. Higher-order effects on uncertainties of clocks of mg atoms in an optical lattice / V. D. Ovsianikov, S. I. Marmo, S. N. Mokhnenko, V. G. Palchikov // *Journal of Physics: Conference Series.* — 2017. — Vol. 793, no. 1. — P. 012020. — <http://stacks.iop.org/1742-6596/793/i=1/a=012020>.
30. Каменский, А. А. Резонансное дисперсионное взаимодействие атомов щел

- лочных металлов в ридберговских состояниях / А. А. Каменский, С. Н. Мохненко, В. Д. Овсянников // *Квантовая электроника*. — 2017. — Т. 47, № 5. — С. 467. — <http://mi.mathnet.ru/qe16610>.
31. Нелинейно-оптические эффекты высшего порядка в оптических решеточных часах / В. Д. Овсянников, С. И. Мармо, С. Н. Мохненко, В. Г. Пальчиков // *Квантовая электроника*. — 2017. — Т. 47, № 5. — С. 412. — <http://mi.mathnet.ru/qe16604>.
32. *Kamenski, A. A.* Asymptotic approximations to the energy of dispersion interaction between rubidium atoms in rydberg states / A. A. Kamenski, S. N. Mokhnenko, V. D. Ovsiannikov // *Journal of Physics Communications*. — 2017. — Vol. 1, no. 1. — P. 015006. — <http://stacks.iop.org/2399-6528/1/i=1/a=015006>.
33. Energy of van der Waals and dipole-dipole interactions between atoms in Rydberg states / A. A. Kamenski, N. L. Manakov, S. N. Mokhnenko, V. D. Ovsiannikov // *Phys. Rev. A*. — 2017. — Sep. — Vol. 96. — P. 032716. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.96.032716>.
34. Thermal shifts and broadening of energy levels in the group II ions / V. V. Chernushkin, I. L. Glukhov, S. N. Mokhnenko et al. // ICONO/LAT Conf. Program. — IWR11. — P. 66. — Moscow, June 18-22, 2013. — Technical Digest ICONO-03. — P. 55–56.
35. *Овсянников, В. Д.* Прецизионная спектроскопия атомов в оптических решетках / В. Д. Овсянников, С. Н. Мохненко, А. В. Щербаков // Сборник тезисов докладов конференции и школы молодых ученых по фундаментальной атомной спектроскопии ФАС-XX 23–27 сентября 2013 г. — Воронеж, Россия. — С. 151.
36. Стандарты частоты нового поколения на основе ионов алюминия и магния / В. В. Чернушкин, Е. А. Никитина, С. Н. Мохненко, В. Д. Овсянников // Сборник тезисов докладов конференции и школы молодых ученых по фундаментальной атомной спектроскопии ФАС-XX 23–27 сентября 2013 г. —

- Воронеж, Россия. – С. 210.
37. 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. Ovsianikov // 6th Conference on Elementary Processes in Atomic Systems. – CEPAS 2014. Contributed papers. Bratislava – 2014. – P. 179–186.
 38. BBR-induced shifts and broadening of states in atoms and ions of alkaline-earth elements / V. D. Ovsianikov, V. G. Palchikov, A. A. Kamenski et al. // 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. Higher-order constraints on precision of optical-lattice clocks of the group II atoms / V. D. Ovsianikov, S. I. Marmo, S. N. Mokhnenko и др. // Материалы VIII Международного симпозиума «МЕТРОЛОГИЯ ВРЕМЕНИ И ПРОСТРАНСТВА» 14-16 сентября 2016. – Санкт-Петербург, Россия. – С. 92–97.
 40. Неопределенности стандарта частоты на ионах алюминия, индуцированные полем ионной ловушки, излучением черного тела и симпатическим ионом / И. Л. Глухов, А. А. Каменский, С. Н. Мохненко и др. // Материалы VIII Международного симпозиума «МЕТРОЛОГИЯ ВРЕМЕНИ И ПРОСТРАНСТВА» 14-16 сентября 2016. – Санкт-Петербург, Россия. – С. 271-281.
 41. Каменский, А. А. Ван-дер-ваальсово взаимодействие атомов рубидия в ридберговских состояниях / А. А. Каменский, С. Н. Мохненко, В. Д. Овсянников // XV съезд по спектроскопии. Сборник тезисов. – Москва 2016. – С. 130-131.
 42. *Le Roy, R. J.* Long-Range Potential Coefficients From RKR Turning Points: C_6 and C_8 for $B(3\Pi_{Ou}^+)$ -State Cl_2 , Br_2 , and I_2 / R. J. Le Roy // *Canadian Journal of Physics*. – 1974. – Vol. 52, no. 3. – P. 246–256. — <http://www>.

nrcresearchpress.com/doi/abs/10.1139/p74-035.

43. Ландау, Л. Д. Теоретическая физика: учебное пособие в 10 т. / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. — 3-е, испр. изд. — М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1989. — Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория).
44. Овсянников, В. Д. Дисперсионное взаимодействие возбужденных атомов / В. Д. Овсянников // *Оптика и спектроскопия*. — 1982. — Т. 53. — С. 600.
45. Angular dependence of the dipole-dipole interaction in a nearly one-dimensional sample of rydberg atoms / Т. J. Carroll, К. Claringbould, А. Goodsell et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2004. — Oct. — Vol. 93. — P. 153001. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.93.153001>.
46. Suppression of excitation and spectral broadening induced by interactions in a cold gas of Rydberg atoms / К. Singer, М. Reetz-Lamour, Т. Amthor et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2004. — Oct. — Vol. 93. — P. 163001. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.93.163001>.
47. Ovsyannikov, V. D. Atomic susceptibilities for the collision-induced polarizability and the corrections to the dispersion forces in the field of a light wave / V. D. Ovsyannikov // *JETP*. — 1982. — Vol. 55. — P. 1010.
48. Observation of dipole-quadrupole interaction in an ultracold gas of rydberg atoms / J. Deiglmayr, Н. Saßmannshausen, P. Pillet, F. Merkt // *Phys. Rev. Lett.* — 2014. — Nov. — Vol. 113. — P. 193001. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.113.193001>.
49. Flannery, M. R. Long-range interaction between polar Rydberg atoms / M. R. Flannery, D. Vrinceanu, V. N. Ostrovsky // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. — 2005. — Vol. 38, no. 2. — P. S279. — <http://stacks.iop.org/0953-4075/38/i=2/a=020>.
50. Effects of electric fields on ultracold Rydberg atom interactions / J. S. Cabral, J. M. Kondo, L. F. Goncalves et al. // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. — 2011. — Vol. 44, no. 18. — P. 184007. — <http://stacks.iop.org/0953-4075/44/i=18/a=184007>.

51. *Варшалович, Д. А.* Квантовая теория углового момента / Д. А. Варшалович, А. Н. Москалёв, В. К. Херсонский. — Л.: Наука, 1975.
52. Dipole-dipole interaction between Rubidium Rydberg atoms / E. Altieri, D. P. Fahey, M. W. Noel et al. // *Phys. Rev. A.* — 2011. — Nov. — Vol. 84. — P. 053431. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.84.053431>.
53. Level shifts of Rubidium Rydberg states due to binary interactions / A. Reinhard, T. Cubel Liebisch, B. Knuffman, G. Raithel // *Phys. Rev. A.* — 2007. — Mar. — Vol. 75. — P. 032712. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.75.032712>.
54. Measurement of the angular dependence of the dipole-dipole interaction between two individual Rydberg atoms at a Förster resonance / S. Ravets, H. Labuhn, D. Barredo et al. // *Phys. Rev. A.* — 2015. — Aug. — Vol. 92. — P. 020701. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.92.020701>.
55. Observation of the stark-tuned Förster resonance between two Rydberg atoms / I. I. Ryabtsev, D. B. Tretyakov, I. I. Beterov, V. M. Entin // *Phys. Rev. Lett.* — 2010. — Feb. — Vol. 104. — P. 073003. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.104.073003>.
56. *Manakov, N. L.* Atoms in a laser field / N. L. Manakov, V. D. Ovsianikov, L. P. Rapoport // *Physics Reports.* — 1986. — Vol. 141, no. 6. — P. 320 – 433. — <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370157386800011>.
57. Effect of long-range forces on Penning ionization / N. L. Manakov, V. D. Ovsiannikov, V. N. Ostrovskiy, V. N. Yastrebkov // *Optics and Spectroscopy.* — 1984. — Vol. 56. — P. 222.
58. *Ovsiannikov, V. D.* Probabilities of radiative dipole transitions of parahelium in an electric field / V. D. Ovsiannikov, A. A. Tarusin, A. A. Kamenski // *Optics and Spectroscopy.* — 2008. — Vol. 104. — P. 181.
59. *Ovsiannikov, V. D.* Higher order effects in dispersion interaction of atoms / V. D. Ovsiannikov, A. V. Guilyarovski, O. Ya. Lopatko // *Molecular*

- Physics*. — 1988. — Vol. 64, no. 1. — P. 111–123. — <http://dx.doi.org/10.1080/00268978800100103>.
60. *Ovsiannikov, V. D.* Regular approach for generating van der Waals C_s coefficients to arbitrary orders / V. D. Ovsiannikov, J. Mitroy // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. — 2006. — Vol. 39, no. 1. — P. 159. — <http://stacks.iop.org/0953-4075/39/i=1/a=013>.
61. Rydberg-Rydberg collisions: resonant enhancement of state mixing and Penning ionization / A. Reinhard, T. Cubel Liebisch, K. C. Younge et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2008. — Mar. — Vol. 100. — P. 123007. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.100.123007>.
62. Quantum mechanical calculation of Rydberg–Rydberg autoionization rates / M. Kiffner, D. Ceresoli, W. Li, D. Jaksch // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. — 2016. — Vol. 49, no. 20. — P. 204004. — <http://stacks.iop.org/0953-4075/49/i=20/a=204004>.
63. *Бейтмен, Г.* Высшие трансцендентные функции / Г. Бейтмен, А. Эрдейи. — М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1973. — Т. I.
64. *Kramida, A.* — NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.3), [Online]. Available: <http://physics.nist.gov/asd> National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD. — 2015.
65. Measurement of absolute transition frequencies of ^{87}Rb to nS and nD Rydberg states by means of electromagnetically induced transparency / M. Mack, F. Karlewski, H. Hattermann et al. // *Phys. Rev. A*. — 2011. — May. — Vol. 83. — P. 052515. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.83.052515>.
66. Precision measurements of quantum defects in the $nP_{3/2}$ Rydberg states of ^{85}Rb / B. Sanguinetti, H. O. Majeed, M. L. Jones, B. T. H. Varcoe // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. — 2009. — Vol. 42, no. 16. — P. 165004. — <http://stacks.iop.org/0953-4075/42/i=16/a=165004>.

67. Millimeter-wave spectroscopy of cold Rb Rydberg atoms in a magneto-optical trap: Quantum defects of the nS , nP , and nD series / W. Li, I. Mourachko, M. W. Noel, T. F. Gallagher // *Phys. Rev. A*. — 2003. — May. — Vol. 67. — P. 052502. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.67.052502>.
68. Rb nF quantum defects from millimeter-wave spectroscopy of cold ^{85}Rb Rydberg atoms / J. Han, Y. Jamil, D. V. L. Norum et al. // *Phys. Rev. A*. — 2006. — Nov. — Vol. 74. — P. 054502. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.74.054502>.
69. *Glukhov, I. L.* Natural lifetimes of excited states in the group II ions / I. L. Glukhov, E. A. Nikitina, V. D. Ovsianikov // *Вестник ВГУ, серия: Физика. Математика*. — 2013. — Т. 2. — С. 33.
70. *Glukhov, I. L.* Lifetimes of Rydberg states in ions of the group II elements / I. L. Glukhov, E. A. Nikitina, V. D. Ovsianikov // *Optics and Spectroscopy*. — 2013. — Vol. 115, no. 1. — P. 9–17. — <http://dx.doi.org/10.1134/S0030400X13070060>.
71. Spectroscopy of an ultracold Rydberg gas and signatures of Rydberg–Rydberg interactions / K. Singer, M. Reetz-Lamour, T. Amthor et al. // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. — 2005. — Vol. 38, no. 2. — P. S321. — <http://stacks.iop.org/0953-4075/38/i=2/a=023>.
72. *Walker, T. G.* Zeros of Rydberg–Rydberg Foster interactions / T. G. Walker, M. Saffman // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. — 2005. — Vol. 38, no. 2. — P. S309. — <http://stacks.iop.org/0953-4075/38/i=2/a=022>.
73. Higher orders of perturbation theory for the stark effect on an atomic multiplet / I. L. Bolgova, V. D. Ovsyanikov, V. G. Pal'chikov et al. // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. — 2003. — Vol. 96, no. 6. — P. 1006–1018. — <http://dx.doi.org/10.1134/1.1591213>.
74. *Paradis, E.* Highly polar states of Rydberg atoms in strong magnetic and weak electric fields / E. Paradis, S. Zigo, G. Raithel // *Phys. Rev.*

- A. — 2013. — Jan. — Vol. 87. — P. 012505. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.87.012505>.
75. *Ovsiannikov, V. D.* Diamagnetic shift and splitting of Rydberg levels in atoms / V. D. Ovsiannikov, S. V. Goossev // *Physica Scripta*. — 1998. — Vol. 57, no. 4. — P. 506. — <http://stacks.iop.org/1402-4896/57/i=4/a=007>.
76. Controlling the interactions of a few cold Rb Rydberg atoms by radio-frequency-assisted Förster resonances / D. B. Tretyakov, V. M. Entin, E. A. Yakshina et al. // *Phys. Rev. A*. — 2014. — Oct. — Vol. 90. — P. 041403. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.90.041403>.
77. *Бетеров, И. М.* Спонтанное и вынужденное излучение ридберговского атома в резонаторе / И. М. Бетеров, П. Б. Лернер // *Усп. физ. наук*. — 1989. — Т. 159, № 12. — С. 665–712. — <http://ufn.ru/ru/articles/1989/12/c/>.
78. *Abramowitz, M.* Handbook of mathematical functions / M. Abramowitz, I. Stegun. — New York: Dover Publications Inc., 1970.
79. *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. Ovsiannikov // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. — 2010. — Vol. 43, no. 12. — P. 125002. — <http://stacks.iop.org/0953-4075/43/i=12/a=125002>.
80. Frequency ratio of Yb and Sr clocks with 5×10^{-17} uncertainty at 150 seconds averaging time / N. Nemitz, T. Ohkubo, M. Takamoto et al. // *Nat Photon*. — 2016. — Vol. 10. — P. 258. — <http://dx.doi.org/10.1038/nphoton.2016.20>.
81. *Колачевский, Н. Н.* Прецизионная лазерная спектроскопия в фундаментальных исследованиях / Н. Н. Колачевский, К. Ю. Хабарова // *Усп. физ. наук*. — 2014. — Т. 184, № 12. — С. 1354–1362. — <http://ufn.ru/ru/articles/2014/12/e/>.
82. Ultrastable optical clock with neutral atoms in an engineered light shift trap /

- H. Katori, M. Takamoto, V. G. Pal'chikov, V. D. Ovsiannikov // *Phys. Rev. Lett.* — 2003. — Oct. — Vol. 91. — P. 173005. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.91.173005>.
83. Multipole, nonlinear, and anharmonic uncertainties of clocks of Sr atoms in an optical lattice / V. D. Ovsiannikov, V. G. Pal'chikov, A. V. Taichenachev et al. // *Phys. Rev. A.* — 2013. — Jul. — Vol. 88. — P. 013405. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.88.013405>.
84. Frequency shifts in an optical lattice clock due to magnetic-dipole and electric-quadrupole transitions / A. V. Taichenachev, V. I. Yudin, V. D. Ovsiannikov et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2008. — Nov. — Vol. 101. — P. 193601. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.101.193601>.
85. Higher-order effects on the precision of clocks of neutral atoms in optical lattices / V. D. Ovsiannikov, S. I. Marmo, V. G. Palchikov, H. Katori // *Phys. Rev. A.* — 2016. — Apr. — Vol. 93. — P. 043420. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.93.043420>.
86. Optical lattice polarization effects on hyperpolarizability of atomic clock transitions / A. V. Taichenachev, V. I. Yudin, V. D. Ovsiannikov, V. G. Pal'chikov // *Phys. Rev. Lett.* — 2006. — Oct. — Vol. 97. — P. 173601. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.97.173601>.
87. Strategies for reducing the light shift in atomic clocks / Hidetoshi Katori, V. D. Ovsiannikov, S. I. Marmo, V. G. Palchikov // *Phys. Rev. A.* — 2015. — May. — Vol. 91. — P. 052503. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.91.052503>.
88. Towards a Mg lattice clock: observation of the $^1S_0-^3P_0$ transition and determination of the magic wavelength / A. P. Kulosa, D. Fim, K. H. Zipfel et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2015. — Dec. — Vol. 115. — P. 240801. — <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.115.240801>.