

## ВРЕМЯ ЖИЗНИ РИДБЕРГОВСКОГО АТОМА

В. Д. Овсянников, И. Л. Глухов

*Воронежский государственный университет*

Метод модельного потенциала Фьюса использован для расчета времени жизни по отношению к спонтанным переходам  $s$ -,  $p$ -,  $d$ -,  $f$ -серий ридберговских состояний атомов гелия и щелочных металлов. Предлагается асимптотическая аппроксимация времени жизни в виде кубического полинома относительно эффективного главного квантового числа  $\nu$  высоковозбужденного состояния. Получены коэффициенты полиномов, определяющих время жизни высоковозбужденных уровней в широкой области значений  $\nu$  от 10 до 1000 с относительной погрешностью не более 1 %.

### ВВЕДЕНИЕ

Стремительное развитие нанотехнологий требует прецизионных знаний структуры простейших объектов — атомов и молекул. Оптические свойства энергетических уровней являются важнейшими характеристиками таких объектов. Для изучения возможностей манипулирования атомарной системой наряду с энергией связи необходимо знание энергетических ширин, определяющих время жизни конкретных состояний. В связи с разработкой квантовых информационных систем [1], [2] и частотно-временных стандартов нового поколения [3] особую роль в последние годы приобретают долгоживущие, в частности, ридберговские состояния [4].

Время жизни ридберговских состояний изолированного атома ограничено возможностью спонтанного радиационного перехода в состояния с меньшей энергией и резко возрастает с увеличением эффективного главного квантового числа  $\nu_{nlj}$ , определяющего энергию уровня  $|nlj\rangle$  с фиксированными значениями главного квантового числа  $n$ , орбитального  $l$  и полного  $j$  моментов (используется атомная система единиц,  $e = m = \hbar = 1$ )

$$E_{nlj} = -\frac{1}{2} \frac{Z^2}{\nu_{nlj}^2}. \quad (1)$$

Возрастание времени жизни  $\tau_{nlj}$  с ростом  $\nu_{nlj}$  связано с быстрым уменьшением обратной величины — суммарной вероятности радиационного перехода  $A_n$  в наиболее низкие по энергии состояния  $|n'l'j'\rangle$  дипольно доступные для данного уровня. Этот спад вероятности, которую можно представить в виде [5] (квантовые числа  $l$  и  $j$  опущены для краткости)

$$A_n = \frac{1}{\tau_n} = \sum_{n'} A_{nn'} = \frac{4}{3} \alpha^3 \sum_{n'} \omega_{nn'}^3 |M_{nn'}|^2, \quad (2)$$

обусловлен быстрым убыванием матричных элементов дипольных переходов

$$M_{nn'} = \langle nlj | \hat{\mathbf{D}} | n'l'j' \rangle \propto \nu_{nlj}^{-3/2}$$

и не может быть скомпенсирован появлением дополнительных каналов распада в близлежащие по энергии состояния. Несмотря на быстрый рост матричного элемента  $M_{nn'} \propto \nu_{nlj}^2$  для переходов между ближайшими ридберговскими состояниями с  $\nu_{nlj} \approx \nu_{n'l'j'} \gg 1$ , соответствующие вероятности (2) убывают не медленней, чем  $\nu_{nlj}^{-5}$ , вследствие малой разности энергий начального и конечного уровней  $\omega_{nn'} = E_{nlj} - E_{n'l'j'} \propto \nu_{nlj}^{-3}$ . Таким образом, доминирующий вклад в сумму по конечным состояниям с энергией  $E_{n'l'j'}$  ниже энергии начального состояния  $E_{nlj}$  дают переходы на один или несколько самых низких уровней  $|n'l'j'\rangle$  с практически независимыми от  $\nu_{nlj}$  частотами  $\omega_{nn'}$  и убывающими матричными элементами переходов  $M_{nn'}$ .

В связи с интенсивными исследованиями радиационных свойств атомов в ридберговских состояниях возникает необходимость получения простых аппроксимационных формул для быстрых и надежных оценок времени жизни состояний с большими значениями эффективного главного квантового числа  $\nu_{nlj}$ . В литературе можно найти ряд асимптотических (для  $\nu_{nlj} \gg 1$ ) формул вида (см., например, [6]—[8])

$$\tau_{nlj} = C_{lj} \nu_{nlj}^\alpha, \quad (3)$$

где практически для всех атомных уровней показатель степени  $\alpha \approx 3$ , а коэффициент  $C_{lj}$  существенно различен для разных атомов, а также для разных серий (значений  $l$  и  $j$ ) ридберговских состояний одного и того же атома.

Однако все приближенные формулы типа (3), работающие лишь в небольшой области численных значений главного квантового числа  $\nu$  (обычно  $\nu = 10 \div 30$  [6]), становятся весьма неточными при увеличении  $\nu$  до нескольких десятков и вовсе неприменимы в области  $\nu > 100$ . Знание же времен жизни очень высоких состояний становится актуальным не только в связи с расширившимися в последние годы возможностями заселения таких состояний с помощью перестраиваемых лазеров, но и в связи с заметным влиянием на такие состояния теплового излучения окружающих атом объектов, в частности, стенок контейнера и лабораторного оборудования. Тепловое излучение не только увеличивает вероятность радиационного распада возбужденных уровней, делая переходы в нижние состояния вынужденными, но и индуцирует переходы в состояния с большей энергией, в том числе и в состояния непрерывного спектра, приводя к ионизации атома. Вынужденные переходы под действием теплового излучения могут приводить к заметному уменьшению времени жизни конкретного состояния, ускоряя перераспределение населенностей ридберговских уровней атома и существенно затрудняя контроль селективно заселенных состояний. В этой связи становится важным знание вкладов различных радиационных процессов как индуцированных, так и спонтанных, их зависимостей как от эффективного главного квантового числа, так и от температуры окружающей атом среды.

Возможность отделить воздействие окружающего излучения от спонтанного радиационного распада тесно связана с возможностью получения точной оценки естественного радиационного времени жизни, которое соответствует уединенному атому при абсолютном нуле температуры  $T = 0$  К. Возросшие в последние годы возможности охлаждения атомов до сверхнизких температур и длительного удержания в магнито-оптических ловушках создают необходимые условия для экспериментальных измерений этой важной оптической характеристики сильно возбужденных состояний с большими главными квантовыми числами  $n \geq 100$ .

В настоящей работе предложена асимптотическая аппроксимационная формула для радиационного времени жизни изолированного атома в виде кубического полинома относительно эффективного главного квантового числа  $\nu$ :

$$\tau_{nj} = \sum_{k=0}^3 a_k \nu_{nj}^k. \quad (4)$$

Численная проверка для атомов орто- и парагелия и щелочных металлов показала, что такое полиномиальное приближение с коэффициентами, подобранными по численным данным для времени жизни состояний с  $\nu = 20 \div 30$ , работает с точностью не хуже 1 % в диапазоне  $\nu = 10 \div 1000$ .

В расчетах использован метод модельного потенциала Фьюса, впервые примененный для щелочных атомов в 1971 г. Саймонсом [9] и широко использовавшийся при изучении эффектов взаимодействия атомов с внешними полями в высших порядках теории возмущений [10]—[12].

## 1. АНАЛИТИЧЕСКИЕ ВЫРАЖЕНИЯ ДЛЯ РАСЧЕТА ВРЕМЕНИ ЖИЗНИ ИЗОЛИРОВАННОГО АТОМА

Простое аналитическое выражение для времени жизни ридберговского уровня атома при условии, что основную роль в уширении играет тепловое излучение, получено достаточно давно [14]. Однако это выражение применимо лишь к состояниям, энергия связи которых не превышает тепловой энергии  $|E_n| < kT$ . В этом случае вынужденные переходы под действием теплового излучения в ближайšie по энергии состояния дискретного и непрерывного спектра вносят решающий вклад в суммарную вероятность радиационных переходов. Вывод этой формулы основан на использовании приближенного выражения для распределения Планка, позволяющего выполнить суммирование по конечным состояниям в аналитическом виде. Однако в таком расчете не учитывается вклад спонтанных переходов и некорректно учитывается вклад переходов с большими энергиями излучаемого или поглощаемого фотона  $\hbar\omega \geq kT$ . При низких температурах и для не очень высоких уровней с энергией связи  $|E_n| \geq kT$  такое приближение оказывается несправедливым. Поэтому появляется необходимость получения простых аналитических формул для численных расчетов вероятностей как спонтанных, так и индуцированных тепловым излучением переходов при произвольных соотношениях между энергией уровня и тепловой энергией.

Трудности расчетов вероятностей радиационных переходов в многоэлектронных атомах связаны с невозможностью записать волновую

функцию начального и конечного состояний в аналитическом виде. Тем не менее, для преодоления этих трудностей можно воспользоваться одноэлектронным приближением, в котором спектр оптических возбуждений связывается с переходами самого внешнего, валентного, электрона. Состояния валентного электрона описываются в водородоподобном приближении по методу квантового дефекта (МКД) с помощью кулоновских волновых функций. Основная трудность этого приближения связана с записью волновой функции радиального движения, которое становится необходимым для расчета радиального матричного элемента  $R_{nn'} = \langle n'l'j' | r | nlj \rangle$  в (2) после вычисления интеграла по угловым переменным:

$$|M_{nn'}|^2 = (2j' + 1) l_{>} \begin{Bmatrix} 1 & l & j \\ S & j' & l' \end{Bmatrix}^2 |R_{nn'}|^2, \quad (5)$$

где  $S$  — спин электронной оболочки атома,  $l_{>} = (l + l' + 1) / 2$  — большее из значений орбитального момента начального и конечного состояний,  $l$  и  $l'$ ; здесь использовано стандартное обозначение  $6j$ -символа алгебры угловых моментов [15]. Параметры радиальной волновой функции  $\langle r | nlj \rangle$  в приближении МКД определяются из спектральных данных для конкретного атома. Формально такое приближение применимо лишь в асимптотической области, т. е. для больших расстояний электрона от ядра. Тем не менее, составленные с помощью волновых функций МКД таблицы радиальных матричных элементов электродипольных и квадрупольных переходов (см., например, [5]) успешно применялись в расчетах радиационных амплитуд и электромагнитных восприимчивостей, в том числе и многофотонных [11], в атомах щелочных металлов и в возбужденных состояниях инертных газов. Попытки применить МКД к расчетам времени жизни возбужденных состояний не имели успеха [16], особенно в тяжелых атомах, поскольку произведение  $\omega_{nn'}^3 |M_{nn'}|^2$  в формуле (2) эквивалентно произведению матричного элемента оператора импульса на матричный элемент оператора производной от потенциала [17]. Очевидно, что правильное значение таких матричных элементов с помощью волновых функций МКД получить невозможно, поскольку главный вклад в них дает окрестность начала координат, т. е. область, где эти функции неприменимы. В этой связи расчет вероятностей радиационных переходов, в отличие от расчета элек-

тромагнитных восприимчивостей, требует существенной модификации волновой функции, учитывающей влияние электронов атомного остова на некулоновскую добавку к потенциалу, действующему в атоме на валентный электрон.

Такая модификация присутствует, например, в модельном потенциале Фьюса, одновременно учитывающем действие поляризационного потенциала на состояния с большими орбитальными квантовыми числами  $l$  и действие принципа Паули, “вытесняющего” из кора валентный электрон в состояниях с малыми  $l$  [9]. При этом радиальное уравнение Шредингера с модельным потенциалом Фьюса имеет решение, которое можно записать с помощью конфлюэнтной гипергеометрической функции  ${}_1F_1(a; c; x)$  в виде

$$\langle r | nlj \rangle = \frac{2Z^{3/2}}{v_{nlj}^2} \sqrt{\frac{(2\lambda + 2)_{n_r}}{n_r! \Gamma(2\lambda + 2)}} \left( \frac{2Zr}{v_{nlj}} \right)^\lambda \times \exp\left(-\frac{Zr}{v_{nlj}}\right) \cdot {}_1F_1\left(-n_r; 2\lambda + 2; \frac{2Zr}{v_{nlj}}\right), \quad (6)$$

где эффективное главное квантовое число  $v_{nlj}$  определяется из спектральных данных для конкретного атома в соответствии с уравнением (1) и связано с эффективным орбитальным  $\lambda$  и радиальным  $n_r$  квантовыми числами соотношением  $v_{nlj} = n_r + \lambda + 1$ ;  $Z$  — заряд остаточного иона (для нейтрального атома  $Z = 1$ ); здесь использованы стандартные обозначения для гамма-функции  $\Gamma(x)$  и символа Похгаммера  $(a)_n = a \cdot (a + 1) \cdot \dots \cdot (a + n - 1)$  [18]. Очевидно, это решение удовлетворяет стандартным требованиям непрерывности, однозначности и ограниченности на всей числовой полуоси, представляющей расстояния электрона от атомного ядра  $r \in [0, \infty)$ , и не требует введения дополнительного параметра — радиуса обрезания, характерного для МКД. Поэтому после интегрирования радиальный матричный элемент в (5) можно представить в аналитическом виде с помощью обобщенной гипергеометрической функции двух переменных  $F_2$  [18]:

$$R_{nn'} = \frac{1}{4Z} \frac{\Gamma(\lambda + \lambda' + 4)}{\sqrt{\Gamma(2\lambda + 2)\Gamma(2\lambda' + 2)}} \times \sqrt{\frac{(2\lambda + 2)_{n_r}}{n_r!} \frac{(2\lambda' + 2)_{n'_r}}{n'_r!}} \left( \frac{2v'}{v + v'} \right)^{\lambda_1 + 2}} \times \left( \frac{2v}{v + v'} \right)^{\lambda_1 + 2} F_2\left(\lambda + \lambda' + 4; -n_r, -n'_r; 2\lambda + 2, 2\lambda' + 2; \frac{2v'}{v + v'}, \frac{2v}{v + v'}\right), \quad (7)$$

где штрихованные величины относятся к конечному, нештрихованные — к начальному состоянию.

## 2. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ

Основную трудность в расчете матричного элемента (7) представляет численная оценка обобщенной гипергеометрической функции [18]

$$F_2(a; -n_1, -n_2; c_1, c_2; x_1, x_2) = \sum_{k_1=0}^{n_1} \sum_{k_2=0}^{n_2} \frac{(a)_{k_1+k_2} (-n_1)_{k_1} (-n_2)_{k_2}}{(b_1)_{k_1} k_1! (b_2)_{k_2} k_2!} x_1^{k_1} x_2^{k_2}. \quad (8)$$

Несмотря на то, что этот объект представляет из себя сумму конечного числа знакопеременных слагаемых, при больших значениях радиальных квантовых чисел начального и/или конечного состояния  $n_r, n'_r$  слагаемые этой суммы могут намного порядков превосходить результат суммирования, что приводит к быстрой потере точности. Поэтому для численного расчета бывает выгодно провести предварительные преобразования, воспользовавшись записью  $F_2$  в виде суммы гипергеометрических функций Гаусса  ${}_2F_1$ :

$$F_2(a; -n_1, -n_2; c_1, c_2; x_1, x_2) = \sum_{k_1=0}^{n_1} \frac{(a)_{k_1} (-n_1)_{k_1}}{(b_1)_{k_1} k_1!} x_1^{k_1} {}_2F_1(a + k_1, -n_2; c_2; x_2). \quad (9)$$

Для снижения потерь точности в расчетах функций  ${}_2F_1$ , которые в этом выражении также являются полиномами, выгодно использовать рекуррентные соотношения Гаусса, связывающие три функции со смежными значениями параметров [18]. Несмотря на значительные упрощения, позволяющие избежать суммирования больших по модулю величин с противоположными знаками, для устранения возможности потери точности из-за большого количества операций необходимо повышать точность представления промежуточных числовых величин. Для переходов между состояниями с главными квантовыми числами  $n \approx 150$  достаточна точность представления с 50—60 десятичными знаками.

Результаты численных расчетов хорошо аппроксимируются кубическими полиномами (4), коэффициенты которых определяются стандартными процедурами, имеющимися в арсенале современного компьютерного математического обеспечения, по численным значениям времени жизни, рассчитанным методом модельного потенциала для состояний с эффективными главными квантовыми числами в области значений от 20 до 30. Поэтому все численные результаты удобно представить в виде коэффициентов кубического полинома (4), которые приводятся в табл. 1—4. Точность аппроксимации контролировалась расчетами времени жизни состояний с  $\nu = 150 \div 200$ , относительное отклонение для которого не превысило 0.2 %.

Таблица 1

Коэффициенты аппроксимационного полинома (4) для времени жизни высоковозбужденных ( $2^{S+1}$ )L-состояний изолированного атома гелия

Состояния	$a_{s+}$ , нс	$a_{s-}$ , нс	$a_1$ , нс	$a_0$ , нс
$^1S$	0.9496875	0.1799373	9.790723	-8.3412
$^3S$	0.7665364585	0.0701111	5.989769	-6.09584
$^1P$	0.053948	-0.0051343	0.190933	-0.60138
$^3P$	1.240286459	0.4597556	12.076747	15.31219
$^1D$	0.5422395834	0.03510759	2.338687	-11.92615
$^3D$	0.4349739583	-0.00096045	2.808420	-18.94227
$^1F$	1.02421875	0.18732815	5.978294	-32.99105
$^3F$	1.018958333	0.47242518	-1.692073	35.28173

Таблица 2

Коэффициенты аппроксимационного полинома (4) для времени жизни высоковозбужденных  $^2L$ -состояний изолированного атома лития

Состояния	$a_{s+}$ , нс	$a_{s-}$ , нс	$a_1$ , нс	$a_0$ , нс
$^2S$	0.847810	-0.0076810	4.212993	-1.2407
$^2P$	2.724718450	1.0957340	51.241047	-50.0884
$^2D$	0.4606546875	0.04499752	1.537013	-5.2165
$^2F$	1.014750	0.13860	6.96440	-39.9548

Таблица 3

Коэффициенты аппроксимационного полинома (4) для времени жизни высоковозбужденных  $^2L$ -состояний изолированного атома натрия

Состояния	$a_3$ , нс	$a_2$ , нс	$a_1$ , нс	$a_0$ , нс
$^2S$	1.505159166	-0.28870622	5.0664376	-8.57063
$^2P$	17.89114708	20.732378	-296.0917	-1793.904
$^2D$	0.8838958332	0.0467896	4.63098	-39.68698
$^2F$	0.9965664582	0.18013501	5.8177184	-29.7798

Таблица 4

Коэффициенты аппроксимационного полинома (4) для времени жизни высоковозбужденных  $^2L_j$ -состояний изолированного атома калия

Состояния	$a_3$ , нс	$a_2$ , нс	$a_1$ , нс	$a_0$ , нс
$^2S_{1/2}$	1.504945184	-0.1456169	5.35035	5.5095
$^2P_{1/2}$	3.824330558	-0.7797904	1.36938	121.7968
$^2P_{3/2}$	3.790487502	-0.9395823	5.50022	80.4879
$^2D_{3/2}$	6.942261150	4.2411763	133.21504	-526.7045
$^2D_{5/2}$	7.008537795	3.4155478	164.90145	-786.7839
$^2F_{5/2}$	0.6885789585	-0.0494142	7.04189	-35.6136
$^2F_{7/2}$	0.685935279	0.1123783	3.17179	-4.7625

Кроме того, правильность аппроксимации подтверждается малостью абсолютного значения коэффициента  $a_2$  по сравнению с  $a_3$ , а также малостью абсолютного значения отношения  $a_4/a_3$  при попытке использовать для аппроксимации полином четвертого порядка. Кроме того, для контроля точности использовалось сравнение коэффициентов, полученных интерполяционным методом, и коэффициентов, полученных по методу наименьших квадратов.

Следует отметить, что существуют и другие методы расчета радиальных матричных элементов, в частности, квазиклассическое приближение для метода квантового дефекта, выражающее матричный элемент через функции Ангера [19]. Однако точность квазиклассического приближения быстро убывает с возрастанием разности главных квантовых чисел начального и конечного состояний, а для переходов из ридберговского состояния в низшие по энергии состояния, дающих основной вклад в суммарную вероятность распада (2), квазиклассическое приближение вообще неприменимо. Поэтому метод модельного потенциала является, по существу, единственным методом, позволяющим записать все матричные элементы суммы (2) в замкнутом виде и использовать для их расчета один и тот же алгоритм.

### 2.1. ВРЕМЯ ЖИЗНИ РИДБЕРГОВСКИХ СОСТОЯНИЙ АТОМОВ ГЕЛИЯ

Для проверки применимости метода модельного потенциала к расчету времени жизни

атомных уровней мы провели сравнение рассчитанных с помощью (7) значений сил осцилляторов дипольных переходов между  $S$ - и  $P$ -состояниями атомов парагелия и ортогелия

$$f(nS \rightarrow n'P) = \frac{2}{3} \omega_{nn'} |R_{nn'}|^2$$

с наиболее достоверными данными, имеющимися в литературе [7]. Различие для переходов между возбужденными состояниями составило не более 3—5 %. Для переходов с участием основного состояния, для которого модельные функции (6) наименее точно описывают волновую функцию, силы осцилляторов оказываются завышенными на 7—8 %.

Расчет времени жизни возбужденных состояний относительно спонтанного распада, т. е. при отсутствии теплового излучения (при абсолютном нуле температуры), дает результаты, совпадающие с экспериментальными данными в пределах ошибок измерений. По сравнению с данными теоретического расчета [7], численно учитывающего межэлектронное корреляционное и спин-орбитальное взаимодействия, а также поляризацию остова, имеет место некоторое (на 5—6%) завышение времени жизни для синглетных  $S$ - и триплетных  $P$ -состояний и настолько же занижение для триплетных  $S$ - и синглетных  $P$ -состояний. Результаты расчетов для  $D$ - и  $F$ -состояний практически точно совпадают с данными численных расчетов работы [7], а также с экспериментальными данными. Здесь

сказывается отмеченная выше важность правильного описания волновых функций на малых расстояниях: для переходов с участием проникающих внутрь атомного кора  $S$ -орбит важное значение имеет корректировка волновых функций в окрестности начала координат. Вклад такой корректировки для  $F$ - и  $D$ -состояний несущественен.

Результаты расчетов времени жизни как синглетных, так и триплетных высоковозбужденных состояний гелия относительно спонтанных переходов представлены в табл. 1 в виде коэффициентов кубического полинома (4), который воспроизводит результаты расчетов по методу модельного потенциала в области значений главных квантовых чисел от 10 до 1000 с относительной погрешностью не более 1 %.

Из данных табл. 1 следует, что время жизни синглетных  $n^1S$ - и триплетных  $n^3P$ -состояний изолированных атомов с  $n = 930$  достигает 1 с, а самыми короткоживущими являются синглетные  $n^1P$ -состояния (время жизни при  $n = 930$ , составляет 43 мс), имеющие большую вероятность распада в основное состояние. Отметим, что полиномы с коэффициентами из таблицы, аппроксимирующие времена жизни, хорошо отражают кубическую асимптотику  $\tau = Av^3$  и в то же время с большой точностью воспроизводят отличие экспериментальных и теоретических значений времени жизни от этого закона, наблюдавшееся другими авторами при невысоких значениях главного квантового числа  $n > 30$  [6, 7].

## 2.2. ВРЕМЯ ЖИЗНИ РИДБЕРГОВСКИХ СОСТОЯНИЙ АТОМОВ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ

Применение модельного потенциала к щелочным атомам было успешным в расчетах электромагнитных восприимчивостей высших порядков [10]—[13], в которых матричные элементы не умножаются, а делятся на частоту перехода или на ее разность с частотой внешнего возмущения. В этом случае поведение волновой функции в области малых расстояний практически не влияет на результат численного расчета. Для вероятности же перехода поведение волновой функции внешнего электрона в окрестности ядра играет важное значение. Поэтому с помощью кулоновского приближения вполне достоверные значения времени жизни можно получить только для легчайшего из щелочных атомов — лития, имеющего во внутрен-

ней оболочке только два электрона в  $1s$ -состоянии.

В атомах натрия внутренних  $s$ -оболочек уже две —  $1s^2$  и  $2s^2$ , наряду с которыми появляется и полностью заполненная оболочка  $2p^6$ , существенно искажающая потенциал в начале координат по сравнению с кулоновским. Тем не менее, полученные с помощью метода модельного потенциала Фьюса численные значения времени жизни  $s$ -,  $d$ - и  $f$ -состояний валентного электрона хорошо согласуются с известными из литературы данными [6, 16]. Поэтому приведенные в табл. 3 значения коэффициентов кубического полинома, воспроизводящего результаты численных расчетов для состояний с главными квантовыми числами  $n = 10 \div 1000$  с погрешностью не более 1 %, вполне могут быть использованы для достоверной оценки времени жизни изолированного атома в произвольных ридберговских состояниях. Для  $3p$ - и  $4p$ -состояний модельный потенциал также дает близкие к литературным значения  $\tau_{np}$ . При  $n \geq 5$  появляется расхождение, связанное с неточностью выражения (6) при расчете численного значения, дающего основной вклад в сумму (2) матричного элемента  $\langle 3s | r | np \rangle$  из-за неправильного поведения волновой функции  $np$ -состояния в области тех значений  $r$ , при которых волновая функция  $3s$ -состояния заметно отличается от нуля. Заниженное значение этого матричного элемента приводит к завышенному значению времени жизни  $np$ -состояния, превышающему литературные данные [16] на 40—50 %. Отмеченная неточность отражается и на коэффициентах интерполяционного полинома. Как видно из табл. 3, именно для  $np$ -серии отношение  $a_3/a_2$  превышает единицу, даже если интерполяцию строить по численным значениям  $\tau_{np}$  для  $n = 30 \div 40$ .

В атомах калия спин-орбитальное расщепление возбужденных состояний существенно влияет на численные значения матричных элементов. Поэтому в расчетах необходимо учитывать тонкую структуру как начального, так и конечного состояний. Поэтому время жизни зависит от полного момента подуровня тонкой структуры. Эта зависимость в атомах калия весьма слабая, как это видно из численных значений старших коэффициентов кубического полинома  $a_3$ , имеющих близкие значения для подуровней с  $j = l \pm 1/2$ . Тем не менее, некоторое различие все же остается заметным для не

слишком высоких состояний, для которых важен вклад слагаемых второго, первого и нулевого порядков в кубический полином (4). Рассчитанные с помощью модельного потенциала значения времени жизни  $nd$ -состояний в полтора-два раза превышают известные из литературы данные других теоретических расчетов и экспериментальных измерений, начиная с  $n=7$ . Этот факт подкрепляется тем, что отношение  $a_2/a_3$  из табл. 4 максимально именно для  $nd$ -серии состояний. Данные для  $3d \div 6d$ , как и данные для  $s$ -,  $p$ - и  $f$ -серий, хорошо согласуются с литературными [16]. Поэтому коэффициенты полинома (4), приведенные в табл. 4 также могут быть использованы, с учетом отмеченной особенности для  $nd$ -состояний, для достоверных оценок времени жизни ридберговских состояний атома К.

Для атомов рубидия и цезия влияние спин-орбитального расщепления еще более значительно. Но даже и при учете тонкой структуры уровней отклонения, рассчитываемых по методу модельного потенциала времен жизни, от литературных данных могут достигать от двух до шести раз. При этом значения  $\tau_{nlj}$  для  $s$ - и  $d$ -состояний завышены, а для  $p$ - и  $f$ -состояний занижены. Это обстоятельство нетрудно объяснить тем, что в этих атомах внутри кора имеются не только заполненные  $s$ - и  $p$ -оболочки, но появляется еще и заполненная  $3d^{10}$ -оболочка в атомах рубидия, к которой в атомах цезия добавляется  $4d^{10}$ -оболочка.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученные значения коэффициентов полинома (4), определяющего время жизни ридберговских состояний с орбитальными моментами от нуля до трех и главными квантовыми числами  $n > 10$ , могут служить надежной базой данных для быстрых оценок естественной ширины сильно возбужденных энергетических уровней в атомах гелия, лития, натрия и калия.

Численные расчеты вероятностей радиационных переходов, выполненные в настоящей работе, оказались полезными еще и потому, что они продемонстрировали необходимость модификации общей методики выбора радиального квантового числа [10] для основных состояний щелочных атомов. Для учета ортогональности волновым функциям внутренних электронов к радиальному квантовому числу основного со-

стояния и всех состояний серии, к которой оно принадлежит, добавляется единица, аналогично триплетным  $S$ -состояниям в атоме гелия [13]. Такой выбор делает волновую функцию основного состояния с эффективным главным квантовым числом  $\nu > 1$  практически совпадающей с асимптотическим (для больших расстояний) разложением функции Уиттеккера метода квантового дефекта, обрывающимся на первом расходящемся в начале координат слагаемом, использованной для построения известных таблиц радиальных матричных элементов Бейтсом и Дамгаард (см., например, [5]).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Валиев К.А.* Квантовые компьютеры и квантовые вычисления / К. А. Валиев // УФН. — 2005. — Т. 175, № 1. — С. 3—39.
2. *Ryabtsev I.I.* Collisional and thermal ionization of sodium Rydberg atoms... / I. I. Ryabtsev, D. B. Tretyakov, I.I. Beterov, N.N. Bezuglov // J. Phys. B. — 2005. — Vol. 38 — P. 17—35.
3. *Takamoto M.* An optical lattice clock / M. Takamoto, F.-L. Hong, R. Higashi, H. Katori // Nature. — 2005. — Vol. 435. — P. 321—324.
4. *Ryabtsev I.I.* Applicability of Rydberg atoms to quantum computers / I. I. Ryabtsev, D. B. Tretyakov, I. I. Beterov. // J. Phys. B, 2005. — Vol. 38. — P. 421—436.
5. *Собельман И.И.* Введение в теорию атомных спектров / И. И. Собельман. — М.: Наука, 1977. — 319 с.
6. *Spencer W.P.* Measurements of lifetimes of sodium Rydberg states in a colled environment / W. P. Spencer, A. G. Vaidyanathan, D. Kleppner, T. W. Ducas // Phys. Rev. A. — 1981. — Vol. 24. — P. 2513—2517.
7. *Theodosiou C.E.* Lifetimes of singly excited states in He I / C. E. Theodosiou // Phys. Rev. A. — 1984. — Vol. 30. — P. 2910—2921.
8. *de Oliveira A.L.* Measurement of Rydberg-state lifetimes using cold trapped atoms / A.L. de Oliveira, M.W. Mancini, V.S. Bagnato, L. G. Marcassa // Phys. Rev. A. — 2002. — Vol. 65. — 031401.
9. *Simons G.* New model potential for pseudopotential calculations / G. Simons // J. Chem. Phys. — 1971. — Vol. 55. — P. 756—761.
10. *Манаков Н.Л.* Атомные расчеты по теории возмущений с модельным потенциалом / Н. Л. Манаков, В. Д. Овсянников, Л. П. Рапопорт // Оптика и спектроскопия. — 1975. — Т. 38. — С. 206—211.
11. *Рапопорт Л.П.* Теория многофотонных процессов в атомах / Л. П. Рапопорт, Б. А. Зон, Н. Л. Манаков. — М.: Атомиздат, 1978. — 183 с.
12. *Manakov N.L.* Atoms in a laser field / N. L. Manakov, V. D. Ovsiannikov, L. P. Rapoport // Physics Reports. — 1986. — Vol. 141, № 6. — P. 319—433.

13. *Derevianko A.* Higher-order Stark effect on an excited helium atom / A. Derevianko, W. R. Johnson, V. D. Ovsiannikov, V. G. Pal'chikov, D. R. Plante, G. von Oppen // *Phys. Rev. A.* — 1999. — Vol. 60. — P. 986—995.
14. *Cooke W.E.* Effects of blackbody radiation on highly excited atoms / W. E. Cooke, T. F. Gallager // *Phys. Rev. A.* — 1980. — Vol. 21. — P. 588—593.
15. *Варшалович Д.А.* Квантовая теория углового момента / Д. А. Варшалович, А. Н. Москалев, В. К. Херсонский. — Л.: Наука, 1975. — 440 с.
16. *Theodosiou C.E.* Lifetimes of alkali-metal-atom Rydberg states / C. E. Theodosiou // *Phys. Rev. A.* — 1984. — Vol. 30. — P. 2881—2909.
17. *Фано У.* Спектральные распределения сил осцилляторов в атомах / У. Фано, Дж. Купер. — М.: Наука, 1972. — 200 с.
18. *Бейтмен Г.* Высшие трансцендентные функции. Т. I. / Г. Бейтмен, А. Эрдейи. — М.: Наука, 1973. — 295 с.
19. *Давыдкин В.А.* Радиационные и поляризационные характеристики ридберговских состояний атомов / В. А. Давыдкин, Б. А. Зон // *Оптика и спектроскопия* — 1981. — Т. 51, вып. 1. — С. 25—30.