

# ТЕПЛОИНДУЦИРОВАННЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ И РАСПАДЫ РИДБЕРГОВСКИХ СОСТОЯНИЙ РУБИДИЯ И ЦЕЗИЯ

И. Л. Глухов, В. В. Чернушкин

*Воронежский государственный университет*

Поступила в редакцию 25.12.2009 г.

**Аннотация.** Исследовалось влияние равновесного теплового излучения на время жизни ридберговских состояний цезия и рубидия. С помощью волновых функций метода модельного потенциала Фьюса были вычислены скорости теплоиндуцированных распадов и возбуждений ридберговских состояний с главным квантовым числом вплоть до  $n = 100$  в  $s$ -,  $p$ -,  $d$ -сериях. Предложена аппроксимация для скоростей теплоиндуцированных распадов и возбуждений с хорошей точностью при  $T = 50\text{—}1500$  К.

**Ключевые слова:** равновесное тепловое излучение, нейтральный атом, вынужденные переходы, ридберговские состояния, дискретный спектр, модельный потенциал Фьюса.

**Annotation.** The effect of the blackbody radiation on lifetime of Rydberg states in caesium and rubidium was investigated. The wavefunctions of Fues' model potential were used for the calculation of thermoinduced decay and excitation rates for Rydberg states with principal quantum number up to  $n = 100$  in  $s$ -,  $p$ -,  $d$ -series. The approximation was proposed for rates of thermoinduced decays and excitations with a good accuracy at  $T = 50\text{—}1500$  K.

**Keywords:** blackbody radiation, neutral atom, induced transitions, Rydberg states, discrete spectrum, Fues' model potential.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Равновесное тепловое излучение, согласно формуле Планка, имеет спектральную плотность энергии при температуре  $T$ :

$$u(\varepsilon) = \frac{1}{\pi^2 c^3} \frac{\varepsilon^3}{\exp[\varepsilon / kT] - 1}, \quad (1)$$

где  $\varepsilon$  — энергия теплового фотона,  $k = 3.1668 \cdot 10^{-6}$  ат. ед./К — постоянная Больцмана,  $c = 137.036$  — скорость света (если не указано иное, здесь и далее в данной работе используется атомная система единиц; температура дается в Кельвинах). Воздействуя на квантовые системы, если  $T \neq 0$ , тепловые фотоны являются универсальным возмущающим фактором.

Одним из наиболее значимых проявлений равновесного теплового излучения является его влияние на ридберговские состояния нейтральных атомов (их уширение и сдвиг), отмеченное [1] вскоре после начала систематических исследований времен жизни ридберговских (высоко возбужденных) состояний нейтральных атомов [2]. Для ридберговских состояний скорости спонтанных распадов стремительно падают [3],

а тепловое излучение, наоборот, входит в резонанс с малыми частотами переходов [4] (например, суммарное уширение тепловым излучением превышает спонтанное в  $d$ -серии рубидия при  $T = 300$  К для  $n > 15$ ). Столь важная особенность теплового излучения стимулировала в первой половине 80-х годов XX-го века систематическое изучение как времен жизни ридберговских состояний при различных температурах [5], так и непосредственно скоростей термоиндуцированных переходов [6]. Одновременно с этим экспериментально [7] и теоретически [8] исследовалась ионизация равновесным тепловым излучением.

Прогресс техники экспериментального получения холодных ридберговских атомов в оптических ловушках вновь поднял интерес к исследованию времен жизни высоковозбужденных состояний в начале 2000-х [9]. Так как ридберговские состояния обладают значительным дипольным моментом, то их взаимодействие стало рассматриваться в качестве механизма изменения состояния квантовой ячейки на основе нейтрального атома [10]. К настоящему времени систематические экспериментальные измерения времен жизни

высоковозбужденных состояний доведены до  $n = 45$  [11].

Уширение ридберговских состояний равновесным тепловым излучением (сокращение их времен жизни в сравнении со случаем  $T = 0$  К, когда распад идет только за счет спонтанных переходов) обуславливается тремя механизмами вынужденных переходов. Первым из них является ионизация [12, 13], чья доля составляет не более 5.3 % при 300 К и 8.1 % при 1500 К от общего уширения тепловыми фотонами. Поэтому основным источником уширения являются переходы в другие состояния дискретного спектра. Эти переходы подразделяются на две группы: вынужденные распады в состояния с меньшей энергией (иногда называемые тушениями) и возбуждения в состояния с большей энергией, каждая из которых имеет связанные только с ней специфические эффекты. При вынужденном распаде появляется новый фотон, который эквивалентен исходному, что облегчает в ансамблях возбужденных атомов формирование сверхизлучения (коллективного спонтанного излучения) [14], а также интенсифицирует его протекание. При термоиндуцированных возбуждениях исходный фотон безвозвратно поглощается, однако электроны, оказавшиеся на более высоком энергетическом уровне (то есть ближе к непрерывному спектру) начинают оказывать все большее влияние как на тепловую, так и другие виды ионизации [15].

В данной работе рассчитываются скорости термоиндуцированных распадов и возбуждений при температурах  $T = 50 - 1500$  К для ридберговских  $s$ -,  $p$ -,  $d$ -состояний вплоть до главного квантового числа  $n = 100$  (с учетом тонкой структуры) нейтральных атомов рубидия и цезия. Проведенные в дипольном приближении расчеты базируются на волновых функциях метода модельного потенциала Фьюса [16] с модификацией для  $s$ -состояний [17]. На основе этих расчетов проведен анализ максимумов скоростей термоиндуцируемых процессов в  $l$ -сериях, дано простое количественное условие для его положения. С целью компактного представления результатов предложена двухступенчатая аппроксимация, обеспечивающая малые отклонения от прямых вычислений для состояний от области максимальных скоростей в серии до  $n = 100$  с возможностью экстраполяции на более высокие ридберговские состояния.

## 2. ДИПОЛЬНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

Так как однородное и изотропное тепловое излучение не меняет симметрию задачи, то разумно рассматривать волновые функции валентных электронов в сферических координатах, где угловая часть с учетом тонкой структуры отделяется наиболее естественно:

$$|b\rangle = R_b(r) |(l_b s_b) j_b\rangle.$$

Здесь  $|(l_b s_b) j_b\rangle$  — угловая часть волновой функции состояния  $|b\rangle$  с орбитальным моментом  $|l_b\rangle$  и полным моментом  $|j_b\rangle$  (при возбуждении единственного валентного электрона в щелочных атомах  $s_b = 1/2$ );  $R_b(r)$  — радиальная часть волновой функции.

В дипольном приближении (при интенсивностях равновесного теплового излучения с температурой  $T = 50 - 1500$  К вклады более высоких мультипольностей крайне малы в сравнении с дипольными каналами) скорость перехода, индуцируемого тепловым излучением при температуре  $T$ , из состояния  $|i\rangle$  с орбитальным моментом  $l_i$  и полным моментом  $j_i$  в состояние  $|f\rangle$  с орбитальным моментом  $l_f$  и полным моментом  $j_f$

$$P_{if} = \frac{4\alpha^3}{3} (2j_i + 1) l_i \left\{ \begin{matrix} l_i & 1/2 & j_i \\ j_f & 1 & l_f \end{matrix} \right\}^2 \times \\ \times \langle R_f(r) | r | R_i(r) \rangle^2 \frac{\varepsilon^3}{\exp(\varepsilon / kT) - 1}, \quad (2)$$

$$\varepsilon = |E_f - E_i|, \quad l_f - l_i = \pm 1, \quad j_f - j_i = 0, \pm 1,$$

где  $\alpha = 1/137.036$  — постоянная тонкой структуры, а полные и орбитальные моменты начальных и конечных состояний связаны 6j-символом [18]. Радиальный матричный элемент представляет собой интеграл

$$\langle R_f(r) | r | R_i(r) \rangle = \int_0^\infty R_f^*(r) r^3 R_i(r) dr. \quad (3)$$

Для вычисления скорости теплоиндуцированных распадов  $P_{nlj}^d$  (возбуждений  $P_{nlj}^e$ ) из состояния  $|i\rangle$  с главным квантовым числом  $n$ , орбитальным моментом  $l$  и полным моментом  $j$  необходимо просуммировать скорости переходов из этого состояния  $|i\rangle$  во все дипольно разрешенные состояния с энергией меньше (больше) исходного.

$$P_{nlj}^d = P_i^d = \sum_{\substack{j_f < E_i \\ j_f}} P_{if}, \\ P_{nlj}^e = P_i^e = \sum_{\substack{j_f > E_i \\ j_f}} P_{if}. \quad (4)$$

Формально при расчете теплоиндуцированных возбуждений суммирование должно распространяться вплоть до  $n_f = \infty$ . Технически этот алгоритм мало реалистичен, так как неограниченное увеличение количества узлов радиальной функции конечного состояния также неограниченно увеличивает точность необходимых расчетов. В данной работе расчет возбуждений непосредственно по формуле (2) при заданной температуре  $T$  доводился до  $n_f = 350$ , а остальные члены оценивались, исходя из предположения  $P_{if} \propto 1/n_f^3$ , которое подтверждается численными расчетами. Это позволило оценить остаток по формуле:

$$\sum_{j_f(n_f > 350)} P_{if} = \frac{A}{350^2}.$$

Коэффициент  $A$  определялся в каждом конкретном случае из поведения  $P_{if}$  при  $n_f = 300 - 350$ . Вклад оцениваемого таким образом остатка не превышает 0,5—0,8 % скорости возбуждения состояний с  $n = 100$ .

### 3. МЕТОД МОДЕЛЬНОГО ПОТЕНЦИАЛА ФЬЮСА

Рубидий и цезий, как и остальные щелочные металлы, имеют один валентный электрон, расположенный над полностью заполненными электронными оболочками атомного остова. Интенсивность теплового излучения при рассматриваемых температурах ( $T = 50 - 1500$  К) недостаточна для возбуждения внутренних электронов. Это позволяет описывать внешний электрон отдельно от остальных, моделируя суммарное поле ядра и экранирующих его заполненных электронных оболочек гамильтонианом близким к водородному.

Модельный потенциал Фьюса представляет некулоновский вклад электронного остова в атомный потенциал в виде  $\sum_{l=0}^{\infty} \frac{B_l \hat{P}_l}{r^2}$ , где  $B_l$  — эмпирический коэффициент, определяемый из энергии уровня, а  $\hat{P}_l$  — проекционный оператор, отбирающий состояния с орбитальным моментом  $l$ . Такое предположение сводит задачу описания валентного электрона к случаю водородоподобного иона с заменой в уравнении на радиальную часть волновой функции орбитального момента  $l$  на эффективный орбитальный момент  $\lambda$ , и радиальная волновая функция для состояния  $|nlj\rangle$  с энергией  $E_{nlj}$  приобретает аналитический вид [16]:

$$R_{nlj}(r) = \frac{2Z^{3/2}}{v_{nlj}^2} \sqrt{\frac{(2\lambda + 2)_{n_r}}{n_r! \Gamma(2\lambda + 2)}} \left( \frac{2Zr}{v_{nlj}} \right)^\lambda \times \exp \left[ -\frac{Zr}{v_{nlj}} \right] {}_1F_1 \left( -n_r; 2\lambda + 2; \frac{2Zr}{v_{nlj}} \right), \quad (5)$$

где  $a_n = a(a+1) \cdot \dots \cdot (a+n-1)$  — символ Похгаммера,  ${}_1F_1(a; b; x)$  — вырожденная (конфлюэнтная) гипергеометрическая функция [19].  $Z$  — заряд атомного остатка (для нейтрального атома, у которого возбуждается один валентный электрон,  $Z = 1$  и далее будет опускаться). Эффективное главное квантовое число  $v_{nlj}$  стандартно связано с энергией состояния:

$$E_{nlj} = -\frac{1}{2v_{nlj}^2}.$$

Радиальное квантовое число  $n_r$  представляет собой число узлов радиальной функции:

$$n_r = n - n_0,$$

где  $n$  — главное квантовое число описываемого состояния,  $n_0$  — главное квантовое число низшего состояния в данной  $l$ -серии для валентного электрона. Для  $s$ -состояний щелочных металлов (в частности, рубидия и цезия) была предложена модификация радиальной волновой функции, которая заключается в добавлении дополнительного узла [17]. Такая модификация уже была успешно применена к расчетам скоростей ионизации ридберговских состояний щелочных атомов и гелия [12]:

$$n_r = n - n_0 + 1.$$

Эффективный орбитальный момент  $\lambda$  однозначно определяется значением  $v$ :

$$\lambda = v - n_r - 1.$$

Таким образом энергия состояния  $E_{nlj}$  является единственным экспериментальным параметром необходимым для построения его волновой функции. В данной работе использовались энергии из таблиц [20].

Аналитический вид радиальных волновых функций (5) позволяет провести аналитическое интегрирование при вычислении радиального матричного элемента (3):

$$\langle R_f(r) | r | R_i(r) \rangle = \frac{1}{4Z} \sqrt{\frac{\Gamma(\lambda + \lambda' + 4)}{\Gamma(2\lambda + 2)\Gamma(2\lambda' + 2)}} \times \sqrt{\frac{(2\lambda + 2)_{n_r}}{n_r!} \frac{(2\lambda' + 2)_{n'_r}}{n'_r!}} \times \left( \frac{2v'}{v+v'} \right)^{\lambda+2} \left( \frac{2v}{v+v'} \right)^{\lambda'+2}} \times \left( F_2 \left( \lambda + \lambda' + 4, -n_r, -n'_r; 2\lambda + 2, 2\lambda' + 2; \frac{2v'}{v+v'}, \frac{2v}{v+v'} \right) \right) \quad (6)$$

$F_2(a, b_1, b_2; c_1, c_2; x_1, x_2)$  — функция Аппеля [19], которая может быть вычислена с использованием стандартных компьютерных программ.

Радиальные матричные элементы (6) модельного потенциала Фьюса, подставленные в формулу (2), позволяют вычислить скорости термоиндуцированных распадов и возбуждений (4). Полученные результаты находятся в согласии с работой [21]. В таблицах 1 и 2 приведено сравнение полных скоростей распадов ридберговских состояний нейтрального атома рубидия за счет переходов в дискретном спектре ( $P_{nlj}^{dis} = P_{nlj}^d + P_{nlj}^e$ ) при температурах  $T = 300$  и  $T = 600$  К соответственно. Таблицы 3 и 4 отражают аналогичные сравнения для нейтрального атома цезия.

#### 4. ПОСТРОЕНИЕ АППРОКСИМАЦИИ И ТЕМПЕРАТУРНОЙ ПАРАМЕТРИЗАЦИИ

Представление огромного массива данных о скоростях стимулированных равновесным тепловым излучением распадов и возбуждений ридберговских состояний даже одного нейтрального атома в виде обширных таблиц не является удобным. К тому же зависимость скоростей термоиндуцированных переходов от

температуры требует той или иной формы параметризации результатов. Поэтому необходимо построить достаточно простую и надежную аппроксимацию в исследуемой области температур.

Главный вклад в скорости термоиндуцированных распадов и возбуждений, как показывают численные расчеты, дает группа близких к исходному состояний ( $|n_f - n_i| \leq 5$ ). Именно поведение  $P_{if}$  для переходов между близкими состояниями определяет качественную основу аппроксимации. Матричные элементы дипольных переходов (3) между близкими состояниями ( $v_f \approx v_i$ ) пропорциональны  $v^2$ . Энергия перехода между ближайшими уровнями  $\epsilon \propto 1/v^3$ . Эти оценки позволяют написать основу (отличную от предложенной в [6]) для аппроксимации скоростей термоиндуцированных возбуждений и распадов:

$$P_{nlj}^{d(e)} \propto \frac{B^{d(e)}}{v^5 (\exp[1/kTv^3] - 1)}.$$

Определяющий вклад переходов в ближайшие состояния позволяет установить важную количественную закономерность: зависимость положения состояния, в котором реализуется максимум скорости термоиндуцированного

Таблица 1

Сравнение скоростей распадов состояний Rb за счет термоиндуцированных переходов в дискретном спектре ( $P_{nlj}^{dis}$ ,  $c^{-1}$ ) при  $T = 300$  К: ММП — метод модельного потенциала Фьюса; результаты применения метода Дьячкова—Панкратова взяты из работы [21]

$n$	$S_{1/2}$		$P_{1/2}$		$P_{3/2}$		$D_{3/2}$		$D_{5/2}$	
	ММП [21]		ММП [21]		ММП [21]		ММП [21]		ММП [21]	
10	102392	103355	88243	85304	86511	83373	75223	72483	74151	71984
15	84824	85776	70025	66598	69032	65571	53178	52099	52668	51856
20	51809	52074	44417	42564	43946	42081	35017	34592	34763	34468
25	33695	33745	29741	28668	29439	28411	24238	24020	24056	23955
30	23392	23403	21119	20441	20947	20289	17649	17506	17534	17465
35	17132	17117	15714	15256	15608	15160	13386	13277	13306	13248
40	13066	13038	12128	11804	12059	11740	10486	10396	10428	10375
45	10284	10251	9635	9395	9588	9351	8431	8353	8387	8337
50	8300	8266	7835	7652	7802	7620	6923	6602	6888	6842
55	6838	6805	6495	6351	6470	6328	5785	5531	5758	5714
60	5730	5698	5470	5355	5452	5337	4906	4699	4883	4843
65	4870	4840	4670	4575	4656	4561	4214	4041	4194	4155
70	4190	4162	4033	3954	4022	3943	3658	3512	3640	3605
75	3643	3616	3518	3451	3509	3442	3205	3080	3190	3156
80	3197	3171	3095	3038	3088	3031	2831	2789	2818	2786
90	2518		2450		2445		2256		2245	
100	2035		1987		1984		1840		1831	

Таблица 2

Сравнение скоростей распадов состояний Rb за счет термоиндуцированных переходов в дискретном спектре ( $P_{nlj}^{dis}$ ,  $c^{-1}$ ) при  $T = 600$  К: ММП — метод модельного потенциала Фьюса; результаты применения метода Дьячкова—Панкратова взяты из работы [21]

$n$	$S_{1/2}$		$P_{1/2}$		$P_{3/2}$		$D_{3/2}$		$D_{5/2}$	
	ММП [21]		ММП [21]		ММП [21]		ММП [21]		ММП [21]	
10	342254	349373	277893	263502	273357	258544	204033	194821	201604	193864
15	194668	197301	162860	154420	161054	152516	120532	118052	119560	117598
20	111189	111768	96721	92474	95933	91620	75157	74380	74683	74158
25	70510	70593	63041	60655	62552	60213	50816	50476	50468	50348
30	48339	48345	44129	42645	43856	42387	36547	36326	36326	36248
35	35144	35101	32549	31562	32383	31399	27511	27341	27359	27289
40	26676	26610	24974	24280	24867	24171	21446	21301	21334	21263
45	20928	20855	19758	19248	19686	19173	17183	17052	17097	17024
50	16851	16778	16017	15630	15966	15576	14074	13437	14006	13933
55	13858	13786	13244	12942	13208	12902	11739	11233	11684	11612
60	11595	11528	11133	10891	11106	10861	9940	9530	9894	9824
65	9844	9781	9489	9290	9469	9268	8525	8185	8486	8419
70	8462	8403	8184	8019	8168	8001	7392	7106	7359	7295
75	7351	7288	7130	6991	7118	6977	6471	6227	6442	6381
80	6446	6394	6268	6150	6258	6138	5713	5635	5686	5629
90	5073		4954		4947		4548		4526	
100	4096		4013		4009		3706		3688	

Таблица 3

Сравнение скоростей распадов состояний Cs за счет термоиндуцированных переходов в дискретном спектре ( $P_{nlj}^{dis}$ ,  $c^{-1}$ ) при  $T = 300$  К: ММП — метод модельного потенциала Фьюса; результаты применения метода Дьячкова—Панкратова взяты из работы [21]

$n$	$S_{1/2}$		$P_{1/2}$		$P_{3/2}$		$D_{3/2}$		$D_{5/2}$	
	ММП [21]		ММП [21]		ММП [21]		ММП [21]		ММП [21]	
10	74150	75100	43471	42245	41501	45065	69662	66580	67054	67045
15	92262	92597	56598	55061	55686	55681	57495	56921	56126	56705
20	56240	56322	39325	38046	38836	38369	38147	38079	37453	37931
25	36083	36118	27169	26125	26877	26356	26226	26239	25881	26139
30	24820	24826	19567	18739	19386	18917	18929	18943	18734	18877
35	18039	18028	14674	14016	14553	14158	14242	14244	14124	14198
40	13675	13659	11381	10854	11296	10968	11081	11073	11005	11038
45	10712	10693	9072	8643	9011	8737	8858	8841	8806	8814
50	8613	8593	7395	7041	7348	7119	7238	7214	7202	7194
55	7073	7054	6143	5845	6107	5911	6023	5996	5998	5980
60	5911	5893	5182	4929	5154	4985	5089	5060	5071	5047
65	5013	4995	4430	4213	4407	4261	4357	4326	4342	4316
70	4305	4288	3829	3641	3811	3684	3771	3739	3761	3731
75	3736	3721	3343	3179	3328	3216	3296	3264	3288	3258
80	3273	3259	2944	2799	2932	2832	2905	2875	2899	2869
90	2572		2333		2325		2307		2303	
100	2075		1895		2090		1876		1874	

Таблица 4

Сравнение скоростей распадов состояний Cs за счет термоиндуцированных переходов в дискретном спектре ( $P_{nlj}^{dis}$ ,  $c^{-1}$ ) при  $T = 600$  K: ММП — метод модельного потенциала Фьюса; результаты применения метода Дьячкова—Панкратова взяты из работы [21]

$n$	$S_{1/2}$		$P_{1/2}$		$P_{3/2}$		$D_{3/2}$		$D_{5/2}$	
	ММП [21]		ММП [21]		ММП [21]		ММП [21]		ММП [21]	
10	327490	338890	185191	186755	181440	189253	212620	205545	205775	205964
15	216990	218908	143745	140619	142182	140998	134166	134318	131515	133414
20	121588	122090	89414	85981	88554	86458	83136	83823	81870	83334
25	75769	75977	59115	56374	58591	56812	55541	56052	54942	55753
30	51396	51480	41629	39545	41298	39906	39488	39815	39160	39621
35	37057	37081	30804	29207	30581	29500	29443	29636	29247	29512
40	27950	27944	23683	22437	23525	22675	22771	22880	22647	22790
45	21817	21798	18763	17769	18647	17966	18125	18180	18044	18113
50	17497	17472	15225	14419	15136	14582	14765	14783	14709	14733
55	14342	14314	12604	11934	12535	12072	12257	12251	12218	12212
60	11968	11939	10603	10041	10549	10158	10337	10316	10310	10285
65	10137	10108	9043	8566	9000	8666	8835	8804	8815	8779
70	8696	8668	7803	7393	7769	7480	7638	7599	7623	7579
75	7541	7515	6803	6446	6774	6522	6669	6626	6658	6609
80	6602	6576	5982	5670	5959	5738	5873	5828	5865	5813
90	5183		4732		4716		4657		4652	
100	4176		3836		3826		3783		3780	

распада (возбуждения) в данной серии, от температуры. Максимум интенсивности теплового излучения при температуре  $T$  соответствует энергии фотона  $\epsilon \approx 2.82kT$ . Состояние, энергия перехода из которого в соседние  $\propto 1/v^3$  попадает в резонанс с максимумом интенсивности при данной температуре  $T$ , становится максимумом в серии по скорости распада (возбуждения). То есть в каждой серии для скоростей распадов и возбуждений (а также их суммы) выполняется условие:

$$x_m = \frac{100}{v_m T^{1/3}}, \quad (7)$$

определяющее эффективное главное квантовое число  $v_m$  состояния, на котором реализуется максимум скорости теплоиндуцируемого процесса. В таблицах 5 и 6 приведены константы  $x_m$  для возбуждений, распадов и скоростей переходов на все разрешенные уровни в дискретном спектре для рубидия и цезия. Анализ численных данных показал, что различие между константами  $x_m$  для серий с разными полными моментами  $j$ , но одинаковым орбитальным моментом  $l$  в одном и том же атоме не является существенным.

Анализ количественных зависимостей для переходов из заданного состояния в ближайшие

Таблица 5

Условие максимумов скоростей переходов для рубидия ( $x_m$ )

Серия	$s$	$p$	$d$
Распады	1.8	1.65	1.7
Возбуждения	1.9	2.05	2.0
Все переходы	1.85	1.8	1.8

Таблица 6

Условие максимумов скоростей переходов для цезия ( $x_m$ )

Серия	$s$	$p$	$d$
Распады	1.7	1.6	1.4
Возбуждения	1.9	1.75	1.9
Все переходы	1.8	1.65	1.75

соседние состояния, верно отражая асимптотику для высоких ридберговских состояний, дает не достаточно точный базис для аппроксимации скоростей теплоиндуцированных переходов в области максимума. Поэтому основа аппроксимации должна быть уточнена вкладами от переходов в более удаленные от исходного состояния. Так как матричные элементы переходов в ближайшие состояния имеют асимптотику  $v^2$ , а остальные все уменьшают свой вклад, то разумно уточнять аппроксимацию полиномом по

обратным степеням эффективного главного квантового числа  $\nu$ . Для улучшения аппроксимации рациональнее использовать полином с безразмерным параметром  $x$ , который обратно пропорционален  $\nu$  [22] и [23]:

$$P_{nlj}^{d(e)} = \frac{a_0^{d(e)}(1 + a_1^{d(e)}x + a_2^{d(e)}x^2 + a_3^{d(e)}x^3)}{\tilde{\nu}^5(\exp[0.315775x^3] - 1)}, \quad (8)$$

$$\tilde{\nu} = \frac{\nu}{100}, \quad x = \frac{100}{\nu T^{1/3}}.$$

$a_0^{d(e)}$  — основной (асимптотический) коэффициент аппроксимации, фиксирующий ее поведение при  $x \ll 1$ . Коэффициенты  $a_1^{d(e)}$ ,  $a_2^{d(e)}$  и  $a_3^{d(e)}$  определяют форму кривой в области максимальных скоростей переходов в данной серии и при данной температуре. Так как положение  $\nu_m$  и абсолютная величина максимума скорости того или иного термоиндуцированного процесса, меняются при изменении температуры, то и эти коэффициенты должны зависеть от температуры. Из построений аппроксимации (8) для одной и той же серии ( $l$  и  $j$  одинаковы) при различных температурах в диапазоне  $T = 50 - 1500$  К следует, что основные коэффициенты  $a_0^{d(e)}$  практически не изменяются (поэтому в аппроксимации (8) они рассматриваются как константы), а тройки коэффициентов  $a_1^{d(e)}$ ,  $a_2^{d(e)}$  и  $a_3^{d(e)}$  меняются в пределах одного порядка — для них необходимо вырабатывать температурную параметризацию.

Так как коэффициенты  $a_1^{d(e)}$ ,  $a_2^{d(e)}$  и  $a_3^{d(e)}$  определяют максимум термоиндуцированных процессов, то уравнение на экстремум аппроксимации (8):

$$\frac{\partial P_{nlj}^{d(e)}(\nu, T)}{\partial T} = 0$$

можно рассматривать в качестве существенной связи между этими коэффициентами. Условие максимума (7) позволяет исключить  $\nu$  из последнего уравнения, которое превращается в дифференциальное уравнение с тремя неизвестными функциями, зависящими от температуры. Так как температура входит в это уравнение степенями кубического корня  $T^{1/3}$ , то температурную зависимость коэффициентов следует искать в виде ряда по отрицательным степеням  $T^{1/3}$  (при  $T \rightarrow \infty$  экстремум для скоростей термоиндуцированных процессов исчезает):

$$a_i^{d(e)} = \sum_{k=0}^2 b_{ik}^{d(e)} \left( \frac{T}{100} \right)^{-k/3}, \quad i = 1, 2, 3, \quad (9)$$

где  $b_{ik}$  — матрица коэффициентов уже не зависящих от температуры. Такая параметризация хорошо отражает изменение характеристик максимума и спада от максимума к асимптотике высоких ридберговских состояний, обеспечивая малые отклонения от прямых расчетов (см. рис. 1). Коэффициенты  $b_{ik}^{d(e)}$  рассчитыва-

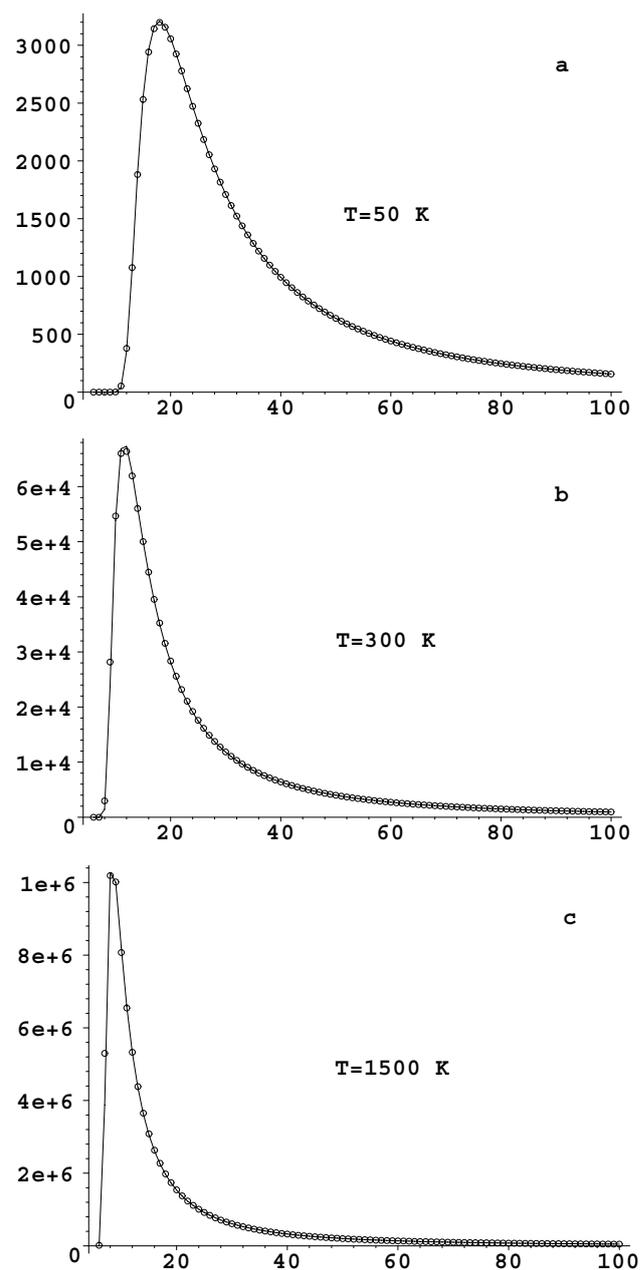


Рис 1. Сравнение результатов аппроксимации (10) и (9) (сплошная линия) с результатами прямых вычислений (4) и (2) (открытые кружки) для скоростей возбуждения ( $P_{ns}^e$ ,  $s^{-1}$  по оси ординат)  $s$ -состояний цезия (по оси абсцисс — главные квантовые числа  $n$ ) при а)  $T = 50$  К, б)  $T = 300$  К, в)  $T = 1500$  К

ются в два этапа: сначала при нескольких фиксированных температурах в диапазоне  $T = 50 - 1500$  К определяются коэффициенты  $a_i^{d(e)}$ , затем на базе наборов  $\{a_1^{d(e)}, a_2^{d(e)}, a_3^{d(e)}\}$  строится матрица коэффициентов  $b_{ik}^{d(e)}$ . Ниже приведены  $b_{ik}^{d(e)}$ -матрицы для определения с помощью формул (8) и (9) скоростей теплоиндуцированных возбуждений и распадов в обратных секундах ( $s^{-1}$ )  $s$ -,  $p$ -,  $d$ -состояний нейтрального рубидия и цезия от области максимума до  $n = 100$  с указанием предельных отклонений результатов аппроксимации от прямых вычислений по формулам (4), (2) и (6).

## 5. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ КОЭФФИЦИЕНТОВ АППРОКСИМАЦИИ

### 5.1. S-СЕРИИ

Теплоиндуцированные переходы из  $s$ -состояний осуществляются только в состояния  $p$ -серии, поэтому аппроксимацию (8) можно подкорректировать введением дополнительного множителя  $\Delta_\mu^{d(e)}$ , учитывающего квантовые дефекты, для более точного представления интервалов энергий между близкими состояниями:

$$P_{ns}^{d(e)} = \frac{a_0^{d(e)}(1 + a_1^{d(e)}x + a_2^{d(e)}x^2 + a_3^{d(e)}x^3)}{\tilde{\nu}^5(\exp[0.315775\Delta_\mu^{d(e)}x^3] - 1)}, \quad (10)$$

где обозначения аналогичны аппроксимации (8), а

$$\Delta_\mu^d = \mu_p - \mu_s + 1 \text{ и } \Delta_\mu^e = \mu_s - \mu_p,$$

$\mu_l$  — квантовый дефект серии:

$$E_{nl} = -\frac{1}{2(n - \mu_l)^2}.$$

Параметризация зависящих от температуры коэффициентов ( $a_1, a_2, a_3$ ) остается без изменений (9).

Введение корректирующего множителя  $\Delta_\mu^{d(e)}$  уменьшает отклонения результатов аппроксимации от прямых вычислений. От области максимума до  $n = 100$  они не превышают 2 % как для термоиндуцированных распадов, так и для возбуждений.

Распады  $s$ -состояний Rb:

$$a_0^d = 0.56574,$$

$$b_{ik}^d = \begin{pmatrix} -0.20111 & -0.19275 & 0.08653 \\ -0.44071 & 0.81577 & -0.37187 \\ 0.17814 & -0.31110 & 0.14640 \end{pmatrix};$$

возбуждения  $s$ -состояний Rb:

$$a_0^e = 0.47617,$$

$$b_{ik}^e = \begin{pmatrix} -0.47421 & 0.62155 & -0.25545 \\ 0.30945 & -0.66061 & 0.26969 \\ -0.03703 & 0.13432 & -0.05613 \end{pmatrix};$$

распады  $s$ -состояний Cs:

$$a_0^d = 0.57659,$$

$$b_{ik}^d = \begin{pmatrix} -0.33630 & 0.07206 & -0.04905 \\ -0.17024 & 0.20369 & -0.04657 \\ 0.05657 & -0.03336 & 0.00160 \end{pmatrix};$$

возбуждения  $s$ -состояний Cs:

$$a_0^e = 0.47479,$$

$$b_{ik}^e = \begin{pmatrix} -0.49023 & 0.55237 & -0.21448 \\ 0.35465 & -0.63756 & 0.24859 \\ -0.05475 & 0.14381 & -0.05838 \end{pmatrix}.$$

### 5.2. P-СЕРИИ

Как и для  $s$ -состояний, аппроксимация для распадов  $p$ -состояний рубидия и цезия дает отклонение не более двух процентов. Расхождение аппроксимации с результатами прямых расчетов для возбуждений  $p$ -состояний цезия также не превышает 2 %. Аномально большое значение константы  $x_m$  для возбуждения  $p$ -серий рубидия ( $x_m = 2.05$ ) не позволяет довести аппроксимацию до состояния максимума. Поэтому матрицы  $b_{ik}^e$  гарантируют отклонение от прямых вычислений не более 3 % только до состояния с главным квантовым числом на единицу большим, чем состояние, соответствующее  $\nu_m$ .

Распады  $p_{1/2}$ -состояний Rb

$$a_0^d = 1.4885,$$

$$b_{ik}^d = \begin{pmatrix} -0.63618 & 0.34072 & -0.14659 \\ 0.11851 & -0.15549 & 0.05819 \\ 0.06230 & 0.01166 & 0.00118 \end{pmatrix};$$

возбуждения  $p_{1/2}$ -состояний Rb

$$a_0^e = 0.59804,$$

$$b_{ik}^e = \begin{pmatrix} -0.36376 & 0.67609 & -0.22785 \\ 0.14717 & -0.82400 & 0.24066 \\ 0.05911 & 0.34230 & -0.09791 \end{pmatrix};$$

распады  $p_{1/2}$ -состояний Cs

$$a_0^d = 1.3651,$$

$$b_{ik}^d = \begin{pmatrix} -0.81422 & 0.32494 & -0.12840 \\ 0.31364 & -0.24147 & 0.08304 \\ -0.00498 & 0.03890 & -0.00786 \end{pmatrix};$$

возбуждения  $p_{1/2}$ -состояний Cs

$$a_0^e = 0.66742,$$

$$b_{ik}^e = \begin{pmatrix} -1.02778 & 1.44265 & -0.60818 \\ 0.78680 & -1.84230 & 0.77183 \\ -0.19568 & 0.65995 & -0.27810 \end{pmatrix}.$$

Распады  $p_{3/2}$ -состояний Rb

$$a_0^d = 1.5414,$$

$$b_{ik}^d = \begin{pmatrix} -0.68403 & 0.30771 & -0.11242 \\ 0.18989 & -0.16674 & 0.04730 \\ 0.03916 & 0.01287 & 0.00430 \end{pmatrix};$$

возбуждения  $p_{3/2}$ -состояний Rb

$$a_0^e = 0.56353,$$

$$b_{ik}^e = \begin{pmatrix} -0.36974 & 0.63244 & -0.21982 \\ 0.23419 & -0.88013 & 0.27118 \\ 0.00958 & 0.40292 & -0.12456 \end{pmatrix};$$

распады  $p_{3/2}$ -состояний Cs

$$a_0^d = 1.3390,$$

$$b_{ik}^d = \begin{pmatrix} -0.85654 & 0.44336 & -0.19553 \\ 0.42871 & -0.55084 & 0.24830 \\ -0.05431 & 0.17338 & -0.08014 \end{pmatrix};$$

возбуждения  $p_{3/2}$ -состояний Cs

$$a_0^e = 0.67234,$$

$$b_{ik}^e = \begin{pmatrix} -0.93628 & 1.29640 & -0.55280 \\ 0.73176 & -1.84954 & 0.81581 \\ -0.20558 & 0.73080 & -0.33370 \end{pmatrix}.$$

### 5.3. D-СЕРИИ

Отклонения аппроксимации (8) и (9) от прямых вычислений для распадов  $d$ -состояний в рубидии и цезии от области максимума до  $n = 100$  не превышают 2 %. Те же величины отклонений характерны для возбуждений цезия. У рубидия отклонения для возбуждений составляют до 3 %, из-за высокого значения константы максимума ( $x_m = 2.0$ ).

Распады  $d_{3/2}$ -состояний Rb

$$a_0^d = 1.19364,$$

$$b_{ik}^d = \begin{pmatrix} -1.46627 & 1.42937 & -0.56755 \\ 0.71967 & -0.93473 & 0.33959 \\ -0.09816 & 0.20021 & -0.05519 \end{pmatrix};$$

возбуждения  $d_{3/2}$ -состояний Rb

$$a_0^e = 0.81189,$$

$$b_{ik}^e = \begin{pmatrix} -0.54251 & 1.13706 & -0.43885 \\ 0.57867 & -2.01905 & 0.80201 \\ -0.08136 & 0.69321 & -0.27142 \end{pmatrix};$$

распады  $d_{3/2}$ -состояний Cs

$$a_0^d = 1.0448,$$

$$b_{ik}^d = \begin{pmatrix} -1.11692 & 1.00783 & -0.43340 \\ 0.27255 & -0.33558 & 0.12945 \\ -0.01660 & 0.10156 & -0.03016 \end{pmatrix};$$

возбуждения  $d_{3/2}$ -состояний Cs

$$a_0^e = 0.95076,$$

$$b_{ik}^e = \begin{pmatrix} -1.13317 & 2.11559 & -0.95319 \\ 1.22813 & -3.29407 & 1.52146 \\ -0.31034 & 1.18434 & -0.56185 \end{pmatrix}.$$

Распады  $d_{5/2}$ -состояний Rb

$$a_0^d = 1.1858,$$

$$b_{ik}^d = \begin{pmatrix} -1.51722 & 1.55156 & -0.63249 \\ 0.81702 & -1.20968 & 0.49229 \\ -0.14443 & 0.33580 & -0.13241 \end{pmatrix};$$

возбуждения  $d_{5/2}$ -состояний Rb

$$a_0^e = 0.83492,$$

$$b_{ik}^e = \begin{pmatrix} -0.75110 & 1.34429 & -0.52499 \\ 0.91721 & -2.47223 & 1.00253 \\ -0.21476 & 0.88572 & -0.35870 \end{pmatrix};$$

распады  $d_{5/2}$ -состояний Cs

$$a_0^d = 1.09867,$$

$$b_{ik}^d = \begin{pmatrix} -1.13200 & 0.94578 & -0.39164 \\ 0.23466 & -0.17624 & 0.04070 \\ 0.02875 & -0.03045 & 0.03910 \end{pmatrix};$$

возбуждения  $d_{5/2}$ -состояний Cs

$$a_0^e = 0.90049,$$

$$b_{ik}^e = \begin{pmatrix} -0.50378 & 0.93121 & -0.41007 \\ 0.55501 & -1.49441 & 0.67653 \\ -0.13951 & 0.54437 & -0.25363 \end{pmatrix}.$$

## 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для исследования взаимодействия равновесного теплового излучения (8) с ридберговскими состояниями  $s$ -,  $p$ -,  $d$ -серий нейтральных атомов цезия и рубидия использовался метод модельного потенциала Фьюса с модификацией  $s$ -состояний. Результаты его применения для расчета скоростей термоиндуцированных возбуждений и распадов находятся в хорошем согласии с недавними систематическими исследованиями времен жизни ридберговских состояний нейтральных щелочных атомов [21].

Анализ результатов численных расчетов позволил выявить количественное представление (7) качественно предсказанной закономерности сдвига максимума скорости термоиндуцированных процессов. С целью компактного представления результатов была построена простая аппроксимация, описывающая поведение скоростей распадов (возбуждений) ридберговских состояний от области максимальных значений до главных квантовых чисел  $n = 100$  и имеющая незначительные отклонения от результатов непосредственных расчетов. Дополненные универсальной температурной параметризацией коэффициентов (9) аппроксимационные формулы (8) и (10) работают в температурном диапазоне  $T = 50 - 1500$  К. Во всех сериях исследованных атомов для главных (асимптотических) коэффициентов аппроксимаций выполняется  $a_0^d > a_0^e$ , что свидетельствует о преобладании распадов над возбуждениями для высоких ридберговских состояний.

Данная работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 07-02-00279а) и программы Президента РФ для поддержки молодых ученых (грант МК-251.2008.2). Авторы благодарят профессора В. Д. Овсянникова за ценные консультации и конструктивную критику в ходе выполнения исследования.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. *Gallagher T. F.* Interactions of Blackbody Radiation with Atoms / T. F. Gallagher, W. E. Cooke // *Phys. Rev. Lett* — 1979 — Vol. 42, 13 — P. 835—839.
2. *Gallagher T. F.* Radiative lifetimes of the S and D Rydberg Levels of Na / T. F. Gallagher, W. E. Edelstein and R. M. Hill // *Phys. Rev. A* — 1975 — Vol. 11, 5 — P. 1504—1506.
3. *Овсянников В. Д.* Время жизни ридберговского атома / В. Д. Овсянников, И. Л. Глухов // *Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Физика. Математика.* — Воронеж, 2006 — 2 — С. 99—106.
4. *Gallagher T. F.* Rydberg Atoms / T. F. Gallagher — Cambridge University Press, 1994 — 496 p.
5. *Theodosio C. E.* Lifetimes alkali-metal-atom Rydberg states / C. E. Theodosio // *Phys. Rev. A* 30 — 1984 — Vol. 30, 6 — P. 2881—2909.
6. *Farley J. W.* Accurate calculation of dynamic Stark shifts and depopulation rates of Rydberg energy levels induced by blackbody radiation. Hydrogen, helium, and alkali-metal atoms / J. W. Farley, W. H. Wing // *Phys. Rev. A* — 1981 — Vol. 23, 5 — P. 2397—2424.
7. *Spencer W. P.* Photoionization by blackbody radiation / W. P. Spencer, A. G. Vaidyanathan, D. Kleppner, T. W. Ducas // *Phys. Rev. A* — 1982 — Vol. 26, 3 — P. 1490—1493.
8. *Lehman G. W.* Rate of ionisation of H and Na Rydberg atoms by black-body radiation // *J Phys B: At. Mol. Opt. Phys.* — 1983 — Vol. 16, 12 — P. 2145—2156.
9. *Oliveira A. L.* Measurements of Rydberg-state lifetimes using cold trapped atoms / A. L. de Oliveira, M. W. Mancini, V. S. Bagnato, and L. G. Marcassa // *Phys. Rev. A* — 1982 — Vol. 26, 3 — P. 031401 (4 p.).
10. *Ryabtsev I. I.* Applicability of Rydberg atoms to quantum computers / I. I. Ryabtsev, D. B. Tretyakov and I. I. Beterov // *J Phys B: At. Mol. Opt. Phys.* — 2005 — Vol. 38, 2 — P. 421—436.
11. *Branden D. B.* Radiative lifetime measurements of rubidium Rydberg states / D. B. Branden, T. Juhasz, T. Mahlokozera, C. Vesa, R. O. Wilson, M. Zheng, A. Kortyna, and D. A. Tate // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* — 2010 — Vol. 43, 1 — 015002 (13 p.).
12. *Glukhov I. L.* Thermal photoionization of Rydberg states in helium and alkali-metal atoms / I. L. Glukhov, V. D. Ovsiannikov // *J Phys B: At. Mol. Opt. Phys.* — 2009 — Vol. 42, 7 — P. 075001 (12 p.).
13. *Beterov I. I.* Ionization of Rydberg atoms by blackbody radiation / I. I. Beterov, D. B. Tretyakov, I. I. Ryabtsev, V. M. Entin, A. Ekers and N. N. Bezuglov // *New Journal of Physics* — 2009 — Vol. 11 — 013052 (32 p.).
14. *Gounand F.* Superradiant cascading effects in rubidium Rydberg levels / F. Gounand, M. Hugon, P. R. Fournier and J. Berlande // *J. Phys B: Atom. Molec. Phys.* — 1979 — Vol. 12, 9 — P. 547—553.
15. *Beterov I. I.* Ionization of sodium and rubidium nS, nP, and nD Rydberg atoms by blackbody radiation / I. I. Beterov, D. B. Tretyakov, A. Ekers, N. N. Bezuglov and I. I. Ryabtsev // *Phys. Rev. A* — 2007 — Vol. 75, Iss. 5 — P. 052720 (13 p.).
16. *Manakov N. L.* Atoms in a laser field / N. L. Manakov, V. D. Ovsiannikov and L. P. Rapoport // *Physics Reports* — 1986 — Vol. 141, 6 — P. 319—433.
17. *Kamenski A. A.* Electric-field-induced redistribution of radiation transition probabilities in atomic multiplet lines / A. A. Kamenski and V. D. Ovsiannikov // *J. Phys B: At. Mol. Opt. Phys.* — 2006 — Vol. 39, 9 — P. 2247—2265.
18. *Варшалович Д. А.* Квантовая теория углового момента / Д. А. Варшалович, А. Н. Москалев, В. К. Херсонский — Наука: Ленинград, 1975 — 439 с.
19. Высшие трансцендентные функции / Г. Бейтман, А. Эрдейи // Высшие трансцендентные функции: Т. 1. Гипергеометрическая функция. Функции Лежандра — М.: Наука, 1973. — 296 с.
20. *Ralchenko Yu., Kramida A. E., Reader J.* NIST ASD Team 2008 NIST Atomic Spectra Database

(version 3.1.5) (Gaithersburg, MD: National Institute of Standards and Technology) available at <http://physics.nist.gov/asd3> <http://physics.nist.gov/asd3>

21. *Beterov I. I.* Quasiclassical calculations of blackbody-radiation-induced depopulation rates and effective lifetimes of Rydberg nS, nP, and nD alkali-metal atoms with  $n \leq 80$  / I. I. Beterov, I. I. Ryabtsev, D. B. Tretyakov, V. M. Entin // Phys. Rev. A — 2009 — Vol. 79, Iss. 5 — 052504 (11 p.).

**Глухов Игорь Леонидович** — аспирант физического факультета, Воронежский государственный университет, тел. (4732)445719, E-mail: [GlukhovOfficial@mail.ru](mailto:GlukhovOfficial@mail.ru)

**Чернушкин Вячеслав Вячеславович** — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Воронежский государственный университет, тел. 8 9202137628, E-mail: [albert@phys.vsu.ru](mailto:albert@phys.vsu.ru)

22. *Glukhov I. L.* Excitations and Decays of Rubidium Rydberg States Induced by Blackbody Radiation / I. L. Glukhov, V. V. Chernushkin // Acta Physica Polonica A — 2009 — Vol. 116, 4 — P. 532—534.

23. *Ovsiannikov V. D.* Blackbody-Radiation-Induced Decay and Excitation of Rydberg States in Sodium / V. D. Ovsiannikov, I. L. Glukhov // Acta Physica Polonica A — 2009 — Vol. 116, 4 — P. 528—531.

**Glukhov Igor L.** — Postgraduate student (Department of Physics), Voronezh State University, tel. (4732)445719, E-mail: [GlukhovOfficial@mail.ru](mailto:GlukhovOfficial@mail.ru)

**Chernushkin Vyacheslav V.** — Candidate of Physics-Mathematics Sciences, Senior Scientific Researcher (Department of Physics), Voronezh State University, tel. 8 9202137628, E-mail: [albert@phys.vsu.ru](mailto:albert@phys.vsu.ru)