ВАН-ДЕР-ВААЛЬСОВО ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ АТОМОВ ГРУППЫ IIb И ИТТЕРБИЯ В СИНГЛЕТНЫХ РИДБЕРГОВСКИХ *nS*-СОСТОЯНИЯХ

А. А. Каменский^а, И. Л. Глухов^а, А. С. Корнев^{а*}, Н. Л. Манаков^а, В. Д. Овсянников^{а,b},

В. Г. Пальчиков ^{b,c}

^а Воронежский государственный университет 394018, Воронеж, Россия

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

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

> Поступила в редакцию 10 марта 2025 г., после переработки 31 марта 2025 г. Принята к публикации 1 апреля 2025 г.

Определены численные значения постоянной ван-дер-ваальсова взаимодействия C_6 между атомами щелочноземельно-подобных элементов группы IIb (Zn, Cd, Hg) и Yb в синглетных ридберговских состояниях n 1S_0 с большими значениями главных квантовых чисел n > 20. Результаты расчетов в рамках полуэмпирического метода модельного потенциала Фьюса аппроксимированы квадратичными полиномами. Коэффициенты полиномов табулированы и могут быть использованы для упрощенных количественных оценок индуцированных межатомным взаимодействием энергетических сдвигов, определения радиуса блокады процессов возбуждения ридберговских состояний, длин волн излучений, создающих ридберговские решетки для нейтральных атомов группы IIb. Определены численные значения вкладов различных двухатомных состояний в численное значение константы C_6 . Основной вклад, аналогичный вкладу фёрстеровского резонанса, обеспечивает двухатомное состояние $(n^1P_1) - ((n-1)^1P_1)$.

Статья представлена в рамках публикации материалов конференции «Физика ультрахолодных атомов» (ФУХА-2024), Новосибирск, декабрь 2024 г.

DOI: 10.31857/S004445102507003X

1. ВВЕДЕНИЕ

Быстро возрастающие потоки публикаций о научных работах по развитию квантовых информационных и вычислительных методов на основе сильно охлажденных и удерживаемых лазерным излучением атомов в заданных состояниях в настоящее время требуют подробного изучения спектральных свойств нейтральных и ионизованных атомных частиц [1–4]. Как и одновалентные атомы щелочных металлов, двухвалентные атомы щелочноземельных и щелочноземельно-подобных элементов групп Па и IIb периодической системы могут быть полез-

ны для разработки квантовых методов кодирования и обработки информации. Имеющиеся в спектрах этих атомов одноэлектронные ридберговские состояния обладают теми же свойствами, что и ридберговские состояния одновалентных атомов щелочных металлов, обеспечивающие рекордные характеристики квантовых процессоров. При возбуждении одного из внешних электронов двухвалентного атома в ридберговское состояние второй электрон, остающийся невозбужденным в основном состоянии, может быть полезным для создания магической решетки, удерживающей сильно охлажденный ридберговский атом в окрестности минимума штарковского потенциала [2, 5–9].

ÉE-mail: a-kornev@yandex.ru

Наряду с системами квантовой обработки информации щелочноземельно-подобные атомы нашли широкое применение в работах по созданию новейших стандартов частоты и времени. Для удержания упорядоченных ансамблей сильно охлажденных атомов в достаточно ограниченных объемах пространства в течение длительных (макроскопических) промежутков времени используются оптические решетки, создаваемые лазерным излучением с магической длиной волны [5–9]. Энергии штарковских сдвигов часовых состояний с полем магической решетки выравниваются для вкладов в поляризуемости внутреннего электрона, поскольку вклады ридберговского электрона практически при любых состояниях внутреннего электрона одинаковы и определяются лишь энергией пондеромоторного взаимодействия $\Delta E_p = F^2/(2\omega)^2$, зависящей только от напряженности F и частоты ω поля решетки [10] (здесь и далее используется атомная система единиц $e = m = \hbar = 1).$

Взаимодействие соседних атомов может вносить существенные изменения в спектр их энергий, приводя к блокаде процессов возбуждения ридберговских состояний (см., например, [1, 7, 8]). Основной вклад в изменение энергии ридберговских атомов на больших межатомных расстояниях R определяется энергией ван-дер-ваальсова взаимодействия [11, 12] $\Delta E_{vdW} = -C_6/R^6$. Расчет численных значений постоянной Ван дер Ваальса С₆ для атомов щелочноземельно-подобных элементов в одинаковых ридберговских $|nS\rangle$ -состояниях представлен ниже. В разд. 2 даны общие формулы в виде рядов по состояниям двухатомной системы, представляющих выражения для поправки второго порядка теории возмущений по диполь-дипольному взаимодействию атомов на больших расстояниях, существенно превышающих радиус Ле Руа ($R \gg R_{LR}$, где $R_{LR} = 2\langle nS|r^2|nS\rangle^{1/2}$ — суммарный радиус орбит взаимодействующих ридберговских атомов). В этом же разделе обсуждаются возможности использования одноэлектронных полуэмпирических методов модельного потенциала Фьюса (МПФ) и теории квантового дефекта (ТКД) [13-15] для определения амплитуд дипольных переходов между ридберговскими состояниями атомов. В настоящей работе мы ограничиваемся рассмотрением только синглетных ридберговских состояний, позволяющих использовать одноканальное приближение ТКД.

Раздел 3 посвящен изложению деталей численных расчетов частот радиационных переходов, основанных на использовании квантовых дефектов для экстраполяции численных значений энергий связанных состояний, имеющихся в таблицах [4, 16]. По формулам, представленным в разд. 2 и 3, в разд. 4 выполнен расчет численных значений и получены асимптотические формулы для количественной оценки постоянной Ван дер Ваальса C_6 , позволяющие проводить упрощенные расчеты энергии взаимодействия двух идентичных атомов в $|nS\rangle$ состояниях с произвольными значениями главного квантового числа n. Численные значения коэффициентов аппроксимационного полинома по степеням n табулированы для атомов щелочноземельноподобных элементов (Zn, Cd, Hg) и Yb.

2. РАСЧЕТ ВАН-ДЕР-ВААЛЬСОВА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АТОМОВ В РИДБЕРГОВСКИХ СОСТОЯНИЯХ

Постоянная Ван дер Ваальса C_6 для двух идентичных атомов A_1 и A_2 в $|nS\rangle$ -состояниях может быть представлена в виде суммы ряда по полному набору состояний дискретного спектра и интеграла по состояниям непрерывного спектра двухатомной системы [11, 12]:

$$C_6 = 6 \sum_{n_1, n_2} S_{n_1 n_2}^{A_1 A_2}(n).$$
 (1)

В одноэлектронном приближении слагаемые суммы в правой части (1) представляют собой дроби вида

$$S_{n_1n_2}^{A_1A_2}(n) = \frac{\left| \langle n_1 P | \hat{d}_z^{A_1} | nS \rangle \right|^2 \left| \langle n_2 P | \hat{d}_z^{A_2} | nS \rangle \right|^2}{\omega_{n_1}^{A_1} + \omega_{n_2}^{A_2}}, \quad (2)$$

в числителях которых стоят произведения квадратов модулей матричных элементов *z*-компонент операторов дипольных моментов $\langle n_{1(2)}P | \hat{d}_z^{A_{1(2)}} | nS \rangle$ (ось квантования *z* направлена вдоль межатомной оси единственного выделенного направления в системе двух взаимодействующих друг с другом атомов), а в знаменателях — суммы соответствующих частот переходов $\omega_{n_{1(2)}}^{A_{1(2)}} = E_{n_{1(2)}P} - E_{nS}$ ридберговских электронов между $|n_{1(2)}P\rangle$ - и $|nS\rangle$ -состояниями атомов. Матричные элементы и частоты, определяющие слагаемые суммы (1), в методах МПФ и ТКД [13–15] можно представить в аналитическом виде. При этом для частот переходов используется формула Ридберга – Ритца:

$$\omega_{n_1}^{A_1} + \omega_{n_2}^{A_2} = \frac{1}{\nu_{nS}^2} - \frac{1}{2(\nu_{n_1P}^{A_1})^2} - \frac{1}{2(\nu_{n_2P}^{A_2})^2}, \quad (3)$$

где $\nu_{nL} = n - \mu_{nL} = (-2E_{nL})^{-1/2} -$ эффективное главное квантовое число состояния $|nL\rangle$ с

энергией E_{nL} , отсчитываемой от порога ионизации, μ_{nL} — соответствующий квантовый дефект. Матричные элементы выражаются через двойные суммы гипергеометрического типа, в частности, в приближении МПФ через двойной ряд двух переменных $x = 2\nu'/(\nu+\nu')$ и $x' = 2\nu/(\nu+\nu')$ — функцию Аппеля $F_2(a; -n_r, -n'_r; b, b'; x, x')$ [17]:

$$\langle n_{1(2)}P|\hat{d}_{z}^{A_{1(2)}}|nS\rangle = = \sqrt{\frac{\Gamma(2\nu - n_{r})\Gamma(2\nu' - n_{r}')}{3 n_{r}!n_{r}'!}} \frac{x^{\nu - n_{r} + 1}(x')^{\nu' - n_{r}' + 1}\Gamma(a)}{4 \Gamma(b)\Gamma(b')} \times \times F_{2}(a; -n_{r}, -n_{r}'; b, b'; x, x'), \quad (4)$$

где множитель 3 в знаменателе дроби под квадратным корнем учитывает результат интегрирования по угловым переменным ридберговского электрона [18]. Здесь $a = \nu + \nu' + 2 - n_r - n'_r - общий верхний$ $параметр, <math>b = 2(\nu - n_r)$ и $b' = 2(\nu' - n'_r)$ – нижние параметры функции Аппеля. Отрицательные верхние параметры $-n_r$ и $-n'_r$ обрывают гипергеометрический ряд (4), превращая его в двойной полином. Число слагаемых в этих полиномах $n_r + 1$ и $n'_r + 1$ определяется радиальными квантовыми числами n_r и n'_r , соответствующими числу узлов радиальных волновых функций, а ν и ν' соответствуют эффективным главным квантовым числам состояний $|nS\rangle$ и $|n_{1(2)}P\rangle$.

При использовании ТКД для расчета радиальной части матричных элементов дипольных моментов в (2) можно получить выражение, аналогичное (4). При этом полином Аппеля F_2 заменяется асимптотическим рядом, аппроксимируемым полиномом $\tilde{\Sigma}_4$, аргументы которого обратны аргументам полинома F_2 (см., например, [19–23]). Следует обратить внимание на свободу выбора радиального квантового числа n_r в расчетах методом МП Φ . Многочисленные расчеты показывают, что наилучшее совпадение численных значений, получаемых методом МПФ, с результатами расчетов в рамках ТКД соответствует такому выбору n_r , при котором эффективное орбитальное квантовое число λ , получаемое из соотношения $\lambda = \nu - n_r - 1$, имеет значение, самое близкое к соответствующему орбитальному моменту конкретного состояния [24]. В частности, радиальные квантовые числа для всех $|nS\rangle$ и $|n'P\rangle$ -состояний рассматриваемых в настоящей работе атомов принимают значения $n_r = n - n_0$, где *n*₀ — главное квантовое число низшего энергетического состояния из серии состояний с заданным орбитальным моментом (l = 0 и l = 1 для $|nS\rangle$ - и $|n'P\rangle$ состояний соответственно). Исключением из этого правила являются $|nS\rangle$ -состояния атома иттербия, для которых следует положить $n_r = n - n_0 + 1$.

Расчеты численных значений матричных элементов дипольных переходов между ближайшими по энергии ридберговскими состояниями щелочных и щелочноземельных атомов, выполненные в работах [19–23], не только продемонстрировали хорошую точность выражений (3) и (4), но и позволили получить простые асимптотические выражения, упрощающие расчеты слагаемых ряда (1).

Эффективным методом расчета функции Аппеля, позволяющим получать наилучшую точность численных значений матричных элементов, является представление с помощью гипергеометрических функций Гаусса ${}_2F_1(a,b;c;x)$ [17]:

$$F_{2}(a; -n_{1}, -n_{2}; c_{1}, c_{2}; x, x') =$$

$$= \sum_{k=0}^{n_{1}} \frac{(a)_{k} (-n_{1})_{k}}{k! (c_{1})_{k}} x^{k} {}_{2}F_{1}(a+k, -n_{2}; c_{2}; x'). \quad (5)$$

Здесь функция ${}_{2}F_{1}(a+k, -n_{2}; c_{2}; x')$ с целым отрицательным верхним параметром $b = -n_{2}$ представляет собой полином степени n_{2} :

$${}_{2}F_{1}(a+k,-n_{2};c_{2};x') = \sum_{k_{1}=0}^{n_{2}} \frac{(a+k)_{k_{1}}(-n_{2})_{k_{1}}}{k_{1}!(c_{2})_{k_{1}}} (x')^{k_{1}}.$$

В этих выражениях использовано стандартное обозначение символа Похгаммера [17]:

$$(a)_k = \Gamma(a+k)/\Gamma(a) = a(a+1)(a+2)\dots(a+k-1).$$

Существенное упрощение и ускорение численных расчетов связано с близостью каждого из аргументов x и x' к единице:

$$x \approx x' \approx (x + x')/2 = 1.$$

3. КВАНТОВЫЕ ДЕФЕКТЫ И ЧАСТОТЫ ДИПОЛЬНЫХ ПЕРЕХОДОВ МЕЖДУ РИДБЕРГОВСКИМИ СОСТОЯНИЯМИ ЩЕЛОЧНОЗЕМЕЛЬНО-ПОДОБНЫХ АТОМОВ

В настоящее время имеются обширные базы данных [4, 16], содержащие численные значения энергий, необходимые для расчета частот радиационных переходов между связанными состояниями атомов. Современные лазерные установки позволяют возбуждать высокие ридберговские состояния методами спектроскопии многофотонных переходов [25,26]. Частоты переходов между ридберговскими $|n_{1(2)}P\rangle$ - и $|nS\rangle$ -состояниями определяются разностью энергий связи соответствующих состояний, каждую из которых удобно представить соотношением вида

$$E_{nL} = \mathrm{Ip}_A - \frac{\mathrm{Ry}_A}{(n - \mu_{nL})^2}.$$
 (6)

Здесь Ір_A — энергия ионизации основного состояния атома; $\text{Ry}_A = \text{Ry}_{\infty}/(1 + M_A^{-1})$ — постоянная Ридберга, учитывающая конечную массу атома M_A , $\text{Ry}_{\infty} = 109737.315685 \text{ см}^{-1}$ — универсальная постоянная Ридберга (при $M_A = \infty$); μ_{nL} — квантовый дефект состояния $|n^1L_{J=L}\rangle$. В расчетах константы Ван дер Ваальса (1) участвуют высоковозбужденные синглетные состояния $|n_{1(2)} \, {}^1P_1\rangle$ взаимодействующих атомов A_1 и A_2 , находящихся в одинаковых состояниях $|n^1S_0\rangle$.

Точность представления численных значений энергий E_{nL} в таблицах [4, 16] обычно ограничена 8–10 десятичными знаками. С ростом *n* расстояние между соседними уровнями уменьшается пропорционально n^{-3} . Поэтому точность частот переходов между ними ω_{Ryd} снижается до 3–4 десятичных знаков вследствие взаимного сокращения старших разрядов при вычитании близких по величине чисел. Для экстраполяции табличных данных проблема определения отсутствующих в таблицах численных значений E_{nL} и сохранения точности определения частот (3) для переходов между ридберговскими состояниями решается с использованием асимптотического приближения для квантового дефекта μ_{nL} (формула Ритца) [14, 26–29]:

$$\mu_{nL} = \sum_{q=0}^{q_{max}} \frac{\mu_{2q}}{(n-\mu_0)^{2q}},\tag{7}$$

где константы μ_{2q} получаются из значений μ_{nL} , вычисленных по табличным значениям энергий E_{nL} в соответствии с (6). На практике, как правило, максимальное значение индекса суммирования q_{max} в сумме (7) не превышает 2.

Определению констант Ip_A, Ry_A и μ_{2q} посвящено достаточно большое количество теоретических и экспериментальных исследований энергетических спектров щелочноземельно-подобных атомов (Zn, Cd, Hg, Yb) [4, 26–29]. В расчетах мы использовали значения параметров формул (6), (7), взятые из работы [21]. Как следует из численных значений параметров μ_{2q} , при n > 15 основной вклад в сумму (7) дают слагаемые с q = 0, 1.

Рассчитанные значения квантовых дефектов позволяют вычислить энергии (6) и часто́ты переходов между ридберговскими состояниями (3) с произвольно большими значениями главных квантовых чисел. При n > 10 отличие рассчитываемых значений энергий уровней синглетных состояний щелочноземельно-подобных атомов от численных значений, приведенных в таблицах энергетических уровней [16], не превышает 0.01%. С ростом n эта погрешность снижается, обеспечивая хорошую точность методов МПФ и ТКД в расчетах постоянной Ван дер Ваальса (1) для состояний $|n {}^{1}S_{0}\rangle$ с больши́ми n (n > 20). Численные значения квантовых дефектов μ и эффективных главных квантовых чисел $\nu = n - \mu$ предоставляют полный набор параметров, необходимых для расчета матричных элементов по формулам (4), (5).

4. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ И АСИМПТОТИЧЕСКИЕ АППРОКСИМАЦИИ ДЛЯ ПОСТОЯННОЙ ВАН-ДЕР-ВААЛЬСОВА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЩЕЛОЧНОЗЕМЕЛЬНО-ПОДОБНЫХ АТОМОВ

Использование выражений (1)–(4) показывает, что основной вклад в сумму ряда (1) дают несколько слагаемых с главными квантовыми числами $|n_1P\rangle$ и $|n_2P\rangle$ -состояний, близкими к главному квантовому числу $|nS\rangle$ -состояния: $n_{1(2)} = n, n \pm 1, n \pm 2$. Слагаемые $S_{nn}^{A_1A_2}$ положительны, $S_{n-1n-1}^{A_1A_2}$ отрицательны и взаимно сокращают друг друга в сумме (1).

Относительный вклад состояний с $n_{1(2)} = n \pm 3$ вместе со всеми оставшимися состояниями с $|n_{1(2)} - n| > 3$ не превышает 0.01%. Различие результатов, получаемых при использовании в расчетах матричных элементов МПФ и ТКД, не превосходит 1%. Однако число операций, пропорциональное времени вычислений, в методе МПФ, описанном в разд. 2, существенно меньше, чем в методе ТКД. В частности, при n > 40 скорость расчетов в методе МПФ почти на порядок превышает скорость вычислений методом ТКД, а при n > 150разность времен вычислений достигает уже двух порядков. Поэтому все расчеты были выполнены с использованием метода МП Φ . Знак константы C_6 совпадает со знаком суммарной частоты переходов $\omega_{n_1}^{A_1} + \omega_{n_2}^{A_2}$ в знаменателях слагаемых (2), дающих максимальный вклад в сумму ряда (1). Этот знак определяется структурой энергетических уровней синглетных ридберговских состояний $|n|^{1}S_{0}\rangle$ и $|n_{1(2)} {}^{1}P_{1}\rangle$ конкретного атома.

По результатам численных расчетов методом МПФ с использованием выражений (4)–(7) получена удобная аналитическая аппроксимация для кон-

Таблица. Численные значения констант, определяющих постоянную Ван дер Ваальса (8) для атомов щелочноземельно-подобных элементов в ридберговских состояниях $|n \, {}^1S_0\rangle$

c_i	Zn	Cd	Hg	Yb
<i>с</i> ₀ [ат. ед.]	20.6613	7.26339	7.5315	-0.815284
c_1	-14.926	-30.8189	-41.077	-75.66503
C_2	47.302	346.302	530.804	1443.034

стант ван-дер-ваальсова взаимодействия C_6 атомов группы IIb и Yb в ридберговских $|n \, {}^1S_0\rangle$ -состояниях, которую с учетом асимптотической зависимости $C_6 \propto n^{11}$ можно представить в виде

$$C_6(n) = c_0 n^{11} \left(1 + \frac{c_1}{n} + \frac{c_2}{n^2} \right).$$
(8)

Константы c_i (i = 0, 1, 2), полученные методом полиномиальной интерполяции [30] численных значений функции (1) при трех фиксированных значениях аргумента n=40, 80, 120, представлены в таблице.

Следует обратить внимание на знаки старших коэффициентов со в разложении по степеням главного квантового числа n (8) для постоянной Ван дер Ваальса C_6 . Положительные значения c_0 для атомов группы IIb (Zn, Cd, Hg) соответствуют положительным значениям $C_6(n)$, определяющим притяжение идентичных атомов друг к другу. У атомов иттербия коэффициент c_0 отрицателен, но $C_6(n) > 0$ при n < 45 за счет отрицательных значений корректирующего полинома из формулы (8) в этой области. Точные значения $C_6(44) = 4.525 \cdot 10^{15}$ и $C_6(45) = -6.245 \cdot 10^{15}$, отличающиеся по абсолютной величине почти на порядок от численных значений $C_6(n)$ в соседних точках, $C_6(43) = 1.084 \cdot 10^{16}$ и $C_6(46) = -2.321 \cdot 10^{16}$, свидетельствуют о взаимном сокращении старших десятичных разрядов положительных и отрицательных вкладов. Отрицательные значения постоянной C_6 при $n \ge 45$ соответствуют повышению энергии возбуждения и попарному взаимному отталкиванию друг от друга на больших расстояниях атомов Yb в ридберговских состояниях. Эти особенности асимптотического взаимодействия сильно возбужденных атомов могут быть выявлены экспериментально.

Численные значения коэффициентов c_i для атомов Yb, приведенные в последней колонке таблицы, получены путем интерполяции по трем значениям $C_6(n)$, рассчитанным методом модифицированного МПФ [24] при n=60, 120, 180. Отрицательные значения коэффициента c_1 для всех рассмотренных $C_6(n)$, а положительные значения c_2 компенсируют это снижение. Поправки к основной асимптотической степенной зависимости $C_6(n) \propto n^{11}$, представленные в (8) сомножителем в виде квадратичного полинома по степеням обратного квантового числа n^{-1} , исчезают при $n \gg 10$. Сравнение численных значений постоянной Ван дер Ваальса, рассчитанных по формулам (1)–(7), с соответствующими результатами асимптотического приближения (8) с коэффициентами из таблицы показывает хорошее согласие в области значений главного квантового числа между n = 30 и n = 500 с отклонением менее 3% для атомов цинка и с отклонением менее 1% для атомов кадмия и ртути. Для атомов иттербия константа C_6 здесь положительна при $n \leq n_{crit}$. В расчетах методом МП $\Phi n_{crit} = 44$, метод ТКД дает $n_{crit} = 43$. В области бо́льших значений главного квантового числа, т. е. при n > 44, оба метода (МПФ и ТКД) дают отрицательные значения постоянной Ван дер Ваальса. Метод МПФ в области 40 < n < 400 завышает абсолютные значения константы С₆ из аппроксимации (8), а при n > 44 дает заниженные абсолютные значения отрицательных коэффициентов C_6 , полученных методом ТКД. При n = 50 такое занижение составляет около 18%, затем уменьшается примерно до 1% при n = 100 и далее становится еще меньше. Так что численные значения $C_6(n)$, найденные обоими методами, практически совпадают и согласуются с аппроксимационной формулой (8) с отклонением не более 1% вплоть до n = 500. Следует заметить, что и при сравнении матричных элементов дипольных переходов между ридберговскими состояниями $|n^{1}S_{0}\rangle$ и $|n'^{1}P_{1}\rangle$, где $n' = n, n \pm 1, n \pm 2$, рассчитанных методами МПФ и ТКД, также наблюдается относительное различие на уровне 1–2%, уменьшающееся с ростом *n* для всех рассмотренных нами атомов, включая и атомы иттербия.

атомов эффективно снижают абсолютные значения

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе изложенных в настоящей работе теории и методов расчета констант $C_6(n)$ ван-дер-ваальсова взаимодействия атомов щелочноземельно-подобных элементов группы IIb и Yb в синглетных ридберговских состояниях $|n^{1}S_0\rangle$ получены численные значения и даны аналитические выражения для упрощенных количественных оценок постоянных Ван дер Ваальса, требующихся, в частности, для исследования оптических свойств атомов с двумя валентными электронами в ридберговских решетках. В расчетах использованы хорошо изученные методы теории квантового дефекта (ТКД) и модельного потенциала Фьюса (МПФ). Использование метода модифицированного МПФ [24] дает возможность получить результаты расчетов радиальных матричных элементов дипольных переходов между одноэлектронными ридберговскими состояниями рассмотренных здесь атомов, практически совпадающие с результатами метода ТКД.

Результаты численных расчетов методом $M\Pi\Phi$, представленные в таблице в виде коэффициентов аппроксимации (8), воспроизводятся при n > 30 также и в расчетах методом ТКД с отклонением не более 2% для всех рассмотренных атомов. Для иттербия константа Ван дер Ваальса С₆ положительна при $n \leq n_{crit}$. В расчетах методом МПФ $n_{crit} = 44$, метод ТКД дает $n_{crit} = 43$. В области бо́льших значений главного квантового числа, т.е. при n > 44, оба метода (МПФ и ТКД) дают отрицательные значения постоянной Ван дер Ваальса. Для матричных элементов дипольных переходов между одноэлектронными ридберговскими состояниями $|n|^{1}S_{0}\rangle$ и $|n'^{1}P_{1}\rangle$, где $n' = n, n \pm 1, n \pm 2$, рассчитанных двумя методами, также наблюдается относительное различие на уровне 1-2%, уменьшающееся с ростом *п* для всех рассмотренных здесь атомов. При этом для атомов иттербия наблюдается изменение положительного знака константы $C_6(n) > 0$ при малых значениях главного квантового числа n < 44на отрицательный $C_6(n) < 0$ при n > 44. В области 40 < n < 45 вклад положительных слагаемых (2) в сумму ряда (1) практически совпадает по абсолютной величине с вкладом отрицательных слагаемых, так что один-два старших десятичных разряда взаимно сокращаются, снижая на один-два порядка (по сравнению с отдельными вкладами) абсолютную величину получаемых значений $C_6(n)$. Этот эффект приводит, в частности, к несовпадению границ областей главных квантовых чисел с положительными и отрицательными значениями постоянной Ван дер Ваальса, получаемых при расчетах методами МП Φ и ТКД.

Следует также отметить влияние теплового излучения окружающей среды на ван-дер-ваальсово взаимодействие [31]. Как и любое внешнее поле, вездесущее излучение черного тела приводит не только к сдвигу и уширению уровней энергии ридберговских состояний атомов [32, 33], но и к изменению постоянной Ван дер Ваальса C_6 [34], а также к индуцированию диполь-дипольного взаимодействия, характерного для взаимодействия двух атомов в состояниях противоположной четности [35]. Энергию такого взаимодействия можно представить в виде $\Delta E_{d-d} = C_3(n,T)/R^3$. Зависимость постоянной C_3 от главного квантового числа *n* ридберговского состояния и температуры теплового излучения *T* можно определить из общего выражения для поправки к энергии межатомного взаимодействия в вырожденной системе двух ридберговских атомов в состояниях $|n\, {}^1S_0\rangle$ и $|n'\, {}^1P_1\rangle$ в первом порядке теории возмущений [35].

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

ЛИТЕРАТУРА

- M. Saffman, T. G. Walker, and K. Mølmer, *Quantum Information with Rydberg Atoms*, Rev. Mod. Phys. 82, 2313 (2010).
- S. Zhang, F. Robicheaux, and M. Saffman, Magic-Wavelength Optical Traps for Rydberg Atoms, Phys. Rev. A 84, 043408 (2011).
- T. Macrì and T. Pohl, Rydberg Dressing of Atoms in Optical Lattices, Phys. Rev. A 89, 011402(R) (2014).
- 4. V. V. Kazakov, V. G. Kazakov, V. S. Kovalev, O. I. Meshkov, and A. S. Yatsenko, *Electronic Structure of Atoms: Atomic Spectroscopy Information System*, Phys. Scr. 92, 105002 (2017).
- A. D. Ludlow, M. M. Boyd, J. Ye, E. Peik, and P. O. Schmidt, *Optical Atomic Clocks*, Rev. Mod. Phys. 87, 637 (2015).
- T. Topcu and A. Derevianko, Divalent Rydberg Atoms in Optical Lattices: Intensity Landscape and Magic Trapping, Phys. Rev. A 89, 023411 (2014).
- I. Bloch, J. Dalibard, and S. Nascimbène, *Quantum Simulations with Ultracold Quantum Gases*, Nat. Phys. 8, 267 (2012).
- A. Browaeys and Th. Lahaye, Many-Body Physics with Individually Controlled Rydberg Atoms, Nat. Phys. 16, 132 (2020).
- A. Derevianko and H. Katori, *Colloquium: Physics* of *Optical Lattice Clocks*, Rev. Mod. Phys. 83, 331 (2011).
- В. Д. Овсянников, Динамические поляризуемости высоковозбужденных атомных уровней, Опт. и спектр. 49, 3 (1980) [V. D. Ovsiannikov, Dynamic Polarizabilities of Highly-Excited Atomic Levels, Sov. Phys.-Opt. Spectrosc. 49, 3 (1980)].

- A. A. Kamenski, N. L. Manakov, S. N. Mokhnenko, and V. D. Ovsiannikov, *Energy of van der Waals and* Dipole-Dipole Interactions between Atoms in Rydberg States, Phys. Rev. A 96, 032716 (2017).
- А. А. Каменский, С. Н. Мохненко, В. Д. Овсянников, *Резонансное дисперсионное взаимодействие атомов щелочных металлов в ридберговских состояниях*, Квант. электрон. 47, 467 (2017) [А. А. Kamenski, S. N. Mokhnenko, and V. D. Ovsiannikov, *Resonance Dispersion Interaction of Alkali Metal Atoms in Rydberg States*, Quantum Electron. 47, 467 (2017)].
- N. L. Manakov, V. D. Ovsiannikov, and L. P. Rapoport, Atoms in a Laser Field, Phys. Rep. 141, 320 (1986).
- 14. M. J. Seaton, *Quantum Defect Theory*, Rep. Prog. Phys. 46, 167 (1983).
- И. И. Собельман, Введение в теорию атомных спектров, ГИФМЛ, Москва (1963) [I. I. Sobelman, An Introduction to the Theory of Atomic Spectra, Pergamon Press, London, UK (1972)].
- 16. A. Kramida, Yu. Ralchenko, J. Reader, and NIST ASD Team (2024), NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.12), [Online], Available: https://physics.nist.gov/asd [2025, February 28], National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.
- Г. Бейтмен, А. Эрдейн, Высшие трансцендентные функции. Гипергеометрическая функция. Функции Лежандра, Наука, Москва (1965)
 [H. Bateman and A. Érdelyi, Higher Transcendental Functions, McGraw-Hill Company, New York – Toronto – London (1953), Vol. 1].
- Д. А. Варшалович, А. Н. Москалев, В. К. Херсонский, Квантовая теория углового момента, Наука, Ленинград (1975) [D. A. Varshalovich, A. N. Moskalev, and V. K. Khersonskii, Quantum Theory of Angular Momentum: Irreducible Tensors, Spherical Harmonics, Vector Coupling Coefficients, 3nj Symbols, World Sci., Singapore (1988)].
- V. D. Ovsiannikov, V. G. Palchikov, and I. L. Glukhov, *Microwave Field Metrology Based on Rydberg States of Alkali-Metal Atoms*, Photonics 9, 635 (2022).
- 20. I. L. Glukhov, A. A. Kamenski, and V. D. Ovsiannikov, The Use of Photoionization Cross Section for Evaluating Contribution of Continuum to the Blackbody Radiation Induced Shift and Broadening of Rydberg-State Energy Levels of Group IIb Ions, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer 280, 108068 (2022).

- 21. I. L. Glukhov, A. A. Kamenski, V. D. Ovsiannikov, and V. G. Palchikov, *Precision Spectroscopy of Radiation Transitions between Singlet Rydberg States* of the Group IIb and Yb Atoms, Photonics 10, 1153 (2023).
- 22. И. Л. Глухов, А. А. Каменский, В. Д. Овсянников, В. Г. Пальчиков, Прецизионная спектроскопия ридберговских состояний щелочноземельных атомов для измерения характеристик СВЧ излучения, ЖЭТФ 164, 193 (2023) [I. L. Glukhov, A. A. Kamenski, V. D. Ovsiannikov, and V. G. Pal'chikov, Precision Spectroscopy of Rydberg States in Alkaline Earth Atoms for Millimeter-Wave Radiation Measurement, JETP 137, 169 (2023)].
- 23. А. А. Каменский, И. Л. Глухов, А. С. Корнев, Н. Л. Манаков, В. Д. Овсянников, В. Г. Пальчиков, СВЧ радиационные переходы между триплетными ридберговскими состояниями атомов щелочноземельно-подобных элементов группы IIb (Zn, Cd, Hg) и иттербия Yb, ЖЭТФ 166, 490 (2023).
- 24. Е. Ю. Ильинова, В. Д. Овсянников, Модифицированный потенциал Фьюса для многоэлектронных атомов, Опт. и спектр. 105, 709 (2008)
 [E. Yu. Il'inova and V. D. Ovsyannikov, Modified Fues Potential for Many-Electron Atoms, Opt. Spectrosc. 105, 647 (2008)].
- 25. I. I. Ryabtsev, I. I. Beterov, D. B. Tretyakov, V. M. Entin, and E. A. Yakshina, Doppler- and Recoil-Free Laser Excitation of Rydberg States via Three-Photon Transitions, Phys. Rev. A 84, 053409 (2011).
- 26. Б. Б. Зеленер, С. А. Саакян, В. А. Саутенков, Е. В. Вилыпанская, Б. В. Зеленер, В. Е. Фортов, Измерение энергий ридберговских переходов в п¹S₀ состояния и порога ионизации атомов ⁴⁰Ca, Письма в ЖЭТФ 110, 767 (2019) [В. В. Zelener, S. A. Saakyan, V. A. Sautenkov, E. V. Vilshanskaya, В. V. Zelener, and V. E. Fortov, Measurements of the Rydberg Transition Energies for the n¹S₀ State and the Ionization Potential for ⁴⁰Ca Atoms, JETP Lett. 110, 761 (2019)].
- 27. W. C. Martin, Series Formulas for the Spectrum of Atomic Sodium (Na I), J. Opt. Soc. Am. 70, 784 (1980).
- 28. F. Robicheaux, Calculations of Long Range Interactions for ⁸⁷Sr Rydberg States, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 52, 244001 (2019).
- 29. K. C. Pandey, S. S. Jha, and J. A. Armstrong, Ab Initio Calculations of Quantum-Defect Parameters for Alkaline Earths, Phys. Rev. Lett. 44, 1583 (1980).

- И. Л. Глухов, Е. А. Никитина, В. Д. Овсянников, Времена жизни ридберговских состояний ионов II группы, Опт. и спектр. 115, 12 (2013) [I. L. Glukhov, E. A. Nikitina, and V. D. Ovsiannikov, Lifetimes of Rydberg States in Ions of the Group II, Opt. Spectrosc. 115, 9 (2013)].
- J. de Hond, N. Cisternas, R. J. C. Spreeuw, H. B. van Linden van den Heuvell, and N. J. van Druten, *Interplay between Van Der Waals and Dipole-Dipole Interactions Among Rydberg Atoms*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 53, 084007 (2020).
- 32. W. E. Cooke and T. F. Gallagher, *Effects of Blackbody Radiation on Highly Excited Atoms*, Phys. Rev. A 21, 588 (1980).
- **33.** J. W. Farley and W. H. Wing, Accurate Calculation of Dynamic Stark Shifts and Depopulation Rates

of Rydberg Energy Levels Induced by Blackbody Radiation. Hydrogen, Helium, and Alkali-Metal Atoms, Phys. Rev. A **22**, 2397 (1981).

- 34. В. Д. Овсянников, Атомные восприимчивости для столкновительно-индуцированной поляризуемости и поправок к дисперсионным силам в поле световой волны, ЖЭТФ 82, 1749 (1982)
 [V. D. Ovsyannikov, Atomic Susceptibilities for the Collision-Induced Polarizability and the Corrections to the Dispersion Forces in the Field of a Light Wave, Sov. Phys. JETP 55, 1010 (1982)].
- 35. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Квантовая механика (нерелятивистская теория), Физматлит, Москва (2024), § 89 [L. D. Landau and E. M. Lifshitz, Quantum Mechanics, Nonrelativistic Theory, Pergamon Press, Oxford, UK (1989), Sec. 89].