

ВЛИЯНИЕ РАДИАЦИОННЫХ ПЕРЕХОДОВ НА ДАЛЬНОДЕЙСТВУЮЩЕЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЩЕЛОЧНОЗЕМЕЛЬНЫХ АТОМОВ В РИДБЕРГОВСКИХ n^1S_0 -СОСТОЯНИЯХ

А. А. Каменский ^{a*}, И. Л. Глухов ^a, А. С. Корнев ^a, Н. Л. Манаков ^a, В. Д. Овсянников ^{a,b},
В. Г. Пальчиков ^{b,c}

^a Воронежский государственный университет
394018, Воронеж, Россия

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

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

Поступила в редакцию 15 мая 2026 г.,
после переработки 28 июля 2026 г.
Принята к публикации 3 августа 2026 г.

Спонтанные и термоиндуцированные радиационные переходы щелочноземельных атомов из высоковозбужденных ридберговских состояний $|n^1S_0\rangle$ в состояния $|n'P\rangle$ изменяют энергию взаимодействия соседних атомов, играющую важную роль в процессах создания когерентных ридберговских ансамблей идентичных атомов. Изменение структуры ридберговского ансамбля приводит к существенному количественному и качественному изменению энергии межатомного взаимодействия. В настоящей работе рассчитываются основные характеристики диполь-дипольного взаимодействия в системе идентичных нейтральных атомов в ридберговских состояниях противоположной четности. Определяется влияние на это взаимодействие наиболее вероятных радиационных переходов из состояний $|n^1S_0\rangle$ в близкие по энергии состояния $|n'P\rangle$.

Ключевые слова: щелочноземельные атомы, ридберговские состояния, дальноедействующее межатомное взаимодействие, тепловое излучение

Статья представлена в рамках публикации материалов конференции
«Физика ультрахолодных атомов» (ФУХА-2025), Новосибирск, декабрь 2025 г.

DOI: 10.31857/S0044451026100044

1. ВВЕДЕНИЕ

Использование атомов в высоковозбужденных ридберговских состояниях для разработки квантовых методов кодирования логических операций [1–3], а также для создания прецизионных методов оптической метрологии параметров радиочастотного и СВЧ излучения [4–6] требует знания количественных характеристик межатомного взаи-

модействия. Из-за высоких электромагнитных восприимчивостей взаимодействие ридберговских атомов друг с другом существенно зависит от влияния внешних полей, в частности, от поля теплового излучения окружающей среды, именуемого Излучением черного тела (ИЧТ). Под действием ИЧТ не только возрастает вероятность радиационных переходов в связанные состояния с более низкой энергией, но и появляется возможность переходов в состояния с более высокой энергией с еще более высокими восприимчивостями. Изменение структуры ансамбля идентичных атомов в одинаковых рид-

* E-mail: san40@bk.ru

берговских состояниях $|n^1S_0\rangle$ индуцированными и спонтанными радиационными переходами приводит к изменению не только количественного, но и качественного характера межатомного взаимодействия, определяющего сдвиг энергии ридберговского атома окружающими атомами. Быстро убывающее на больших расстояниях ван-дер-ваальсово взаимодействие ридберговских атомов может уступить по величине медленнее убывающему диполь-дипольному взаимодействию, если один из двух ридберговских атомов находится в состоянии $|n^1S_0\rangle$, а другой — в состоянии $|n'^1P_1\rangle$.

Из общего выражения для вероятности дипольного радиационного перехода в единицу времени (здесь и далее используется атомная система единиц $e = m = \hbar = 1$)

$$\Gamma_{nS \rightarrow n'P}^{sp} = \frac{4\omega_{nn'}^3}{3c^3} |\langle n'P | r | nS \rangle|^2$$

из ридберговского состояния $|n^1S_0\rangle$ в состояние $|n'^1P_1\rangle$ следует, что максимальные значения скорости спонтанного радиационного распада ридберговского состояния соответствуют переходам в состояния с наименьшими значениями главного квантового числа $n' = n_0 + \Delta$, где n_0 — главное квантовое число первого возбужденного $n'P$ -состояния. Например, для атома стронция $n_0 = 5$, а $\Delta = 1, 2, 3 \ll n$. Скорости спонтанных переходов в более высокие $n'P$ -состояния быстро убывают с ростом n' . Например, для отклонения главного квантового числа n' от n_0 на 3 единицы скорость $\Gamma_{nS \rightarrow n'P}^{sp}$ не превышает половины максимального значения скорости перехода в первое возбужденное n_0P -состояние. Однако, для переходов в состояния, близкие к ридберговскому nS -состоянию с $n' \rightarrow n$, наблюдается возрастание скорости $\Gamma_{nS \rightarrow n'P}^{sp}$, связанное с ростом матричного элемента. Это возрастание обеспечивает существенную заселенность $n'P$ -состояний с главными квантовыми числами $n' = n, n \pm 1$ [7], которые к тому же имеют достаточно большие времена жизни, сравнимые с временем жизни nS -состояния.

Влияние вездесущего излучения окружающей среды — ИЧТ — является неустранимой причиной уширения уровней энергии связанных состояний. Это уширение определяется скоростью индуцированных ИЧТ радиационных переходов:

$$\Gamma_{nS \rightarrow n'P}^{BBR} = \frac{4|\omega_{nn'}|^3}{3c^3} \frac{|\langle n'P | r | nS \rangle|^2}{\exp(|\omega_{nn'}|/k_B T) - 1}$$

(аббревиатура BBR соответствует заглавным буквам стандартного термина BlackBody Radiation).

Зависимость от температуры T связана с температурной зависимостью распределения Планка для числа фотонов ИЧТ

$$N_{ph}^{BBR}(T) = [\exp(|\omega_{nn'}|/k_B T) - 1]^{-1}$$

на частоте, совпадающей с частотой $|\omega_{nn'}|$ радиационного перехода $n \rightarrow n'$. Экспоненциальная зависимость распределения приводит к быстрому убыванию $\Gamma_{nS \rightarrow n'P}^{BBR}(T)$ с ростом $|\omega_{nn'}|$. Поэтому основной вклад в термоиндуцированное уширение дают фотоны ИЧТ с энергией порядка тепловой энергии $\omega_{therm} \lesssim k_B T$. Здесь $k_B = 1/T_a$ — постоянная Больцмана, определяемая в атомных единицах как обратная величина единицы атомной температуры, которую удобно выразить в Кельвинах (К) — общепринятых единицах измерения температуры: $T_a = 315777$ К. Для комнатных температур, $T_{room} \approx 300$ К, основной вклад в тепловое уширение $\Gamma_{nS \rightarrow n'P}^{BBR}(T)$ дают фотоны ИЧТ с частотой $\omega_{therm} = 0.001 - 0.003$ ат. ед., что соответствует СВЧ излучению с длиной волны в диапазоне от 16 до 50 мкм. В этом диапазоне расположены длины волн радиационных переходов между ридберговскими состояниями атомов с главными квантовыми числами $n > 20 - 30$. Суммарная скорость всех радиационных переходов определяет естественную ширину ридберговского уровня

$$\Gamma_{nS}^{tot}(T) = \Gamma_{nS}^{sp} + \Gamma_{nS}^{BBR}(T),$$

состоящую из спонтанной Γ_{nS}^{sp} и термоиндуцированной $\Gamma_{nS}^{BBR}(T)$ частей:

$$\begin{aligned} \Gamma_{nS}^{sp} &= \sum_{n'=n_0}^{E_{n'P} < E_{nS}} \Gamma_{nS \rightarrow n'P}^{sp}; \\ \Gamma_{nS}^{BBR}(T) &= \sum_{n'=n_0} \Gamma_{nS \rightarrow n'P}^{BBR}(T). \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь сумма скоростей спонтанных переходов Γ_{nS}^{sp} включает только скорости радиационных распадов в состояния с энергией ниже энергии nS -состояния, а сумма скоростей термоиндуцированных переходов $\Gamma_{nS}^{BBR}(T)$ распространяется на полный набор $n'P$ -состояний как дискретного, так и непрерывного спектра атома.

Естественное время жизни является обратной шириной величиной $\tau_{nS}(T) = 1/\Gamma_{nS}^{tot}(T)$, зависящей от температуры. Аналогичным образом можно ввести и понятие зависящего от температуры ИЧТ времени конкретного радиационного перехода $\tau_{nS \rightarrow n'P}(T) = 1/\Gamma_{nS \rightarrow n'P}^{tot}(T)$. Полная скорость конкретного перехода $\Gamma_{nS \rightarrow n'P}^{tot}(T)$ включает

спонтанную часть только для радиационных распадов, то есть для переходов в состояния с энергией $E_{n'P} < E_{nS}$ с вынужденным испусканием фотонов. Для радиационного возбуждения, то есть для переходов в состояния с энергией $E_{n'P} > E_{nS}$, стимулируемых фотонами зависящего от температуры окружающей среды ИЧТ, полная скорость вероятности переходов $\Gamma_{nS \rightarrow n'P}^{tot}(T)$ совпадает с $\Gamma_{nS}^{BBR}(T)$.

Спонтанная часть времени жизни ридберговского состояния с малым орбитальным моментом пропорциональна кубу главного квантового числа n^3 [7–10]. Для nS -состояний атомов стронция при температуре ИЧТ $T = 300$ К суммарные скорости спонтанных Γ_{nS}^{sp} и термоиндуцированных $\Gamma_{nS}^{BBR}(T)$ переходов в $n'P$ -состояния (1) становятся одинаковыми при $n = 50$. То есть времена жизни состояний с $n \geq 51$ при комнатной температуре определяются в основном скоростью радиационных переходов, индуцированных тепловым излучением окружающей среды.

Численные расчеты показали, что после радиационных переходов за время жизни $\tau_{nS}(T)$ ансамбля атомов в ридберговских nS -состояниях возможен не только переход, но и пребывание некоторых атомов в $n'P$ -состояниях в течение микроскопических промежутков времени $\tau_{n'P}(T)$, сравнимых с $\tau_{nS}(T)$. При этом максимально вероятны переходы в состояния с главными квантовыми числами $n' = n, n \pm 1$, которые оказываются наиболее заселенными по прошествии времени жизни nS -состояния [7] и имеют близкие к $\tau_{nS}(T)$ времена жизни [8–10]. Поэтому постоянные Ван-дер-Ваальса и энергии межатомного взаимодействия второго порядка остаются практически неизменными для большинства атомов и после радиационных переходов в $n'P$ -состояния. В настоящей работе мы ограничиваемся расчетом межатомных взаимодействий атомов в nS - и $n'P$ -состояниях с близкими к n значениями главных квантовых чисел n' .

Таким образом, вследствие радиационных переходов за время жизни ридберговского ансамбля из nS -состояний в нем появляется достаточно большое количество атомов в близких по энергии $n'P$ -состояниях. При этом происходит изменение эффектов межатомного взаимодействия. Наряду с изменением констант C_6 ван-дер-ваальсова взаимодействия, преобразуется и асимптотическая ван-дер-ваальсова зависимость от межатомного расстояния R для энергии $\Delta E_{vdW} = -C_6/R^6$ в зависимость $\Delta E_{d-d} = -C_3(T)/R^3$ для диполь-дипольного взаимодействия двух идентичных атомов в nS - и $n'P$ -состояниях.

В разд. 2 настоящей статьи представлены основные выражения для межатомного взаимодействия в ансамбле идентичных атомов в ридберговских nS - и $n'P$ -состояниях. В разд. 3 рассматривается зависимость энергии диполь-дипольного взаимодействия двух атомов от скорости спонтанных и индуцируемых ИЧТ радиационных переходов и от заселенностей дипольно-связанных ридберговских состояний. Рассчитаны константы асимптотического диполь-дипольного взаимодействия $C_3(nS, T)$ и их зависимости от главных квантовых чисел ридберговских nS -состояний и от температуры T окружающей среды. В разд. 4 с помощью метода полиномиальной интерполяции получены аналитические формулы для численных расчетов констант $C_3(nS, T)$ диполь-дипольного взаимодействия ридберговских атомов. Табулированы численные значения коэффициентов $C_3(nS, T)$ и коэффициентов аппроксимирующих полиномов для синглетных ридберговских состояний атомов щелочноземельных элементов группы IIa.

2. ПОПРАВКИ К ЭНЕРГИИ РИДБЕРГОВСКИХ nS -СОСТОЯНИЙ, ИНДУЦИРУЕМЫЕ ДАЛЬНОДЕЙСТВУЮЩИМ МЕЖАТОМНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Высоковозбужденные атомы имеют настолько большие пространственные размеры, что пренебречь влиянием их взаимодействия на энергетическую структуру отдельной частицы практически невозможно. Если среднее межатомное расстояние между атомами A и B превосходит радиус Леруа $R_{LR} = 2 [\langle r_A^2 \rangle^{1/2} + \langle r_B^2 \rangle^{1/2}]$ [11], то изменение положения уровней на энергетической шкале можно определить по теории возмущений для оператора взаимодействия, асимптотическое разложение которого по степеням обратного расстояния R между центрами атомных ядер можно записать в виде

$$\hat{V}_{AB}(\mathbf{R}) = \sum_{L_A=1}^{\infty} \sum_{L_B=1}^{\infty} \frac{\hat{V}_{L_AL_B}(\mathbf{n})}{R^{L+1}}, \quad (2)$$

$$\mathbf{n} = \mathbf{R}/R, \quad L = L_A + L_B,$$

где коэффициент разложения (числитель дроби под знаком суммирования)

$$\hat{V}_{L_AL_B}(\mathbf{n}) = (-1)^{L_B} \sqrt{\frac{(2L)!}{(2L_A)!(2L_B)!}} \times$$

$$\times \left(\mathbf{C}_L(\mathbf{n}) \cdot \left\{ \hat{\mathbf{Q}}_{L_A}^A(\mathbf{r}_A) \otimes \hat{\mathbf{Q}}_{L_B}^B(\mathbf{r}_B) \right\}_L \right) \quad (3)$$

представляет собой обобщенное скалярное произведение тензора модифицированной сферической функции

$$\mathbf{C}_{LM}(\mathbf{n}) = \sqrt{\frac{4\pi}{2L+1}} Y_{LM}(\mathbf{n})$$

ранга L , зависящей от угловых переменных единичного вектора $\mathbf{n}$, направленного от атома A к атому B , и неприводимого тензорного произведения того же ранга L операторов электрических мультипольных моментов каждого из двух взаимодействующих атомов

$$\hat{\mathbf{Q}}_{L_{A(B)}}^{A(B)}(\mathbf{r}_{A(B)}) = r_{A(B)}^{L_{A(B)}} \mathbf{C}_{L_{A(B)}}(\mathbf{r}_{A(B)}/r_{A(B)}).$$

Поскольку все мультипольные моменты атомов в S -состояниях равны нулю, дальнедействующие поправки к энергии первого порядка по взаимодействию (2)

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

в системе двух атомов с волновой функцией

$$\Psi_{AB}(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) = \varphi_{n_A l_A m_A}(\mathbf{r}_A) \varphi_{n_B l_B m_B}(\mathbf{r}_B)$$

отсутствуют, если хотя бы один из атомов находится в nS -состоянии. Энергия взаимодействия $\Delta E_{AB}^{(1)}$ в первом порядке по $\hat{V}_{AB}(\mathbf{R})$ отлична от нуля только в том случае, когда оба атома оказываются в состояниях с ненулевыми орбитальными моментами $l_{A(B)} \neq 0$ и с определенными значениями главного $n_{A(B)}$ и магнитного $m_{A(B)}$ квантовых чисел:

$$\begin{aligned} \varphi_{n_{A(B)} l_{A(B)} m_{A(B)}}(\mathbf{r}_{A(B)}) = \\ = R_{n_{A(B)} l_{A(B)}}(r_{A(B)}) Y_{l_{A(B)} m_{A(B)}}(\mathbf{r}_{A(B)}/r_{A(B)}). \end{aligned}$$

В частности, для атомов в состояниях $|n' P m_{A(B)}\rangle$ с одинаковыми главными и орбитальными квантовыми числами и различающихся только направлениями орбитальных моментов (проекциями моментов m_A и m_B на ось квантования), выражение для энергии межатомного взаимодействия в низшем порядке по малому параметру $1/R \ll 1$ можно получить из (2) и (3) в виде

$$\begin{aligned} \Delta E_{AB}^{(1)} = - \sum_{L=4}^{L_A+L_B} \frac{C_{2L+1}^{(1)}}{R^{2L+1}} = \\ = - \frac{(C_5)_{m_A m_B}}{R^5} - \frac{(C_7)_{m_A m_B}}{R^7} - \dots, \quad (4) \end{aligned}$$

где $2 \leq L_{A(B)} \leq 2l_{A(B)}$. Коэффициент первого ненулевого слагаемого в этой сумме

$$(C_5)_{m_A m_B} = G(3m_A^2 - 2)(3m_B^2 - 2),$$

определяющий энергию кваруполь-квадрупольного взаимодействия, является тензором второго ранга. Девять его компонент симметричны относительно перестановки индексов m_A и m_B и определяются одним и тем же инвариантным множителем — не зависящим от индексов произведением радиальных матричных элементов оператора квадрупольного момента

$$G_{n'P} = \frac{3}{50} \langle n'P | r^2 | n'P \rangle^2.$$

Индексы m_A и m_B соответствуют значениям проекций орбитальных моментов состояний $|n' P m_{A(B)}\rangle$ на ось квантования. В системе двух идентичных атомов ось квантования проекций орбитального момента направлена вдоль единственного выделенного направления — вдоль радиус-вектора $\mathbf{R}$. Усреднение по ориентациям орбитальных моментов одного из атомов (по проекциям $m_{A(B)} = 0, \pm 1$) превращает квадрупольную поправку к энергии в нуль. Пять из девяти компонент тензора $(C_5)_{m_A m_B}$ положительны. Максимальное численное значение среди них имеет компонента $(C_5)_{00} = 4G_{n'P}$. Еще четыре компоненты положительны и одинаковы по величине: $(C_5)_{\pm 1, \pm 1} = (C_5)_{\mp 1, \pm 1} = G_{n'P}$. Остальные четыре компоненты имеют одинаковые отрицательные значения: $(C_5)_{\pm 1, 0} = (C_5)_{0, \pm 1} = -2G_{n'P}$. Таким образом, достаточно знания единственной величины $G_{n'P}$, определяющей все девять компонент тензора второго ранга $(C_5)_{m_A m_B}$. Эти компоненты дают полную информацию о поправке первого порядка теории возмущений к энергии квадруполь-квадрупольного взаимодействия системы двух идентичных атомов в одинаковых состояниях $|n' P m_{A(B)}\rangle$. По аналогии с компонентами тензора гиперполяризуемости для энергии межатомного взаимодействия в поле световой волны [12] можно ввести понятие продольной и поперечной компонент тензора двухатомной восприимчивости для энергии межатомного взаимодействия: продольную $\chi_5^{\parallel} = (C_5)_{00} = 4G_{n'P}$ — для ридберговских орбит в плоскости межатомной оси и поперечную $\chi_5^{\perp} = (C_5)_{0, \pm 1} = -2G_{n'P}$ — для орбит, перпендикулярных оси. Эти выражения, в частности, показывают, что для орбит ридберговских P -электронов, расположенных в плоскостях оси квантования (что соответствует численным значениям проекций $m_A = m_B = 0$), энергия квадруполь-квадрупольного взаимодействия положительна и в два раза превышает по абсолютной величине отрицательную энергию для орбит, располагающихся во взаимно перпендикулярных плоскостях: одна —

вдоль, другая — перпендикулярно к оси квантования. По численным значениям величины $G_{n'P}$ для $n'P$ -состояний с большими главными квантовыми числами $n' = 50, 100, 150$ можно получить удобную для быстрых оценок этого параметра формулу аппроксимации квадратичным полиномом от обратной величины главного квантового числа состояния. Например, для атомов стронция аппроксимация квадратичным полиномом имеет вид:

$$G_{n'P} = 0.374528 (n')^8 \left[1 - \frac{21.4817}{n'} + \frac{169.992}{(n')^2} \right]. \quad (5)$$

Относительная погрешность этого выражения в области численных значений n' от 30 до 1000 не превышает 1%.

Следует обратить внимание на тот факт, что в ансамбле ридберговских атомов в nS -состояниях поправки первого порядка обусловлены появлением атомов в $n'P$ -состояниях с ненулевым орбитальным моментом. Вероятности заселения этих состояний $W_{nS}(n'P, T)$ обусловлены не только спонтанными, но и вынужденными ИЧТ переходами, зависящими от температуры окружающей среды [7]. Поэтому, строго говоря, коэффициенты C_5 вместе с коэффициентами выражения (5) являются функциями температуры T . Усредненные по всем $n'P$ -состояниям значения функции $C_5(n, T)$ можно получить суммированием их численных значений при фиксированных n' , умноженных на соответствующие вероятности заселения $n'P$ -состояний $W_{nS}(n'P, T)$ [7].

Заметим, что в данной работе использовано финальное распределение вероятности заселенности $n'P$ -состояний после радиационных переходов за время порядка времени жизни nS -состояния. За времена t , хотя бы на порядок меньше времени жизни ридберговского состояния nS , вероятность заселения $n'P$ -состояний настолько мала, что рассматривать превращение вандерваальсова взаимодействия в диполь-дипольное не имеет смысла.

3. ДИПОЛЬ-ДИПОЛЬНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ РИДБЕРГОВСКИХ АТОМОВ, ИНДУЦИРУЕМОЕ РАДИАЦИОННЫМИ ПЕРЕХОДАМИ ИЗ nS - В $n'P$ -СОСТОЯНИЯ

Время жизни ансамбля высоковозбужденных ридберговских атомов в идентичных nS -состояниях с большими значениями главного квантового числа n ограничено обратной величиной суммы скоростей спонтанных и термоиндуцированных радиационных переходов (1) во все доступные $n'P$ -состояния

с полным набором главных квантовых чисел n' , а также энергий стационарных P -состояний непрерывного спектра. Таким образом, в первоначально созданном ансамбле идентичных атомов в одинаковых ридберговских nS -состояниях в результате радиационных переходов образуются двухатомные системы из атома A в nS -состоянии и атома B в $n'P$ -состоянии с волновыми функциями $\varphi_{nS}(\mathbf{r}_A)$ и $\varphi_{n'Pm}(\mathbf{r}_B)$ соответственно. Очевидно, такая двухатомная система оказывается двукратно вырожденной относительно перестановки состояний между атомами, не изменяющей энергии системы. Волновые функции двухатомных состояний $\Psi_1(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B)$ и $\Psi_2(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) = \Psi_1(\mathbf{r}_B, \mathbf{r}_A)$ с одинаковыми энергиями $E_1 = E_2 = E_{nS} + E_{n'P}$ можно записать в виде

$$\begin{aligned} \Psi_1(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) &= \varphi_{nS}(\mathbf{r}_A)\varphi_{n'Pm}(\mathbf{r}_B), \\ \Psi_2(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) &= \varphi_{n'Pm}(\mathbf{r}_A)\varphi_{nS}(\mathbf{r}_B). \end{aligned} \quad (6)$$

После решения секулярного уравнения теории возмущений для вырожденных состояний Ψ_1 и Ψ_2 [13–16] выражения для волновой функции взаимодействующих атомов нулевого приближения $\Psi_{AB}^{(0)}(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B)$ и поправки к энергии первого порядка по межатомному взаимодействию (2) принимают соответственно вид:

$$\begin{aligned} \Psi_{AB}^{(\pm)}(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) &= [\Psi_1(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) \pm \Psi_2(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B)]/\sqrt{2}; \\ \Delta E_{nn'}^{(1)}(m) &= \mp C_3(m)/R^3, \end{aligned} \quad (7)$$

где из суммы операторов (2) взято только первое ненулевое слагаемое, а коэффициент

$$C_3(m) = \left| \langle \Psi_1(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) | \hat{V}_{11} | \Psi_2(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) \rangle \right|$$

определяется абсолютным значением матричного элемента оператора (3) с индексами $L_A = L_B = 1$. Таким образом, отрицательное значение энергии (7), соответствующее межатомному притяжению диполь-дипольным потенциалом, описывается симметричной волновой функцией

$$\Psi_{AB}^{(+)}(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) = \Psi_{AB}^{(+)}(\mathbf{r}_B, \mathbf{r}_A),$$

обычно реализуемой в системе двух атомов в синглетных состояниях [13, 14].

Зависимость от магнитного квантового числа m (от проекции орбитального момента $n'P$ -состояния на ось симметрии), связана с присутствием m в явных выражениях для двухатомных волновых функций (6). Следует заметить, что вследствие выбора направления оси квантования вдоль межатомного вектора $\mathbf{R} = R\mathbf{n}$ в скалярном произведении тензоров второго ранга сферическая функция в операторе (3) имеет только одну ненулевую компоненту

$C_{2M}(\mathbf{n}) = \delta_{M0}$, оставляя ту же единственную компоненту у тензорного произведения второго ранга операторов дипольных моментов. После вычисления интегралов по угловым переменным стандартными методами квантовой теории углового момента [17] можно получить выражения для константы $C_3(m)$ при фиксированных m в виде

$$\begin{aligned} C_3(m=0) &= \frac{2}{3} \langle n'P|r|nS \rangle^2; \\ C_3(m=\pm 1) &= \frac{1}{3} \langle n'P|r|nS \rangle^2. \end{aligned} \quad (8)$$

Таким образом, из всех слагаемых суммы (2) по $L_{A(B)} = 1, 2, \dots$ с операторами (3) ненулевой вклад в поправку к энергии $\Delta E_{nn'}^{(1)}(m)$ в первом порядке по межатомному взаимодействию (2) с волновой функцией нулевого приближения (7) дает единственное слагаемое, соответствующее взаимодействию электрических дипольных моментов с $L_A = L_B = 1$. Усредняя выражение (7) для $\Delta E_{nn'}^{(1)}(m)$ по равновероятным значениям магнитного квантового числа с учетом (8), получим

$$\begin{aligned} \Delta E_{nn'}^{(1)} &= \frac{1}{3} \sum_{m=0, \pm 1} \Delta E_{nn'}^{(1)}(m) = \\ &= -\frac{4}{9R^3} \langle n' {}^1P_1|r|n {}^1S_0 \rangle^2, \end{aligned} \quad (9)$$

где индексы атомов у аргумента $r_{A(B)}$ в матричном элементе опущены вследствие идентичности атомов A и B . Следовательно, единственным не исчезающим слагаемым в сумме (4) для системы двух атомов в nS - и $n'P$ -состояниях является поправка от диполь-дипольного взаимодействия $\Delta E_{AB}^{(1)} = -C_3(n, n', T)/R^3$. Коэффициент $C_3(n, n', T)$ зависит не только от главных квантовых чисел n и n' , но и от температуры T окружающей среды, определяющей заселенность $n'P$ -состояния [7].

Для константы $C_3(nS, T)$, учитывающей влияние на энергию диполь-дипольного взаимодействия $\Delta E_{nS}^{(1)} = -C_3(n, n', T)/R^3$ радиационных переходов во все дипольно-доступные $n'P$ -состояния, достаточно домножить выражение в правой части формулы (9) на соответствующие вероятности заселения $n'P$ -состояний $W_{nS}(n'P, T)$, появляющихся за время жизни nS -состояния [7], и просуммировать эти произведения по полному набору главных квантовых чисел n' . Таким образом, выражение для константы диполь-дипольного взаимодействия двух атомов в ридберговских nS -состояниях, учитывающее воз-

можности радиационных переходов во все доступные $n'P$ -состояния, можно записать в виде

$$\begin{aligned} C_3(nS, T) &= \\ &= \frac{4}{9} \sum_{n'} \langle n' {}^1P_1|r|n {}^1S_0 \rangle^2 W_{nS}(n'P, T). \end{aligned} \quad (10)$$

Численные значения слагаемых в этой сумме быстро убывают с ростом абсолютного значения разности главных квантовых чисел nS - и $n'P$ -состояний. Расчеты показывают, что основной вклад в сумму по n' в (10) практически при любой температуре окружающей среды T в области между 100 и 3000 К дают слагаемые с $n' = n, n \pm 1$. В частности, при $T = 300$ К относительный вклад в сумму (10) всех слагаемых с $|n' - n| > 2$ не превышает 0.01%.

4. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

В табл. 1 представлены численные значения константы (10) для атомов магния и стронция. Величины радиальных матричных элементов рассчитаны с помощью метода модельного потенциала Фьюса (МПФ), имеющего высокую точность и хорошо апробированного для широкой группы атомов с ярко выраженными спектрами одноэлектронных состояний [5–7].

Представленные в таблице данные демонстрируют быстрый рост $C_3(nS, T)$ с возрастанием главного квантового числа n и плавное увеличение с ростом температуры T . Эти закономерности можно выразить упрощенной формулой

$$C_3(n, T) \approx C_0(T) n^4 \left[1 + \frac{C_1(T)}{n} + \frac{C_2(T)}{n^2} \right], \quad (11)$$

в которой зависимость от главного квантового числа n записана в явном виде, а все коэффициенты $C_k(T)$, где $k = 0, 1, 2$, не зависят от n , а зависят только от температуры ИЧТ. Численные значения $C_k(T)$ определены методом полиномиальной интерполяции по численным значениям $C_3(nS, T)$ при трех значениях главного квантового числа nS -состояния $n = 50, 100, 150$ и четырех значениях температуры $T = 100, 300, 600$ и 1000 К. Размерность множителя $C_0(T)$ должна совпадать с размерностью $C_3(n, T)$, поскольку остальные сомножители в правой части выражения (11) безразмерны. Пропорциональность n^4 можно увидеть из данных таблицы лишь при достаточно высоких значениях n и температуры T . Для корректировки зависимости вводится квадратичный полином от обратной величины главного квантового числа $1/n$, который при

Таблица 1. Коэффициенты $C_3(nS, T)$ (в единицах $\text{МГц}\cdot\mu^3$) для потенциала диполь-дипольного взаимодействия $V_{d-d}(n, T) = -C_3(nS, T)/R^3$, индуцируемого радиационными переходами, спонтанными и вынужденными тепловым излучением окружающей среды при температуре T , в ансамбле ридберговских атомов магния и стронция в состояниях $|n\ ^1S_0\rangle$ с большими главными квантовыми числами $n \geq 30$

Атом и его основное состояние	n	T (К)			
		100	300	600	1000
Mg [Ne] $3s^2(^1S_0)$	30	56.5074	115.994	156.367	181.046
	50	684.345	1212.56	1495.79	1646.46
	80	6202.41	962245.23	11127.9	11854.5
	100	17186.8	25148.50	28373.4	29874.3
	120	39051.2	54648.4	60585.6	63279.1
	150	105176.8	139990.3	152364.2	157830.1
	180	233869.	299962.5	322311.6	332003.3
	200	369666.	464860.3	496212.6	509680.8
Sr [Kr] $5s^2(^1S_0)$	30	29.6913	68.3503	100.959	124.641
	50	432.603	869.777	1161.71	1341.09
	80	4432.75	7798.17	9613.79	10597.0
	100	12898.7	21301.9	25421.9	27544.9
	120	30395.3	47738.3	55635.6	59561.6
	150	85265.5	126281.6	143447.4	151663.1
	180	195417.2	276674.9	308596.6	323469.
	200	313956.6	433686	479141.4	500027

Таблица 2. Коэффициенты $C_k(T)$ ($k = 0, 1, 2$) из правой части выражения (11), определяющего константу потенциала диполь-дипольного взаимодействия $V_{d-d}(n, T) = -C_3(nS, T)/R^3$ в ансамбле ридберговских атомов магния и стронция в состояниях $|n\ ^1S_0\rangle$, полученные методом полиномиальной интерполяции по численным значениям константы (10) при фиксированных значениях температуры T для состояний с главными квантовыми числами $n = 50, 100, 150$

Атом $n_0s^2(^1S_0)$	T (К)	$C_0(T)$ ($\text{Гц}\cdot\mu^3$)	$C_1(T)$	$C_2(T)$
Mg $3s^2(^1S_0)$	100	302.180	−54.3652	1124.14
	300	335.421	−28.9684	394.428
	600	339.076	−17.9339	161.250
	1000	339.679	−12.8796	82.8259
Sr $5s^2(^1S_0)$	100	276.576	−69.2388	1587.59
	300	340.008	−45.1621	781.352
	600	351.150	−31.6743	407.041
	1000	353.627	−24.5569	244.793

больших n стремится к единице, а при больших T весь коэффициент при n^4 должен превратиться в константу. Следовательно, для коэффициента $C_0(T)$

можно получить полиномиальную аппроксимацию, аналогичную (11), но в качестве аргумента полинома x должна быть обратная температура $x = T_0/T$.

Таблица 3. Коэффициенты кубического полинома (12), аппроксимирующего температурную зависимость коэффициентов $C_k(T)$ выражения (11), определяющего коэффициент (10) потенциала межатомного диполь-дипольного взаимодействия атомов магния и стронция в ридберговских состояниях $|n\ ^1S_0\rangle$

Атом $n_0s^2(^1S_0)$	p	$a_0^{(p)}$ (Гц·μ ³)	$a_1^{(p)}$	$a_2^{(p)}$
Mg $3s^2(^1S_0)$	0	339.529	−4.56588	−10.7557
	1	2.74157	−29.2229	255.682
	2	−7.74217	5.12680	203.817
	3	0.892784	−0.306364	−54.3149
Sr $5s^2(^1S_0)$	0	354.646	−11.6837	−9.29104
	1	2.57399	−47.6560	865.659
	2	−21.0525	16.5212	−56.9644
	3	3.84002	−2.34362	−18.0524

Чтобы x был безразмерным, а температура T измерялась в градусах Кельвина, достаточно положить, например, $T_0 = 300$ К. В табл. 2 представлены численные значения констант $C_k(T)$ для ридберговских атомов магния и стронция. Эти данные получены квадратичной полиномиальной интерполяцией численных значений константы (10) при фиксированных значениях температуры T для состояний с главными квантовыми числами $n = 50, 100, 150$.

Численные значения коэффициентов выражения (11) из табл. 2 можно использовать для определения констант аппроксимационной формулы

$$C_k(T) = \sum_{p=0}^3 \frac{a_k^{(p)}}{x^p}, \quad k = 0, 1, 2, \quad x = \frac{T}{300 \text{ К}}. \quad (12)$$

Постоянные коэффициенты $a_k^{(p)}$ кубического полинома, не зависящие ни от главного квантового числа, ни от температуры, позволяют рассчитывать коэффициенты дальнего диполь-дипольного взаимодействия $C_3(nS, T)$ идентичных атомов в ридберговских состояниях для произвольных значений n и T . В табл. 3 приведены численные значения констант $a_k^{(p)}$ для атомов магния и стронция. Формулы (11) и (12) дают решение задачи об асимптотической аппроксимации функции двух переменных (10). Эти выражения вместе с численными данными из табл. 3 дают возможность определения энергии межатомного диполь-дипольного взаимодействия идентичных атомов в ридберговских nS -состояниях с произвольно большими главными квантовыми числами $n > 30$. При этом формулы (12) позволяют учесть влияние теплового излучения окружающей среды с температурой от $T = 100$ К до

$T = 3000$ К на константу (10). Аналогичная двойная аппроксимация по n и T предложена в работе [7] для полной ширины ридберговских состояний $\Gamma_{nS}^{tot}(T)$. Результаты численных расчетов по формулам (11) и (12) дают относительное отклонение от результатов точного расчета по формуле (10) не более 1% в указанной области температур и для главных квантовых чисел (в области $n > 30$ вплоть до $n = 1000$).

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученные результаты предоставляют возможность оценки влияния радиационных переходов на количественные и качественные характеристики межатомного взаимодействия в ансамбле идентичных атомов. В конечном итоге индуцируемое радиационными переходами диполь-дипольное взаимодействие может оказать заметное влияние на энергии ридберговских состояний, приводя к существенным изменениям таких эффектов, как ридберговская блокада, усиливая или ослабляя возможности их использования в задачах квантового кодирования логических операций на ридберговских атомах [1].

Следует обратить внимание на универсальное для всех атомов отрицательное значение энергии диполь-дипольного взаимодействия, тогда как энергия ван-дер-ваальсова взаимодействия, в зависимости от структуры энергетических спектров ридберговских спектров конкретного атома, может быть как отрицательной, так и положительной (как, например, в атомах Mg, Ca, Ba и Yb [18, 19]). Необходимо также провести исследование влияния радиационных переходов, приводящих к изменению структуры ансамбля ридберговских атомов, на

коэффициенты ван-дер-ваальсова взаимодействия, оставшегося за рамками основных результатов настоящей работы.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Госзадания по проекту № FZGU-2026-0008.

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Вклад авторов. Вклад авторов равноценен.

ЛИТЕРАТУРА

1. M. Saffman, T. G. Walker, and K. Mølmer, *Quantum information with Rydberg atoms*, Rev. Mod. Phys. **82**, 2313 (2010).
2. R. Mukherjee, J. J. Millen, R. Nath, M. P. A. Jones, and T. Pohl, *Many-body physics with alkaline-earth Rydberg lattices*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **44**, 184010 (2011).
3. T. Macrì and T. Pohl, *Rydberg dressing of atoms in optical lattices*, Phys. Rev. A **89**, 011402(R) (2014).
4. C. L. Holloway, J. A. Gordon, S. Jefferts, A. Schwarzkopf, D. A. Anderson, S. A. Miller, N. Thaicharoen, and G. Raithel, *Broadband Rydberg Atom-Based Electric-Field Probe for SI-Traceable, Self-Calibrated Measurements*, IEEE Trans. Antennas Propag. **62**, 6169 (2014).
5. I. L. Glukhov, A. A. Kamenski, V. D. Ovsyannikov, and V. G. Palchikov, *Precision Spectroscopy of Rydberg States in Alkaline Earth Atoms for Millimeter-Wave Radiation Measurement*, JETP **137**, 169 (2023) [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)].
6. A. A. Kamenskiy, I. L. Glukhov, A. S. Kornev, N. L. Manakov, V. D. Ovsyannikov, and V. G. Palchikov, *Microwave Radiation Transitions Between Triplet Rydberg States of Alkaline-Earth-Like Elements of Group IIb (Zn, Cd, Hg) and Ytterbium Yb*, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **166**, 25 (2024) [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 (2024)].
7. I. L. Glukhov, A. A. Kamenski, A. S. Kornev, N. L. Manakov, V. D. Ovsyannikov, and V. G. Palchikov, *Probabilities of n'^1P_1 -state populations after radiative transitions from Rydberg n^1S_0 states of alkaline-earth atoms*, J. Opt. Soc. Am. B **43**, 470 (2026).
8. T. F. Gallagher, *Rydberg Atom*, Cambridge University Press, Cambridge (MA) (1972).
9. 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).
10. H. A. Bethe and E. E. Salpeter, *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms*, Springer-Verlag, Berlin – Göttingen – Heidelberg, Germany (1957), [Г. Бете, Э. Солпитер, Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами, ГИФМЛ, Москва (1960)].
11. R. J. Le Roy, *Long-Range Potential Coefficients From RKR Turning Points: C_6 and C_8 for $B(^3\Pi_{ou}^+)$ -State Cl_2 , Br_2 , and I_2* , Can. J. Phys. **52**, 246 (1974).
12. V. D. Ovsyannikov, *Atomic Susceptibilities for the Collision-Induced Polarizability and the Corrections to the Dispersion Forces in the Field of a Light Wave*, JETP **55**, 1010 (1982) [В. Д. Овсянников, Восприимчивости атомов для столкновительно-индуцируемой поляризуемости и поправок к дисперсионным силам в поле световой волны, ЖЭТФ **82**, 1749 (1982)].
13. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics, Nonrelativistic Theory*, Pergamon Press, Oxford, UK (1989), sec. 89 [Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Квантовая механика (нерелятивистская теория), Физматлит, Москва (2024)].
14. E. E. Nikitin and B. M. Smirnov, *Atomic and Molecular Processes: Problems with Solutions*, Nauka, Moscow (1988) [Е. Е. Никитин, Б. М. Смирнов, Атомно-молекулярные процессы: В задачах с решениями, Наука, Москва (1988), § 1.1].
15. A. Dalgarno and W. D. Davison, *The calculation of van der Waals interactions*, Adv. At. Mol. Phys. **2**, 1 (1966).

16. A. Dalgarno, *New Methods for Calculating Long-Range Intermolecular Forces*, Adv. Chem. Phys. **12**, 143 (1966).
17. [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 Scientific, Singapore (1988).
18. I. L. Glukhov, A. A. Kamenski, V. D. Ovsiannikov, and V. G. Pal'chikov, *Van der Waals Interaction of Alkaline Earth Atoms in Singlet Rydberg States*, Bull. Lebedev Phys. Ins. **52**, S578 (2025) [И. Л. Глухов, А. А. Каменский, В. Д. Овсянников, В. Г. Пальчиков, *Вандерваальсово взаимодействие щелочноземельных атомов в синглетных ридберговских состояниях*, Квант. электр. **55**, 123 (2025)].
19. A. A. Kamenski, I. L. Glukhov, A. S. Kornev, N. L. Manakov, V. D. Ovsiannikov, and V. G. Palchikov, *Van Der Waals Interaction of the Group IIb and Ytterbium Atoms in Singlet Rydberg nS States*, Zh. Eksp. Теор. Fiz. **168**, 25 (2025) [А. А. Каменский, И. Л. Глухов, А. С. Корнев, Н. Л. Манakov, В. Д. Овсянников, В. Г. Пальчиков, *Вандер-ваальсово взаимодействие атомов группы IIb и иттербия в синглетных ридберговских nS -состояниях*, ЖЭТФ **168**, 26 (2025)].

Influence of Radiative Transitions on the Long-Range Interaction of Alkaline Earth Atoms in Rydberg n^1S_0 States

A. A. Kamenski^{a}, I. L. Glukhov^a, A. S. Kornev^a, N. L. Manakov^a,
V. D. Ovsiannikov^{a,b}, V. G. Palchikov^{b,c}*

^a Voronezh State University
394018, Voronezh, Russia

^b Federal State Unitary Enterprise “VNIIFTRI”
141570, Mendeleevo, Moscow region, Russia

^c National Research Nuclear University MEPhI
115409, Moscow, Russia

*E-mail: san40@bk.ru

Received May 15, 2026

Revised July 28, 2026

Accepted August 03, 2026

Abstract

The radiative transitions, both spontaneous and induced by the blackbody radiation of the environment, from highly excited Rydberg n^1S_0 states to $n'P$ states of alkaline earth atoms change the long-range interaction energy between atoms, which plays an important role in creating coherent Rydberg ensembles of identical atoms. Modification of the structure of a Rydberg ensemble leads to a significant quantitative and qualitative change in the energy of interatomic interaction. In this paper, we calculate the main characteristics of the dipole-dipole interaction in a system of identical neutral atoms in Rydberg states of opposite parity. We determine the influence of the most probable radiative transitions from n^1S_0 states to $n'P$ states of close energies on this interaction.

Keywords: alkaline earth atoms, Rydberg states, long-range interatomic interaction, blackbody radiation

Funding. This work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation within the State Assignment, project No. FZGU-2026-0008.

Conflict of interest. The authors declare that they have no conflict of interest.

Authors' contributions. The contributions of the authors are equal.