

---

# ФІЗИЧНІ, ХІМІЧНІ ТА ІНШІ ЯВИЩА, НА ОСНОВІ ЯКИХ МОЖУТЬ БУТИ СТВОРЕНІ СЕНСОРИ

---

## PHYSICAL, CHEMICAL AND OTHER PHENOMENA, AS THE BASES OF SENSORS

---

---

PACS 03.65.-w, 31.30.J-, 32.30.-r УДК (UDC) 539.18:539:192

### NEW RELATIVISTIC MODEL POTENTIAL APPROACH TO SENSING RADIATIVE TRANSITIONS PROBABILITIES IN SPECTRA OF HEAVY RYDBERG ATOMIC SYSTEMS

*V. B. Ternovsky, A. V. Glushkov, P. A. Zaichko, O. Yu. Khetselius, T. A. Florko*

Odessa State Maritime University, 34, Mechnikov str., Odessa, 65000, Ukraine  
Odessa State Environmental University, 15, Lvovskaya str., Odessa, 65016,  
e-mail: quantflo@mail.ru

### NEW RELATIVISTIC MODEL POTENTIAL APPROACH TO SENSING RADIATIVE TRANSITIONS PROBABILITIES IN SPECTRA OF HEAVY RYDBERG ATOMIC SYSTEMS

*V. B. Ternovsky, A. V. Glushkov, P. A. Zaichko, O. Yu. Khetselius, T. A. Florko*

**Abstract.** It has been carried out sensing and calculating probabilities and oscillator strengths of a number of radiative transitions in the spectra of heavy Rydberg atoms of alkaline elements on the basis of new relativistic model potential method in the framework of gauge-invariant perturbation theory and relativistic energy approach. It has been shown that that a new approach provides a precise accounting exchange-correlation effects, including effect of essentially non-Coulomb grouping of Rydberg levels, pressure continuum. There are received precise data on energy and spectroscopic parameters (energy, radiation width, amplitude transitions, the lifetime) for Rydberg atoms Rb, Cs, Fr, particularly, transitions  $nS_{1/2} \rightarrow n'P_{1/2, 3/2}$  ( $n=5,6$ ;  $n'=10-70$ ),  $nP_{1/2, 3, 2} \rightarrow n'D_{3/2, 5/2}$  ( $n=5,6$ ;  $n'=10-80$ ) in the Rb, Cs spectra; for Rydberg Fr there are in most first calculated and predicted spectroscopic data on transition amplitude, lifetime of Rydberg states and transitions  $7S_{1/2} - nP_{1/2, 3/2}$ ,  $7P_{1/2, 3, 2} - nD_{3/2, 5/2}$  ( $n=20-80$ ). Data obtained can be used in carrying out new types of radiative quantum sensors and frequency standards.

**Keywords:** radiative transitions, heavy Rydberg atoms, new method, quantum sensors

## НОВИЙ РЕЛЯТИВИСТСЬКИЙ МЕТОД МОДЕЛЬНОГО ПОТЕНЦІАЛУ ВИЗНАЧЕННЯ ІМОВІРНОСТЕЙ РАДІАЦІЙНИХ ПЕРЕХОДІВ У СПЕКТРАХ ВАЖКИХ РІДБЕРГІВСЬКИХ АТОМНИХ СИСТЕМ

*В. Б. Терновський, О. В. Глушков, П. О. Заїчко, О. Ю. Хецеліус, Т. О. Флорко*

**Анотація.** Виконано розрахунок ймовірностей і сил осциляторів ряду радіаційних переходів в спектрах важких рідбергівських атомів лужних елементів на основі нового релятивістського методу модельного потенціалу в рамках калібрувально-інваріантної теорії збурень і релятивістського енергетичного підходу. Показано, що підхід забезпечує досить ефективний ступінь урахування обмінно-кореляційних ефектів, у тому числі ефекту істотно некулонівського групування рідбергівських рівнів, тиску континууму і т.і. Отримано уточнені дані по енергетичним і спектроскопічним параметрам (енергії, радіаційні ширини, амплітуди переходів, час життя) для рідбергівських атомів Rb, Cs, Fr, зокрема, переходів  $nS_{1/2} \rightarrow n^3P_{1/2,3/2}$  ( $n=5,6$ ;  $n'=10-70$ ),  $nP_{1/2,3.2} \rightarrow n^3D_{2,5/2}$  ( $n=5,6$ ;  $n'=10-80$ ) в спектрах Rb, Cs; для рідбергівського Fr розраховані і передбачені спектроскопічні дані по амплітудах переходів, часам життя рідбергівських станів і переходів  $7S_{1/2}-nP_{1/2,3/2}$ ,  $7P_{1/2,3.2}-nD_{2,5/2}$  ( $n=20-80$ ). Одержані дані можуть бути використані при побудові нових типів радіаційних квантових сенсорів та стандартів частоти.

**Ключові слова:** радіаційні переходи, важкі рідбергівські атоми, новий метод, квантові сенсори

## НОВЫЙ РЕЛЯТИВИСТСКИЙ МЕТОД МОДЕЛЬНОГО ПОТЕНЦИАЛА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ВЕРОЯТНОСТЕЙ РАДИАЦИОННЫХ ПЕРЕХОДОВ В СПЕКТРАХ ТЯЖЕЛЫХ РИДБЕРГОВСКИХ АТОМНЫХ СИСТЕМ

*В. Б. Терновский, А. В. Глушков, П. А. Заичко, О. Ю. Хецелиус, Т. А. Флорко*

**Аннотация.** Выполнен расчет вероятностей и сил осцилляторов ряда радиационных переходов в спектрах тяжелых ридберговских атомов щелочных элементов на основе нового релятивистского метода модельного потенциала в рамках калибровочно-инвариантной теории возмущений и релятивистского энергетического подхода. Показано, что подход обеспечивает достаточно эффективный учет обменно-корреляционных эффектов, в том числе эффекта существенно некулоновского группирования ридберговских уровней, давления континуума и т.д. Получены уточненные данные по энергетическим и спектроскопическим параметрам (энергии, радиационные ширини, амплитуды переходов, время жизни) для ридберговских атомов Rb, Cs, Fr, в частности, переходы  $nS_{1/2} \rightarrow n^3P_{1/2,3/2}$  ( $n=5,6$ ;  $n'=10-70$ ),  $nP_{1/2,3.2} \rightarrow n^3D_{2,5/2}$  ( $n=5,6$ ;  $n'=10-80$ ) в спектрах Rb, Cs; для ридберговского Fr рассчитаны и предсказаны спектроскопические данные по амплитудам переходов, временам жизни ридберговских состояний и переходов  $7S_{1/2}-nP_{1/2,3/2}$ ,  $7P_{1/2,3.2}-nD_{2,5/2}$  ( $n=20-80$ ). Полученные данные могут быть использованы при создании новых типов радиационных квантовых сенсоров и стандартов частоты.

**Ключевые слова:** радиационные переходы, тяжелые ридберговские атомы, новый метод,

### 1. Introduction

By far one of the very urgent and very challenging directions of modern quantum (atomic) optics and spectroscopy, sensors physics are cer-

tainly related research on spectroscopy Rydberg atoms ( atoms that are found in highly excited states with large values of the principal quantum number  $n \gg 1$ ). (see, for example [1-12]). The

great relevance of research energy and spectroscopic characteristics of Rydberg atoms, usually due to standard requirements in spectroscopic information of a number of applications and related physical sciences, which include sensors electronics and quantum computing, atomic and molecular optics and spectroscopy, quantum electronics, laser physics, the construction of kinetic models of new laser schemes for short-range, physics and chemistry laboratory, astrophysical plasmas, astrophysics and astronomy (well-known facts that are found in interstellar clouds absorption lines between Rydberg states with  $n \sim 300-700$ ). The unique properties of the Rydberg atoms are associated with too small ionization potentials, sufficiently large size, big enough lifetime compared to conventional atomic states, finally, unprecedented for ordinary atoms sensitivity to external fields because of what these fields are too strong) led in recent years, more intensive research Rydberg atoms, in particular, by new experimental methods of laser spectroscopy, magneto-optical traps, synchrotron radiation sources, beam-foil spectroscopy, cryogenic equipment and so on. Accordingly, extensive studying led to a number of unique scientific discoveries, such as Rydberg matter, getting the Bose condensate in pairs Rydberg alkali atoms, fountains of cold atoms, etc. At the same time, despite the presence of a considerable number of theoretical methods in atomic spectroscopy (such as standard method e Dirac-Fock (DF), Hartree-Fock (HF), relativistic HF (RHF) type, the perturbation theory (PT) versions with the DF or RHF “0”-th approximation, method of the quantum defect, density functional theory, empirical model potential (EMP) and pseudopotential methods etc ) for atoms in a free state and various versions of perturbation theory (PT) for the external field, quasi-classical and classical models etc., a level of description of the Rydberg atoms is not sufficiently satisfactory especially when it comes to heavy atoms. For heavy Rydberg atoms there is of a great importance a precise account of relativistic, and exchange-correlation (XC) effects, and also of a significant effects for the non-Coulomb grouping levels in the Rydberg spectra (the effect of which is not considered within simplified hydrogen-like models) and pressure continuum, with the obligatory optimization of the relativistic orbitals basises. In

this paper it has been carried out sensing and calculating probabilities and oscillator strengths of a number of radiative transitions in the spectra of heavy Rydberg atoms of alkaline elements on the basis of new relativistic model potential method in the framework of gauge-invariant perturbation theory and relativistic energy approach.

## 2. New relativistic approach to heavy Rydberg systems

Let us describe in brief the important moment of our theoretical approach for the Rydberg atomic systems. As usually, the wave functions zeroth basis is found from the Dirac equation solution with self-consistent total potential. The bare Hamiltonian is as follows:

$$H = \sum_i \{ \alpha c p_i - \beta m c^2 + U(r_i | Z) \} + \sum_{i>j} \exp(i\omega_{ij} r_{ij}) \cdot \frac{(I - \alpha_i \alpha_j)}{r_{ij}}, \quad (1)$$

where  $\alpha_i, \alpha_j$  – the Dirac matrices,  $\omega_{ij}$  – the transition frequency.

Within relativistic PT [3,4] we introduce the zeroth – order Hamiltonian as:

$$H_0 = \sum_i \{ \alpha c p_i - \beta m c^2 + [-Z/r_i + U_{MF}(r_i | b) + V_{XC}(r_i)] \} + \sum_{i>j} V(r_{ij}), \quad (2)$$

where  $V_{XC}(r_i)$  – one-particle exchange-correlation potential (see. below);  $U_{MF}(r_i | b)$  – a self-consistent mean-field potential (Mean Field; b - parameter potential, which is further determined within ab initio procedure), that potential interaction “quasiparticles-core” in the case of atomic system consisting of closed electron shells and several external quasiparticles. For the Rydberg states we choose the potential  $U_{MF}(r_i | b)$  in the form of the Ivanova-Ivanov potential [5]:

$$U_{MF}(r_i | b) = 2[1 - \exp(-br)(1+r)]/Zr + 8[1 - \exp(-br)(1+0.6r+0.16r^2+0.036r^3)]/Zr. \quad (3)$$

As a single-quasiparticle exchange-correlation potential (XC) we use the generalised potential of the Kohn-Sham-Gunnarsson-Lundqvist type [3]:

$$V_{XC}[\rho(r), r] = V_X^{KS}(r) \cdot \left\{ \frac{3}{2} \ln \frac{[\beta + (\beta^2 + 1)^{1/2}]}{\beta(\beta^2 + 1)^{1/2}} - \frac{1}{2} \right\} - 0.0333 \cdot \left\{ \frac{3}{2} \ln \frac{[\beta + (\beta^2 + 1)^{1/2}]}{\beta(\beta^2 + 1)^{1/2}} - \frac{1}{2} \right\} \ln[1 + 18.3768 \cdot \rho(r)^{1/3}], \quad (4)$$

where  $\beta = 3\pi^2 \rho(r)^{1/3} / c$ ,  $c$  – the light velocity,  $V_X^{KS}$  – is the standard Kohn-Sham potential [6]. The effective electron core density (or parameter  $b_c$ ) is defined by iteration algorithm within gauge invariant QED procedure [7]. Consider the one-quasiparticle system. In the lowest second order of the EDPT a non-zeroth contribution to the imaginary part of electron energy  $\text{Im } dE$  (the radiation decay width) is provided by relativistic exchange Fock diagram. In the fourth order of the QED PT there are diagrams, whose contribution into the  $\text{Im}dE$  accounts for the core polarization effects. It is on the electromagnetic potentials gauge (the gauge non-invariant contribution). Let us examine the multielectron atom with one quasi-particle in the first excited state, connected with the ground state by the radiation transition [7]. In the zeroth QED PT approximation we, as usually (c.f.[3]), use the one electron bare MP:

$$V_N(r) + U_{MF}(r_i | b), \quad (5)$$

with  $V_N(r)$  describing the electric potential of the nucleus,  $U_{MF}(r_i | b)$  imitating the interaction of the quasi-particle with the core. In ref.[7] the lowest order multielectron effects, in particular, the gauge dependent radiative contribution for the certain class of the photon propagator calibration is treated. This value is considered to be the typical representative of the electron correlation effects, whose minimization is a reasonable criterion in the searching for the optimal one-electron basis of the PT. The minimization of the density functional  $\text{Im } dE_{\text{minv}}$  leads to the integral differential equation for the  $r_c$ , that can be solved using one of the standard numerical codes. In ref. [7] authors treated the function  $r_c$  in the simple analytic form with the only variable parameter  $b$  and substituted it to (5). More accurate calculation requires the solution of the integral differential equation for the  $r_c$  [2,9].

In order to define the probability of radiative transition we have used energy approach [5,7]. In this approach the probability is directly connected with imaginary part of electron energy of the system, which is defined in the lowest order of perturbation theory as follows:

$$\text{Im}\Delta E(B) = -\frac{e^2}{4\pi} \sum_{\substack{\alpha > n > f \\ [\alpha < n \leq f]}} V_{\alpha n \alpha n}^{|\omega_{\alpha n}|}, \quad (6a)$$

where  $\sum_{\alpha > n > f}^-$  for electron and  $\sum_{\alpha < n \leq f}^-$  for vacancy. The potential  $V$  is as follows:

$$V_{ijkl}^{|\omega|} = \iint dr_1 dr_2 \Psi_i^*(r_1) \Psi_j^*(r_2) \frac{\sin|\omega|r_{12}}{r_{12}} (1 - \alpha_1 \alpha_2) \Psi_k^*(r_2) \Psi_l^*(r_1). \quad (6b)$$

The separated terms of the sum in (7a) represent the contributions of different channells and a probability of the dipole transition is:

$$\Gamma_{\alpha_n} = \frac{1}{4\pi} \cdot V_{\alpha_n \alpha_n}^{|\omega_{\alpha_n}|}. \quad (6c)$$

According to [6,7], a matrix element in (6b) is written as follows:

$$V_{1234}^{\omega} = [(j_1)(j_2)(j_3)(j_4)]^{1/2} \sum_{\mu} (-1)^{\mu} \begin{pmatrix} j_1 j_3 & \lambda \\ m_1 - m_3 & \mu \end{pmatrix} \times \quad (7)$$

$\times \text{Im}[Q_{\lambda}^{\text{Qu}}(1234) + Q_{\lambda}^{\text{Br}}(1234)]$ ;

where  $j_i$  are the entire single electron momentums,  $m_i$  – their projections;  $Q_{\lambda}^{\text{Qu}}$  is the Coulomb part of interaction,  $Q_{\lambda}^{\text{Br}}$  – the Breit part. The Coulomb part  $Q_{\lambda}^{\text{Qu}}$  is expressed in terms of radial integrals  $R_{\lambda}$ , angular coefficients  $S_{\lambda}$  [2,5]:

$$Q_{\lambda}^{\text{Qu}} = \frac{1}{Z} \{ R_{\lambda}(1243) S_{\lambda}(1243) + R_{\lambda}(\tilde{1}24\tilde{3}) S_{\lambda}(\tilde{1}24\tilde{3}) + \quad (8)$$

$$+ R_{\lambda}(\tilde{1}\tilde{2}43) S_{\lambda}(\tilde{1}\tilde{2}43) + R_{\lambda}(\tilde{1}\tilde{2}4\tilde{3}) S_{\lambda}(\tilde{1}\tilde{2}4\tilde{3}) \}$$

there  $f$  is the large component of radial part of single electron state Dirac function; the sign « $\sim$ » means that in (10) the large radial component  $f_i$  is to be changed by the small  $g_i$  one and the moment  $l_i$  is to be changed by  $\tilde{l}_i = l_i - 1$  for Dirac number  $\alpha_i > 0$  and  $l_i + 1$  for  $\alpha_i < 0$ . The Breit part of  $Q$  is defined as a sum:  $Q_{\lambda}^{\text{Br}} = Q_{\lambda, \lambda-1}^{\text{Br}} + Q_{\lambda, \lambda}^{\text{Br}} + Q_{\lambda, \lambda+1}^{\text{Br}}$ , where contribution of our interest is as:

$$Q_{\lambda}^{\text{Br}} = \frac{1}{Z} \text{Re} \{ R_{\lambda}(124\tilde{3}) S'_{\lambda}(124\tilde{3}) + R_{\lambda}(\tilde{1}\tilde{2}43) S'_{\lambda}(1243) + \quad (9)$$

$$+ R_{\lambda}(\tilde{1}\tilde{2}4\tilde{3}) S'_{\lambda}(\tilde{1}\tilde{2}43) + R_{\lambda}(1\tilde{2}4\tilde{3}) S'_{\lambda}(1\tilde{2}4\tilde{3}) \}$$

All calculations are performed using modified Superatom code developed by Ivanov et al [3, 5, 7].

Table 1

The reduced s dipole transition matrix elements for Fr (see text)

Пер./Mer	PT- DF <sup>SD</sup>	PT- DF <sup>SD</sup> (corr)	EMP	PT- RHF (corr)	PT- RHF	DF	EF- RMP	Exp.
7p <sub>1/2</sub> -7s	4.256	-	-	4.279	4.304	4.179	4.272 4.274	4.277
8p <sub>1/2</sub> -7s	0.327	0.306	0.304	0.291	0.301	-	0.339	
9p <sub>1/2</sub> -7s	0.110	0.098	0.096	-	-	-	0.092	
10p <sub>1/2</sub> -7s	-	-	-	-	-	-	0.063	
7p <sub>3/2</sub> -7s	5.851	-	-	5.894	5.927	5.791	5.891	5.898
8p <sub>3/2</sub> -7s	0.934	0.909	0.908	0.924	-	-	0.918	-
9p <sub>3/2</sub> -7s	0.436	0.422	0.420	-	-	-	0.426	-
10p <sub>3/2</sub> -7s	-	-	-	-	-	-	0.284	-
7p <sub>1/2</sub> -8s	4.184	4.237	4.230	4.165	4.219	4.196	4.228	-
8p <sub>1/2</sub> -8s	10.02	10.10	10.06	10.16	10.00		10.12	-
9p <sub>1/2</sub> -8s	0.985	-	0.977	-	-	-	0.972	-
10p <sub>1/2</sub> -8s	-	-	-	-	-	-	0.395	-
7p <sub>3/2</sub> -8s	7.418	7.461	7.449	7.384	7.470	7.472	7.453	-
8p <sub>3/2</sub> -8s	13.23	13.37	13.32	13.45	13.26		13.35	-
9p <sub>3/2</sub> -8s	2.245	-	2.236	-	-	-	2.232	-
10p <sub>3/2</sub> -8s	-	-	-	-	-	-	1.058	-
7p <sub>1/2</sub> -9s	1.016	-	1.010	-	-	-	1.062	-
8p <sub>1/2</sub> -9s	9.280	-	9.342	-	-	-	9.318	-
9p <sub>1/2</sub> -9s	17.39	-	17.40	-	-	-	17.42	-
10p <sub>1/2</sub> -9s	-	-		-	-	-	1.836	-
7p <sub>3/2</sub> -9s	1.393	-	1.380	-	-	-	1.41	-
8p <sub>3/2</sub> -9s	15.88	-	15.92	-	-	-	15.96	-
9p <sub>3/2</sub> -9s	22.59	-	22.73	-	-	-	22.68	-
10p <sub>3/2</sub> -9s	-	-	-	-	-	-	3.884	-

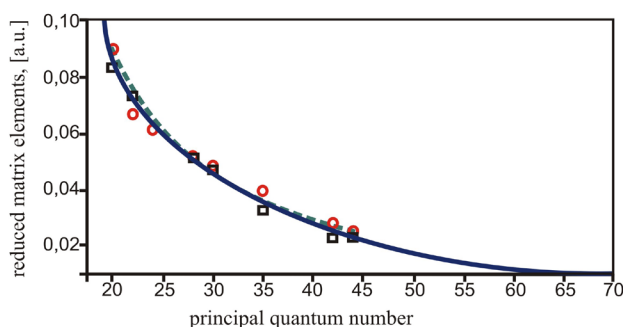
### 3. Results and conclusions

As the test of an approach in table 1 we present the experimental and theoretical values (a.u.)

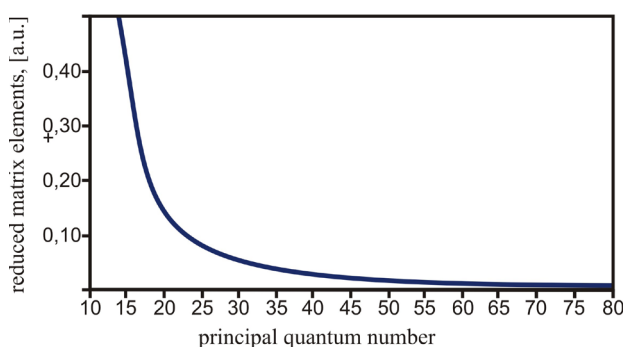
for the reduced s dipole transition matrix elements for Fr: (experimental data – Exp; EF-RMP – our data; “corr”- corrected version with using empirical data; all data from Refs. [8-12]).



In Figure 1 we present a dependence of the calculated reduced dipole matrix elements of principal quantum number for Rydberg atom Rb:  $5P_{3/2} \rightarrow nD_{5/2}$  ( $n \sim 70$ ). The available experimental data are listed as a circle; Theory: continuous line - our data, dotted line- data by Piotrowicz et within the quasi-classical Dyachkov-Pankratov model[11]. In Figure 2 we present the same dependence for Rydberg atom Fr:  $7P_{3/2} \rightarrow nD_{5/2}$ ,  $n=10-80$  (our data).



**Figure 1:** A dependence of the calculated reduced dipole matrix elements of principal quantum number for Rydberg atom Rb:  $5P_{3/2} \rightarrow nD_{5/2}$  ( $n \sim 70$ ). The available experimental data are listed as a circle; Theory: continuous line - our data, dotted line- data by Piotrowicz et within the quasi-classical Dyachkov-Pankratov model (see text).



**Figure 2.** A dependence of the calculated reduced dipole matrix elements of principal quantum number for Rydberg atom Fr:  $7P_{3/2} \rightarrow nD_{5/2}$ ,  $n=10-80$  (our data).

The strict analysis of the data presented shows the great role of the relativistic and inter electron exchange-correlation effects of the second and higher PT orders (the interelectron polarization interaction and mutual screening), as well as the

effect of the non-Coulomb grouping levels in the Rydberg spectra. Finally, the detailed data about the radiative characteristics of complex atoms and ions (including the studied type) is especially necessary for carrying out new types of the Carno atomic machines, radiative quantum sensors, frequency standards etc.

## References

1. Gallagher, T.F., Rydberg Atoms.- Cambridge University Press, 1994..
2. Grant I.P., Relativistic Quantum Theory of Atoms and Molecules. - Oxford, 2008.-650p.
3. Glushkov A.V., Lovett L., Florco T.A., et al, Gauge-invariant QED perturbation theory approach to studying the nuclear electric quadrupole moments, hyperfine structure constants for heavy atoms and ions// Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics (Springer). - 2008. - Vol.18. - P. 505-522.
4. Ternovsky V.B., Svinarenko A.A., Ignatenko A.V., et al, Advanced relativistic model potential approach to calculation of radiation transition parameters in spectra of multicharged ions// Journal of Physics: C Ser. - 2014. - Vol. 548. - P. 012047 (6p.).
5. Ivanov L.N.,Ivanova E.P., Extrapolation of atomic ion energies by model potential method: Na-like spectra// Atom.Data Nucl. Data Tab. - 1979. - Vol. 24. - P. 95-121;
6. Kohn W., Sham L., Quantum density oscillations in an inhomogeneous electron gas//Phys. Rev.A. - 1965. - Vol.137. - P.1697-1710.
7. Glushkov A.V., Ivanov L.N. Radiation decay of atomic states: atomic residue and gauge non-invariant contributions // Phys. Lett.A. -1992. - Vol.170. - P.33-37
8. Florco T. A., Theoretical determination of oscillator strengths of some transitions in the rare-earth atom of Eu// Photoelectronics.-2007.-N16.-P.86-90.
9. Khetselius O.Y., Relativistic perturbation theory calculation of the hyperfine structure parameters for some heavy-element isotopes//Internat. Journal of

- Quantum Chemistry. - 2009. - Vol.109, N14. - P. 3330-3335.
10. Safronova U.I., Johnson W., Derevianko A. Relativistic many-body calculations of energy levels, hyperfine constants, electric-dipole matrix elements, static polarizabilities for alkali-metal atoms // Phys.Rev.A. - 1999. - Vol.60. - P.4476-4486
  11. Piotrowicz M., MacCormick C., Kowalczyk A., et al, Measurement of the electric dipole moments for transitions to rubidium Rydberg states via Autler-Townes splitting // arXiv:1103.0109v2 [quant-ph].-2011.
  12. Martin W., NIST Spectra Database, version 2.0//NIST. - Washington. - 2004.

Стаття надійшла до редакції 27.05.2015 р.

PACS 03.65.-w, 31.30.J-, 32.30.-r UDC 539.18:539:192

## NEW RELATIVISTIC MODEL POTENTIAL APPROACH TO SENSING RADIATIVE TRANSITIONS PROBABILITIES IN SPECTRA OF HEAVY RYDBERG ATOMIC SYSTEMS

*V. B. Ternovsky, A. V. Glushkov, P. A. Zaichko, O. Yu. Khetselius, T. A. Florko*

Odessa State Maritime University, 34, Mechnikov str., Odessa, 65000, Ukraine  
Odessa State Environmental University, 15, Lvovskaya str., Odessa, 65016,  
e-mail: quantflo@mail.ru

### Summary

We have presented an effective relativistic approach for sensing and calculating energy of levels, probabilities and oscillator strengths (transition amplitudes, lifetimes) of a number of radiative transitions in the spectra of heavy Rydberg atoms of alkaline elements. It represents a new version of the relativistic model potential method. The approach is based on the relativistic many-body gauge-invariant perturbation theory with the improved Dirac-Kohn-Sham zeroth approximation and relativistic energy approach (S-matrix adiabatic Gell-Mann and Low formalism). We have shown that during computing the energy and spectroscopic characteristics of the multielectron Rydberg atomic systems a new approach provides a precise accounting exchange-correlation effects, including effect of essentially non-Coulomb grouping of Rydberg levels, pressure continuum. There are received precise data on energy and spectroscopic parameters energy, radiation width, amplitude transitions, the lifetime) for Rydberg atoms Rb, Cs, Fr, particularly, transitions  $nS^{1/2} \rightarrow n^{\prime}P^{1/2,3/2}$  ( $n=5,6$ ;  $n^{\prime}=10-70$ ),  $nP^{1/2,3,2} \rightarrow n^{\prime}D^{3/2,5/2}$  ( $n=5,6$ ;  $n^{\prime}=10-80$ ) in the Rb, Cs spectra; for Rydberg Fr there are in most first calculated and predicted spectroscopic data on transition amplitude, lifetime of Rydberg states and transitions  $7S^{1/2}-nP^{1/2,3/2}$ ,  $7P^{1/2,3,2}-nD^{3/2,5/2}$  ( $n=20-80$ ). Regarding the application of the obtained data it can be indicated on carrying out new types of radiative quantum sensors and frequency standards, quantum electronics and different quantum devices.

**Keywords:** radiative transitions, heavy Rydberg atoms, new method, quantum sensors

## НОВИЙ РЕЛЯТИВІСТСЬКИЙ МЕТОД МОДЕЛЬНОГО ПОТЕНЦІАЛУ ВИЗНАЧЕННЯ ІМОВІРНОСТЕЙ РАДІАЦІЙНИХ ПЕРЕХОДІВ У СПЕКТРАХ ВАЖКИХ РІДБЕРГІВСЬКИХ АТОМНИХ СИСТЕМ

*В. Б. Терновський, О. В. Глушков, П. О. Заїчко, О. Ю. Хецеліус, Т. О. Флорко*

Одеська національна морська академія, вул. Мечникова, 34, Одеса, 65000, Україна  
Одеський державний екологічний університет, вул. Львівська, 15, Одеса, 65016, Україна  
e-mail: quantflo@mail.ru

### Реферат

Ми запропонували ефективний релятивістський підхід до детектування та розрахунку енергій рівнів, ймовірностей і сил осциляторів (амплітуд переходів, часів життя) ряду радіаційних переходів в спектрах важких рідбергівських атомів лужних елементів. Він являє собою версію моделі релятивістської потенційного методу. Підхід заснований на релятивістській багато-частинковій калібрувальній-інваріантній теорії збурень з покращеним Дірак-Кона-Шемівським нульовим наближенням і релятивістському енергетичному формалізмі (S-матричний адиабатичний формалізм Гелл-Манн і Лоу). Показано, що підхід забезпечує досить ефективний ступінь урахування обмінно-кореляційних ефектів, у тому числі ефекту істотно некулонівського групування рідбергівських рівнів, тиску континууму і т.і. Отримано уточнені дані по енергетичним і спектроскопічним параметрам (енергії, радіаційні ширини, амплітуди переходів, час життя) для рідбергівських атомів Rb, Cs, Fr, зокрема, переходів  $nS_{1/2} \rightarrow n'P_{1/2}^{3/2}$  ( $n=5,6$ ;  $n'=10-70$ ),  $nP_{1/2}^{3/2} \rightarrow n'D_{3/2}^{5/2}$  ( $n=5,6$ ;  $n'=10-80$ ) в спектрах Rb, Cs; для рідбергівського Fr розраховані і передбачені спектроскопічні дані по амплітудах переходів, часам життя рідбергівських станів і переходів  $7S_{1/2} \rightarrow nP_{1/2}^{3/2}$ ,  $7P_{1/2}^{3/2} \rightarrow nD_{3/2}^{5/2}$  ( $n=20-80$ ). Стосовно застосувань отриманих даних слід указати на можливість побудови нових типів радіаційних квантових сенсорів і квантових стандартів частоти, а також застосування в галузях квантової електроніки і фізики квантових пристроїв.

**Ключові слова:** радіаційні переходи, важкі рідбергівські атоми, новий метод, квантові сенсори