

Межатомные взаимодействия и термоиндуцированные сдвиги и уширения уровней энергии атомов в циркулярных ридберговских состояниях

А.А.Каменский, В.Д.Овсянников, И.Л.Глухов

Получены аналитические выражения для констант, определяющих энергию дальнего действия (на больших расстояниях, превышающих радиус Ле Руа $R_{LR} \approx 4n^2$) поляризационного взаимодействия мультипольных электрических моментов двух атомов в идентичных ридберговских состояниях с большими главными (n) и максимальными орбитальными (l) и магнитными (m) квантовыми числами ($|m| = l = n - 1$). Найдены асимптотические разложения по степеням n для компонент тензора ван-дер-ваальсова взаимодействия, определяющих зависимость дисперсионной энергии от ориентации межатомной оси. Спонтанное и термоиндуцированное уширение уровней энергии циркулярных состояний представлены аналитически в виде функций главного квантового числа и температуры. Обнаружено, что аналитические формулы для суммы спонтанной и термоиндуцированной ширины линий в области высоких температур и больших главных квантовых чисел (при условии $n^3 k_B T \gg 1$) не содержат вклада не зависящей от температуры спонтанной части уширения. Получены также замкнутые аналитические выражения для функции Фарли–Винга и для зависящих от n и T поправок к асимптотике термоиндуцированного сдвига.

Ключевые слова: атом, ридберговские состояния, межатомное взаимодействие, постоянная Ван-дер-Ваальса, тепловое излучение, сдвиг, ширина уровней энергии.

1. Введение

Бесконечный набор ридберговских состояний атомов/ионов представляет значительный интерес для реализации квантовых методов сверхскоростных вычислений и обработки информации [1–3]. Существующие в настоящее время источники лазерного излучения позволяют не только глубоко охлаждать атомы и удерживать их в электромагнитных ловушках, но и возбуждать эти атомы в строго определенные состояния с заданными квантовыми числами. При этом состояния с малыми орбитальными моментами l имеют специфическую энергетическую структуру, характерную для атомных частиц каждого конкретного химического элемента, а состояния с большими моментами, в частности циркулярные состояния с максимальными для фиксированного главного квантового числа n моментами $l = n - 1$, практически одинаковы для всех атомов. Это связано с тем, что ридберговский электрон с большим орбитальным моментом удерживается в стационарном состоянии полем, почти совпадающим с полем точечного заряда. Основная количественная характеристика энергии одноэлектронного состояния в атоме – квантовый дефект. Для состояний с $l > 5$ он мало отличается от нуля, независимо от структуры остаточного иона любого химического элемента. Поэтому высоковозбужденные циркулярные состояния с максимальной проекцией

орбитального момента на выделенное направление – ось квантования – идентичны соответствующему состоянию атома водорода, описываемому кулоновскими волновыми функциями. Это обстоятельство позволяет рассматривать ридберговские циркулярные состояния всех атомов на основе квантовой теории движения электрона в кулоновском поле. Таким образом, все представленные в настоящей работе результаты расчетов энергии парного взаимодействия двух нейтральных атомов, спонтанных и термоиндуцированных ширины, а также индуцированных тепловым излучением сдвигов уровней энергии циркулярных ридберговских состояний справедливы и могут быть использованы для любых атомов и ионов практически всех химических элементов.

Эффективность управления квантовыми переходами в ридберговские состояния может существенно ограничиваться (или наоборот – усиливаться) влиянием межатомных сил и эффектами взаимодействия с внешними электромагнитными полями, изменяющими энергетический спектр связанных состояний атомных частиц. Поэтому информация об изменении спектра энергий, индуцируемом указанными эффектами, представляет существенный интерес для разработки квантовых технологий, использующих атомы в высоковозбужденных состояниях. В частности, межатомное взаимодействие сдвигает уровни энергии ридберговских состояний, практически полностью блокируя возможность радиационного возбуждения атомов, окружающих один из атомов ансамбля, уже возбужденный резонансным излучением. Такой эффект, называемый в литературе ридберговской блокадой, представляется перспективным, например, для проектирования квантовых логических операций [2].

Кроме межатомного взаимодействия, существенное влияние на уровни энергии ридберговских атомов может

А.А.Каменский, В.Д.Овсянников, И.Л.Глухов. Воронежский государственный университет, физический факультет, Россия, 394018 Воронеж, Университетская пл., 1;
e-mail: ovd@phys.vsu.ru

Поступила в редакцию 12 марта 2019 г., после доработки – 18 марта 2019 г.

оказывать и вездесущее тепловое излучение окружающей среды, называемое излучением черного тела (ИЧТ), в спектральном распределении которого присутствуют не только частоты резонансных переходов между связанными состояниями атомов, но и частоты, превышающие пороговую для ионизации. Взаимодействие с фотонами таких частот стимулирует вынужденные процессы распада, возбуждения, ионизации, приводящие к дополнительному уширению энергетических уровней по сравнению с их естественной шириной. Кроме того, взаимодействие атома с ИЧТ вызывает динамический штарковский сдвиг уровней, в который дают свой вклад фотоны на всех частотах, включая и не влияющие на уширение нерезонансные частоты.

В настоящей работе представлены результаты квантово-механических расчетов количественных характеристик наиболее важных эффектов, влияющих на структуру циркулярных ридберговских состояний атомов. В разд.2 излагается теория возмущений первого порядка по межатомному взаимодействию для количественных расчетов энергии дальнедействующего поляризованного мультиполь-мультипольного взаимодействия атомов на больших расстояниях $R > R_{LR}$ (где $R_{LR} \approx 4n^2$ – радиус Ле Руа [4]). В разд.3 выполнен расчет энергии дисперсионного взаимодействия виртуальных дипольных моментов, возникающих в промежуточных состояниях матричных элементов в теории возмущений второго порядка. Для постоянной Ван-дер-Ваальса $C_6(n, \theta)$, описывающей наиболее важный вклад $\Delta E_{vdw}(n, \theta, R) = -C_6(n, \theta)/R^6$ в энергию дисперсионного взаимодействия, определена асимптотическая зависимость от главного квантового числа циркулярного состояния компонент тензора $C_6(n, \theta)$. Получены аналитические выражения для коэффициентов разложения $C_6(n, \theta)$ по степеням $\cos \theta$, где угол θ определяет направление межатомной оси относительно орбитального момента атома.

В разд.4 представлены аналитические выражения для спонтанной ширины и термоиндуцированного уширения энергетических уровней высоковозбужденных циркулярных состояний. Продемонстрировано экспоненциальное убывание вкладов в уширение от возбуждений высоких связанных состояний и переходов в непрерывный спектр (ионизации). Получено явное выражение для суммарной ширины уровня, учитывающей вклады всех спонтанных и термоиндуцированных переходов. Вычислена поправка к известной формуле Галлагера–Куке [5, 6], пропорциональная квадрату отношения энергии переходов в смежные связанные состояния $|E_n - E_{n\pm 1}| \approx Z^2/n^3$ к тепловой энергии ИЧТ $k_B T$. В разд.5 рассчитан сдвиг энергии ридберговского циркулярного состояния в поле ИЧТ. Найдено аналитическое выражение для функции Фарли–Винга $\mathcal{F}(y)$ в виде знакопеременного ряда по нечетным степеням аргумента y , позволяющее определять численное значение $\mathcal{F}(y)$ с заданной точностью в широком интервале численных значений y .

В дальнейшем в тексте статьи, если специально не оговорено, используется атомная система единиц $e = m = \hbar = 1$, в которой скорость света численно совпадает с обратной величиной постоянной тонкой структуры, $c = \alpha^{-1} = 137.036$, температура ИЧТ выражена в градусах Кельвина, постоянная Больцмана k_B определяется отношением $1/T_a$ атомной единицы энергии к атомной единице температуры $T_a = 315776$ К.

2. Поляризационное взаимодействие атомов

2.1. Оператор асимптотического взаимодействия

Оператор электростатического взаимодействия \hat{V}_{AB} двух нейтральных атомов А и В в состояниях с ненулевыми орбитальными моментами L_A и L_B на больших расстояниях, $R > R_{LR}$, можно представить в виде

$$\hat{V}_{AB}(R) = \sum_{L_A=1}^{\infty} \sum_{L_B=1}^{\infty} \hat{V}_{L_A L_B}(R) \quad (1)$$

суммы операторов взаимодействия электрических моментов с мультипольностью 2^L

$$\hat{Q}_{\lambda\mu}^{A(B)} = \sum_{i=1}^{Z_{A(B)}} r_{A(B)i}^{\lambda} C_{\lambda\mu}(\mathbf{n}_{A(B)i}). \quad (2)$$

Здесь учтен вклад каждого электрона из $Z_A(Z_B)$ электронов, описываемого его радиусом-вектором $\mathbf{r}_{A(B)i} = r_{A(B)i} \times \mathbf{n}_{A(B)i}$ относительно ядра ($\mathbf{n}_{A(B)i}$ – единичный вектор, направленный из ядра в i -й электрон) атома А(В). Отдельное слагаемое суммы (1) представляет собой оператор взаимодействия электрических моментов с мультипольностью 2^{L_A} и 2^{L_B} атомов А и В:

$$\hat{V}_{L_A L_B}(R) = \frac{(-1)^{L_B}}{R^{L+1}} \sqrt{\frac{(2L)!}{(2L_A)!(2L_B)!}} (C_L(\mathbf{n}) \cdot \{\hat{Q}_{L_A}^A \otimes \hat{Q}_{L_B}^B\}_L), \quad (3)$$

$$L = L_A + L_B.$$

Здесь использованы общепринятые обозначения квантовой теории углового момента для скалярных и тензорных произведений [7]; $C_{L\mu}(\mathbf{n}) = \sqrt{4\pi/(2L+1)} Y_{L\mu}(\mathbf{n})$ – модифицированная сферическая функция, определяющая зависимость мультипольного взаимодействия от угловых переменных вектора $\mathbf{n} = \mathbf{R}/R$, направленного из атома А в атом В (рис.1).

2.2. Первый порядок теории возмущений для асимптотического взаимодействия двух ридберговских атомов

В первом порядке теории возмущений по взаимодействию (1), (3) сдвиг энергии в системе двух атомов $\Delta E_{AB}^{(1)} = \langle AB | \hat{V}_{AB}(\mathbf{R}) | AB \rangle$ определяется суммой вкладов четных электрических мультипольных моментов $Q_{2L} = C_{102L0}^{l0} \times \langle nl | r^{2L} | nl \rangle$ (в состояниях определенной четности матричные элементы нечетных моментов равны нулю). Пусть волновая функция $\langle \mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B | AB \rangle = \langle \mathbf{r}_A | A \rangle \langle \mathbf{r}_B | B \rangle$ задает состо-

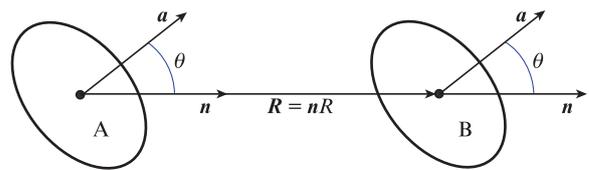


Рис.1. Атомы в одинаковых циркулярных состояниях с максимальными магнитными и орбитальными квантовыми числами, $l = |m| = n - 1$, на расстоянии R друг от друга. Угол между межатомной осью и осью квантования (единичные векторы \mathbf{n} и \mathbf{a} соответственно) равен θ .

яние системы, состоящей из двух невзаимодействующих атомов А и В в их стационарных состояниях $\langle r_{A(B)} \rangle = \langle r_{A(B)} | n_{A(B)} l_{A(B)} m_{A(B)} \rangle$ с главными квантовыми числами $n_{A(B)}$, угловыми моментами $l_{A(B)} \geq 1$, а также магнитными квантовыми числами $m_{A(B)}$. Тогда

$$\Delta E_{AB}^{(1)}(\mathbf{R}) = \sum_{L_A=1}^{l_A} \sum_{L_B=1}^{l_B} C_{l_A m_A 2L_A 0}^{l_A m_A} C_{l_B m_B 2L_B 0}^{l_B m_B} \times \frac{(2L)! Q_{2L_A}^A Q_{2L_B}^B}{(2L_A)!(2L_B)! R^{2L+1}} P_{2L}(na). \quad (4)$$

Здесь, как и в уравнении (3), $L = L_A + L_B$ и использованы общепринятые обозначения для коэффициентов Клебша – Гордана $C_{\alpha\beta\gamma}^{\zeta}$ и полиномов Лежандра $P_{2L}(\cos\theta) = C_{2L,0}(\theta, \varphi)$. Четность полиномов соответствует независимости энергии (4) от выбора направления на межатомной оси:

$$\Delta E_{AB}^{(1)}(\mathbf{R}) = \Delta E_{AB}^{(1)}(-\mathbf{R}).$$

Расчет для циркулярного состояния с помощью кулоновских волновых функций дает для слагаемого первого неисчезающего порядка в разложении по параметру $1/R$ квадруполь-квадрупольного взаимодействия зависимость от главного квантового числа $n \geq 2$ и межатомного расстояния \mathbf{R} вида

$$\Delta E_{2-2}(n, \mathbf{R}) = \frac{3}{2} n^4 (n^2 - 1)^2 \frac{P_4(\cos\theta)}{R^5}. \quad (5)$$

Для состояний с $n \geq 3$ в сумме (4) появляется следующее слагаемое, определяющее энергию взаимодействия квадрупольного и гексадекапольного электрических моментов $Q_2^{A(B)}$ и $Q_4^{B(A)}$:

$$\Delta E_{2-4}(\mathbf{R}) + \Delta E_{4-2}(\mathbf{R}) = -\frac{45}{8} n^6 (n^2 - 1)^2 (n^2 - 4) \frac{P_6(\cos\theta)}{R^7}. \quad (6)$$

Эта энергия является величиной порядка $4n^4/R^2$ относительно квадруполь-квадрупольного слагаемого (5). Указанное отношение, которое эквивалентно отношению среднего квадрата радиуса орбиты ридберговского электрона $\langle n|r^2|n \rangle \propto n^4$ к квадрату расстояния R между атомами, достаточно мало при $R > R_{LR} \approx 4n^2$. Следующее слагаемое, порядка $1/R^9$, соответствующее гексадекаполь-гексадекапольному и квадруполь-2⁶-польному взаимодействиям,

$$\Delta E_{4-4}(\mathbf{R}) + 2\Delta E_{2-6}(\mathbf{R}) = \frac{35}{32} n^8 (n^2 - 1)^2 (n^2 - 4) (17n^2 - 108) \frac{P_8(\cos\theta)}{R^9}, \quad (7)$$

составляет величину порядка $12n^8/R^4$ относительно энергии $\Delta E_{2-2}(\mathbf{R})$. Таким образом, в области межатомных расстояний $R > R_{LR}$ сдвиги (5)–(7) образуют убывающую последовательность, так что главный вклад в энергию первого порядка (4) дает слагаемое (5), соответствующее $L_A = L_B = 1$.

Число слагаемых в правой части (4) определяется числом вкладов в $\Delta E_{AB}^{(1)}$ от энергии взаимодействий четных электрических моментов с мультипольностью 2^{2q} , где $q = 1, 2, \dots, l = n - 1$. При этом максимальный порядок муль-

типольного момента циркулярного состояния равен 2^{2n-2} , а соответствующая степень R в знаменателе дроби в (4) равна $4n - 3$. Условие применимости дальнедействующего приближения для $n = 100$ выполняется при $R > R_{LR} \approx 4 \times 10^4$ ат. ед. ≈ 2.12 мкм. На данном расстоянии величина $\Delta E_{AB}^{(1)} < 1$ ГГц. Такой отстройки вполне достаточно для уменьшения на пять-шесть порядков вероятности резонансного возбуждения ридберговского состояния. При этом надо иметь в виду, что отдельные слагаемые сдвига (4) исчезают в узлах полиномов $P_{2L}(na)$. Следует также отметить, что $\Delta E_{AB}^{(1)}$ полностью исчезает после усреднения по ориентациям радиуса-вектора \mathbf{R} .

3. Дисперсионное взаимодействие атомов в циркулярных состояниях

3.1. Теория возмущений второго порядка по межатомному взаимодействию

Во втором порядке теории возмущений сдвиг двухатомной энергии

$$\Delta E_{AB}^{(2)}(\mathbf{R}) = -\langle AB | \hat{V}_{AB}(\mathbf{R}) G'_{AB}(r_A, r_B; r'_A, r'_B) \hat{V}_{AB}(\mathbf{R}) | AB \rangle = -\sum_{L_1 L_2 L'_1 L'_2} \frac{\varepsilon_{L_1 L_2 L'_1 L'_2}(\mathbf{n})}{R^{L+L'+2}} \quad (8)$$

определяется матричным элементом с двумя операторами взаимодействия (1) и редуцированной двухатомной функцией Грина, которая включает в себя суммы по связанным состояниям и интегралы по состояниям непрерывного спектра невзаимодействующих атомов:

$$G'_{AB}(r_A, r_A; r'_A, r'_A) = \sum_{n_1, n_2} \frac{\langle r_A | n_1 \rangle \langle n_1 | r'_A \rangle \langle r_B | n_2 \rangle \langle n_2 | r'_B \rangle}{E_{n_1} + E_{n_2} - E_A - E_B - i0}. \quad (9)$$

Бесконечно малая мнимая величина в знаменателе дроби обозначает правило обхода сингулярностей на действительной оси энергий.

Функция Грина (9) при подстановке в (8) учитывает матричные элементы всех виртуальных мультипольных переходов от $L_{A(B)} = 1$ до бесконечности с одинаковой четностью величин $L_{A(B)}$ и $L'_{A(B)}$ в обоих операторах $\hat{V}_{L_A L_B}(\mathbf{R})$ матричного элемента второго порядка. Поэтому сдвиг $\Delta E_{AB}^{(2)}(\mathbf{R})$ разлагается в ряд (8) по четным степеням параметра $1/R$. Главный вклад в $\Delta E_{AB}^{(2)}(\mathbf{R})$ дает слагаемое первого неисчезающего порядка по $1/R$, $\Delta E_{AB}^{(2)}(\mathbf{R}) \approx -C_6^{(2)}(\mathbf{n}) \times R^{-6}$, где постоянная Ван-дер-Ваальса $C_6^{(2)}(\mathbf{n}) = \varepsilon_{1111}(\mathbf{n})$ определяет взаимодействие виртуальных электрических дипольных моментов атомов А и В. Из общего соотношения между коэффициентами ряда следует неравенство $n^2/R < 1$, задающее область сходимости ряда (8), которое согласуется с неравенством $R > R_{LR}$ для поправки первого порядка (4).

После интегрирования по угловым переменным ридберговских электронов постоянную Ван-дер-Ваальса можно представить в виде полинома от косинуса угла θ между осью квантования и межатомной осью (рис. 1) [8]:

$$C_6(n, \theta) = B_0(n) + B_2(n) \cos^2 \theta + B_4(n) \cos^4 \theta. \quad (10)$$

Коэффициенты $B_k(n)$ полинома (10) представляют собой линейные комбинации зависящих от n двухатомных радиальных матричных элементов второго порядка вида [8]

$$\rho_{l'l''} = \langle AB | r_A r_B g_{l'l''}^{AB}(r_A r_B; r'_A r'_B) r'_A r'_B | AB \rangle. \quad (11)$$

3.2. Асимптотическая зависимость постоянной Ван-дер-Ваальса от главного квантового числа ридберговского циркулярного состояния

Явный вид комбинаций матричных элементов (11), определяющих неприводимые компоненты тензора ван-дер-ваальсова взаимодействия (10), можно получить с помощью стандартных методов квантовой теории углового момента [7]. Наиболее эффективным для численных расчетов $\rho_{l'l''}$ является спектральное разложение радиальной функции Грина $g_{l'l''}^{AB}(r_A r_B; r'_A r'_B)$ по полному набору векторов в подпространстве двухатомных состояний с орбитальными моментами $l' = l \pm 1$ и $l'' = l \pm 1$, аналогично разложению функции Грина (9). Тогда матричный элемент (11) можно представить в виде сумм по состояниям дискретного спектра и интегралов по непрерывным спектрам атомов:

$$\rho_{l'l''} = \sum_{n' > l'+1} \sum_{n'' > l''+1} \frac{|\langle n' l' | r | n l \rangle \langle n'' l'' | r | n l \rangle|^2}{E_{n'} + E_{n''} - 2E_n - i0}. \quad (12)$$

Численные расчеты этих матричных элементов показывают, что слагаемые рядов по состояниям дискретного спектра быстро убывают с ростом разностей $n' - n$ и $n'' - n$. При $n \gg 1$ вклад состояний дискретного спектра с $n' - n > 10$ и $n'' - n > 10$ становится пропорциональным $\exp(-2n)$ для каждого из двух рядов (12) и не влияет на результат суммирования с точностью до пятого десятичного знака. Аналогично мал и вклад интегралов по состояниям непрерывного спектра обоих атомов. Как показывает расчет, постоянная Ван-дер-Ваальса положительна для циркулярных состояний с $n < 6$, что соответствует ван-дер-ваальсову притяжению, и отрицательна для $n = 6$ и всех $n \geq 8$ независимо от угла θ , что отвечает отталкиванию атомов в циркулярных состояниях с указанными главными квантовыми числами. Знак константы $C_{\perp}(n=7) = C_6(n=7, \theta = \pi/2)$ меняется с отрицательного на положительный с ростом угла θ от нуля до $\pi/2$ с узлом при $\theta_0 = 34.17^\circ$, для которого ван-дер-ваальсово взаимодействие исчезает, переходя в отталкивание при $\theta < \theta_0$ и в притяжение при $\theta > \theta_0$. На рис.2 приведены зависимости от n поперечной, $C_{\perp}(n) = C_6(n, \theta = \pi/2)$, и продольной, $C_{\parallel}(n) = C_6(n, \theta = 0)$, компонент постоянной Ван-дер-Ваальса, нормированных на асимптотическую зависимость $C_6(n, \theta) \propto n^{12}$ в области небольших

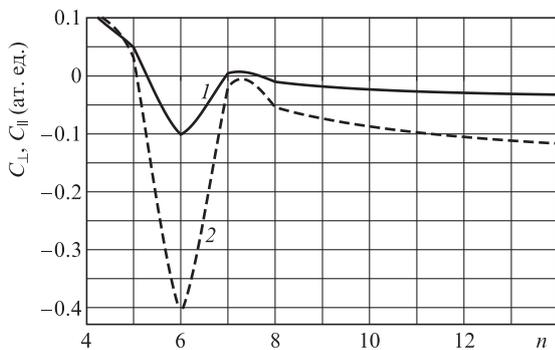


Рис.2. Нормированные на асимптотическую зависимость $C_6(n, \theta) \propto n^{12}$ постоянные Ван-дер-Ваальса $C_{\perp} = C_6(n, \theta = \pi/2)/n^{12}$ (1) и $C_{\parallel} = C_6(n, \theta = 0)/n^{12}$ (2).

значений главных квантовых чисел циркулярных состояний ($4 \leq n \leq 14$).

Согласно «правилу Бете» [9], максимальные значения дипольных матричных элементов в правой части выражения (12) $\langle n + 1l + 1 | r | nl \rangle \approx \langle n - 1l - 1 | r | nl \rangle \approx n^2$ соответствуют смежным значениям главного и орбитального квантовых чисел $n \pm 1$ и $l \pm 1$, одновременно уменьшаемым или увеличиваемым на единицу относительно квантовых чисел циркулярного состояния. Поэтому основной вклад в сумму (12) дают близкие к $|nl\rangle$ промежуточные состояния $|n' = n \pm 1, l' = l \pm 1\rangle$ и $|n'' = n \pm 1, l'' = l \pm 1\rangle$. При $n \gg 1$ справедливо приближенное равенство $E_{n-1} + E_{n+1} - 2E_n \approx -3/n^4$. Таким образом, наибольшие по абсолютной величине численные значения имеют матричные элементы с $l' = l \pm 1, l'' = l \mp 1$: $\rho_{l+l-1} = \rho_{l-l+1} \approx -2n^{12}/3$. Эти величины и дают основной вклад в коэффициенты разложения постоянной Ван-дер-Ваальса (12). Асимптотические значения неприводимых частей

$$B_0 \approx -n^{12}/24, \quad B_2 \approx n^{12}/4, \quad B_4 \approx -3n^{12}/8 \quad (13)$$

определяют зависимость $C_6(n, \theta)$ от главного квантового числа $n \gg 1$ и угла θ вида

$$C_6(n, \theta) = -\frac{n^{12}}{24}(1 - 3\cos^2\theta)^2 + O(n^{11}). \quad (14)$$

Зависящее от направления межатомной оси выражение в круглых скобках обращается в нуль при «магическом» значении угла $\theta = \theta_m \approx 54.7^\circ$, удовлетворяющем условию $\cos^2\theta_m = 1/3$. Отметим, что угол θ_m соответствует узлу полинома Лежандра $P_2(\cos\theta_m) = 0$. При этом абсолютное значение константы $C_6(n, \theta_m)$ существенно уменьшается, оставаясь пропорциональным n^{11} (рис.3).

Для определения величины $C_6(n, \theta_m)$ в окрестности углов $\theta \approx \theta_m$ можно воспользоваться разложениями коэффициентов полинома (10) по степеням n с учетом слагаемых 11-й, 10-й, 9-й и т. д. степеней n . Эти разложения можно получить из соответствующих выражений для амплитуд и энергий переходов, суммируемых в выражениях (8), (9) и (12). Аналитические расчеты позволяют записать выражения (13) с учетом слагаемых, пропорциональных n^{11} и n^{10} , в виде [8]

$$B_0 \approx -\frac{n^{12}}{24}\left(1 - \frac{3}{n} + \frac{33.2}{n^2}\right), \quad B_2 \approx \frac{n^{12}}{4}\left(1 - \frac{6}{n} + \frac{14.5}{n^2}\right),$$

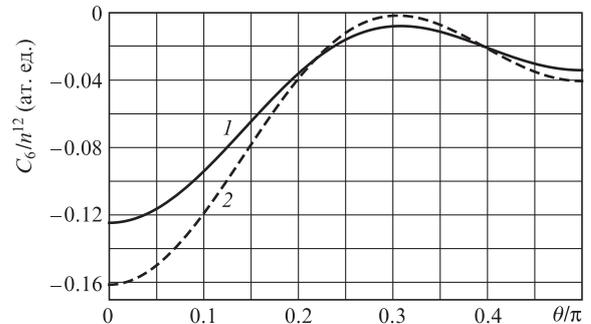


Рис.3. Зависимости постоянной Ван-дер-Ваальса от угла $\theta \neq \theta_m$ для циркулярных состояний из оболочки с $n = 16$ (1) и 100 (2). В окрестности магического угла $\theta_m = 0.31\pi$ абсолютная величина постоянной уменьшается в n раз, что соответствует переходу от асимптотики $C_6 \propto n^{12}$ к асимптотике $C_6 \propto n^{11}$.

$$B_4 \approx -\frac{3n^{12}}{8} \left(1 - \frac{5}{n} - \frac{0.79}{n^2}\right). \tag{15}$$

Экспериментальное наблюдение описанных выше зависимостей постоянной Ван-дер-Ваальса от направления межатомной оси представляется возможным при помещении ультрахолодных атомов в постоянное электрическое или магнитное поле, которое не только задает направление оси квантования, но и позволяет существенно увеличить время жизни циркулярных ридберговских состояний [1]. Практической реализации такой возможности способствует более высокая степень зависимости от n константы C_6 ($C_6 \propto n^{12}$) по сравнению с зависимостью от n сдвигов в электрическом и магнитном полях, определяемых соответственно поляризуемостью $\alpha_n \propto n^6$ для квадратичного эффекта Штарка и линейным по магнитному квантовому числу $|m| = n - 1$ эффектом Зеемана.

4. Естественная и термоиндуцированная ширины уровня энергии циркулярного состояния

4.1. Естественная ширина

Спонтанная ширина уровня энергии циркулярного состояния $|nl\rangle$ определяется вероятностью дипольного радиационного перехода в ближайшее состояние $|n' = n - 1, l' = l - 1\rangle$ с излучением фотона с частотой $\omega_{nn'} = E_n - E_{n'} \approx Z^2/n^3$. (Здесь и далее Z – заряд остаточного иона, равный единице для нейтрального атома.) Общее выражение для вероятности дипольного радиационного перехода [9] после интегрирования по угловым переменным и суммирования по направлениям поляризации спонтанно испускаемого фотона и по проекциям орбитального момента конечного состояния ридберговского электрона можно представить в виде

$$\Gamma_n^{sp} = \frac{4\omega_{nn-1}^3(n-1)}{3c^3(2n-1)} | \langle n-1, l-1 | r | nl \rangle |^2. \tag{16}$$

Подставляя в правую часть (16) выражения для частоты $\omega_{nn-1} = Z^2(2n-1)/[2n^2(n-1)^2]$ и радиального матричного элемента $\langle n-1, l-1 | r | nl \rangle$, получаем

$$\Gamma_n^{sp} = \frac{4Z^4}{3c^3 n^3 (n-1)(2n-1)} \left[\frac{4n(n-1)}{(2n-1)^2} \right]^{2n-1}. \tag{17}$$

Как видно из этого выражения, естественная ширина ридберговского циркулярного состояния $\Gamma_n^{sp} \approx 2Z^4/(3c^3 n^5) \approx 2.6 \times 10^{-7} Z^4/n^5$ примерно в n^2 раз меньше ширины $\Gamma_n^{sp} \approx 1.3 \times 10^{-7} f(n, l) Z^4/(n^3 l^2)$ состояний с малыми орбитальными моментами $l = 1, 2, \dots$, что способствует «выживанию» и возможности практического использования состояний с максимальными орбитальными моментами из водородоподобной оболочки с фиксированным n . Фактор $f(n, l)$ плавно зависит от l , практически совпадая с единицей, $f(n, l) \approx 1$, для малых l , медленно возрастая с ростом l , так что для больших значений орбитального момента $f(n, l) \rightarrow 2$ при $l \rightarrow n \gg 1$ [9,10]. Ридберговские состояния имеют высокую чувствительность к слабым внешним полям, в том числе и к полю теплового излучения окружающей среды (ИЧТ). Поэтому при определении частот и ширины линий радиационных переходов из ридберговских состо-

яний необходимо учитывать взаимодействие атома с полем ИЧТ.

4.2. Индуцированные ИЧТ радиационные переходы в связанные состояния

Тепловое излучение индуцирует зависящие от температуры сдвиги и уширения атомных уровней, которые можно отождествить с действительной и мнимой частями штарковской энергии. В области интересных для практического использования температур для оценки штарковской энергии взаимодействия атома с полем теплового излучения достаточно ограничиться квадратичными по напряженности поля E эффектами, обусловленными поляризуемостью атомных уровней. В силу хаотичности направлений и поляризаций действующего на атом теплового излучения эта энергия

$$\Delta E_{nl}^{BRR} = \epsilon_{nl}^{BRR} - i \frac{\Gamma_{nl}^{BRR}}{2} = - \int_0^\infty \frac{E^2(\omega, T)}{4} \alpha_{nl}^s(\omega) d\omega \tag{18}$$

определяется только скалярной частью тензора дипольной динамической поляризуемости [11], которую можно представить в виде суперпозиции радиальных матричных элементов второго порядка [12]:

$$\alpha_{nl}^s(\omega) = \frac{1}{3(2l+1)} \times \sum_{l'=l\pm 1} \langle nl | r' [g_l^{E_{nl}+\omega+i0}(r';r) + g_l^{E_{nl}-\omega+i0}(r';r)] r | nl \rangle. \tag{19}$$

Здесь $l_{\gt} = (l + l' + 1)/2$ – больший из двух угловых моментов l и l' . Действительную и мнимую части радиальной функции Грина можно выделить из спектрального разложения по полному набору состояний свободного атома, используя соотношение Сохоцкого для резонансных слагаемых:

$$g_l^{E_{nl}\pm\omega+i0}(r';r) = \sum_n \langle r' | n' l' \rangle \langle n' l' | r \rangle \times \left[\mathcal{P} \left(\frac{1}{E_{n'l'} - E_{nl} \mp \omega} \right) + i\pi\delta(E_{n'l'} - E_{nl} \mp \omega) \right] + \int_0^\infty \langle r' | \epsilon l' \rangle \langle \epsilon l' | r \rangle \left[\mathcal{P} \left(\frac{1}{\epsilon - E_{nl} \mp \omega} \right) + i\pi\delta(\epsilon - E_{nl} \mp \omega) \right] d\epsilon. \tag{20}$$

Вместе с суммой по состояниям дискретного спектра здесь присутствует и интеграл по непрерывному спектру состояний атома с положительной энергией $\epsilon > 0$ и орбитальным моментом l' . Тогда действительная часть штарковской энергии (18) представляется в виде обозначаемого символом \mathcal{P} главного значения интеграла по частоте теплового излучения.

Используя распределение Планка для плотности энергии теплового излучения, квадрат напряженности электрического поля на частоте ω можно представить в виде

$$E^2(\omega T) = \frac{8\omega^3}{\pi c^3 \{ \exp[\omega/(k_B T)] - 1 \}}. \tag{21}$$

Мнимая часть энергии (18) определяется суммарной вероятностью индуцированных тепловым излучением ра-

диационных переходов из циркулярного состояния в состояние дискретного и непрерывного спектров. Частоты таких переходов определяются аргументами δ -функций Дирака из правой части выражения (20). В частности, слагаемое, соответствующее радиационному распаду и обращающее в нуль аргумент δ -функции Дирака на частоте теплового фотона $\omega = E_{nl} - E_{n-1l-1} = \omega_{nn-1}$, присутствует в функции Грина $g_{l'}^{E_{nl}-\omega+i0}(r';r)$ с орбитальным моментом $l' = l - 1$. При этом вероятность термоиндуцированного распада

$$\Gamma_n^d = \Gamma_n^{\text{sp}} \bar{n}(\omega_{nn-1}, T) \quad (22)$$

отличается от вероятности (17) спонтанного перехода в циркулярное состояние из соседней оболочки с $n' = n - 1$ множителем

$$\bar{n}(\omega_{nn-1}, T) = \frac{1}{\exp[\omega_{nn-1}/(k_B T)] - 1}, \quad (23)$$

определяющим число тепловых фотонов (число заполнения или населенность) распределения Планка на частоте $\omega_{nn-1} \approx Z^2/n^3$. Функцию (23) можно рассматривать как относительную вероятность вынужденного радиационного распада связанного состояния атома с переходом на нижний уровень энергии: $R_n^d(T) = \Gamma_n^d(T)/\Gamma_n^{\text{sp}} = \bar{n}(\omega_{nn-1}, T)$. Важной особенностью этой функции главного квантового числа и температуры при $\omega_{nn-1}/(k_B T) \approx Z^2/(n^3 k_B T) \ll 1$ является обратная пропорциональность квадрату заряда остаточного иона. Следовательно, относительная скорость распадов $R_n^d(T) \propto 1/Z^2$ высоковозбужденных состояний ионов снижена в Z^2 раз по сравнению с аналогичной характеристикой нейтральных атомов.

Асимптотическое (при $n^3 k_B T/Z^2 \gg 1$) выражение для вероятности термоиндуцированного распада можно записать в виде

$$\Gamma_n^d(T) = \frac{2Z^2 k_B T}{3c^3 n^2} \left\{ 1 - \frac{1}{2n} Q_5(1/n) - o(1/n^7) + \frac{1}{12} \left(\frac{Z^2}{n^3 k_B T} \right)^2 \left[1 + \frac{5}{2n} + \frac{35}{8n^2} + \frac{157}{24n^2} + \frac{3433}{384n^4} + \frac{14753}{1280n^5} + o(1/n^6) \right] \right\} - \frac{\Gamma_n^{\text{sp}}}{2}, \quad (24)$$

где

$$Q_5(x) = 1 + \frac{3}{4}x + \frac{5}{12}x^2 + \frac{35}{192}x^3 + \frac{91}{1920}x^4 - \frac{451}{23040}x^5$$

– полином пятого порядка. Разложение по степеням $1/n$ в первом слагаемом в фигурных скобках, пропорциональном температуре, возникает в результате произведения асимптотических разложений спонтанной ширины (17) и частоты $\omega_{nn-1} = Z^2(2n-1)/[2n^2(n-1)^2]$ перехода. Не зависящее от температуры слагаемое $-\Gamma_n^{\text{sp}}/2$ появляется из разложения населенности (23) в ряд по степеням аргумента экспоненты: $(\exp x - 1)^{-1} = 1/x - 1/2 + x/12 - x^3/720 + \dots$

В отличие от распада с излучением фотона и переходом (как спонтанно, так и вынужденно) в состояние с меньшей энергией, под действием теплового излучения атом может также поглощать тепловые фотоны и совершать вынужденные переходы в связанные состояния с

бóльшей энергией. Такие состояния с $n' > n$ и орбитальными моментами $l' = l \pm 1$ присутствуют в разложении функции Грина $g_{l'}^{E_{n'l}+\omega+i0}(r';r)$ (20). Дельта-функции мнимой части выбирают из интеграла (18) частоты фотонов теплового излучения, совпадающие с частотами переходов атома в верхние связанные состояния: $\omega = \omega_{n'n} = E_{n'} - E_n$. Таким образом, суммарная вероятность возбуждений представляется в виде

$$\Gamma_n^e(T) = \frac{4}{3c^3(2l+1)n} \sum_{n', l' = l \pm 1}^{E_{n'l} > E_n} \frac{l > \omega_{n'n}^3 |\langle n'l'r|nl \rangle|^2}{\exp[\omega_{n'n}/(k_B T)] - 1}, \quad (25)$$

где суммирование распространяется на весь бесконечный набор связанных состояний с главными квантовыми числами $n' \geq n + 1$ и орбитальными моментами $l' = n, n - 2$. Аналитические выражения для радиальных матричных элементов переходов в состояния с $n' = n + p$ ($p = 1, 2, \dots$)

$$\begin{aligned} & |\langle n+p \ l+1 | r | nl \rangle|^2 \\ &= 4n^2 \frac{(p+1)(2n+p-1)}{p(2n+p)} |\langle n+p \ l-1 | r | nl \rangle|^2 \\ &= \frac{p^{2p-3} n^2 (n+p)^2 (2n)^p}{p!(2n+p)^{2p-1} Z^2} \left[\frac{4n(n+p)}{(2n+p)^2} \right]^{2n+2} \end{aligned} \quad (26)$$

показывают, что при $n \gg 1$ слагаемые ряда в (25) с промежуточным моментом $l' = l + 1$ примерно в $4n^2(p+1)/p$ раз превышают соответствующие слагаемые ряда с $l' = l - 1$, что отвечает правилу Бете [9]. При этом последующий член в обоих рядах (для $l' = l \pm 1$) примерно в $2n/p$ раз меньше предыдущего, так что ряд в (25) быстро сходится при всех значениях температуры T . В частности, при $n = 5$ для определения вероятности возбуждения с точностью до пятого десятичного знака достаточно учесть слагаемые ряда с $n' \leq 30$, для получения точности до седьмого знака достаточно в сумме по n' учесть 150 слагаемых. При $n = 10$ и необходимой точности до пятого и седьмого знаков достаточно учета вкладов от слагаемых с $n' < 26$ и $n' < 85$ соответственно. При $n = 100$ достаточно учесть не более пяти и семи слагаемых, определяющих сумму ряда в (25) с относительными погрешностями 10^{-5} и 10^{-7} соответственно. Такое ускорение сходимости связано с быстрым убыванием радиальных матричных элементов дипольного перехода $|n\rangle \rightarrow |n' = n + p\rangle$, зависимость которых от главного квантового числа циркулярного состояния при больших значениях n и p ($n' = n + p \gg n \gg 1$) становится пропорциональной $\exp(-2n)$:

$$\begin{aligned} & |\langle n' \ l+1 | r | nl \rangle|^2 \approx 4n^2 |\langle n' \ l-1 | r | nl \rangle|^2 \\ & \approx \frac{|\langle \varepsilon = 0 \ l+1 | r | nl \rangle|^2}{n^3} Z^2, \end{aligned} \quad (27)$$

где

$$|\langle \varepsilon = 0 \ l+1 | r | nl \rangle|^2 \approx \frac{2^{2(n+2)} n^{9/2}}{\sqrt{\pi} Z^4} \exp(-2n) \quad (28)$$

– матричный элемент порогового ионизационного перехода в состояние континуума с нулевой энергией. По этой же причине вклад $\Gamma_n^{\text{ion}}(T)$ вероятности ионизационных переходов в состояния непрерывного спектра в полную вероятность возбуждений состояний с энергией $E_{\text{exc}} > E_n$

становится экспоненциально малым [10] и при $n > 10$ не влияет на первые семь десятичных значащих цифр величины, определяющей полную ширину $\Gamma_n^{\text{tot}}(T) = \Gamma_n^{\text{sp}}(T) + \Gamma_n^{\text{d}}(T) + \Gamma_n^{\text{e}}(T) + \Gamma_n^{\text{ion}}(T)$ циркулярного ридберговского состояния.

Используя аналитические выражения для радиальных матричных элементов (26) и частот переходов $\omega_{n'n}$, можно получить аналогичное (24) асимптотическое представление для вероятности термоиндуцированного возбуждения (25) в виде

$$\begin{aligned} \Gamma_n^{\text{e}}(T) = & \frac{2Z^2 k_B T}{3c^3 n^2} \left\{ 1 + \frac{1}{2n} Q_5(1/n) - o(1/n^7) \right. \\ & + \frac{1}{12} \left(\frac{Z^2}{n^3 k_B T} \right)^2 \left[1 + \frac{7}{2n} + \frac{65}{8n^2} + \frac{383}{24n^2} + \frac{11015}{384n^4} \right. \\ & \left. \left. + \frac{62527}{1280n^5} + o(1/n^6) \right] \right\} - \frac{\Gamma_n^{\text{sp}}}{2}. \end{aligned} \quad (29)$$

Формулы (24) и (29) показывают, что в суммарной вероятности $\Gamma_n^{\text{tot}}(T)$ спонтанных и термоиндуцированных переходов не зависящая от температуры составляющая Γ_n^{sp} исчезает, оставляя только зависящие от температуры слагаемые. При этом в сумме $\Gamma_n^{\text{d}}(T) + \Gamma_n^{\text{e}}(T)$ исчезает и полином $Q_5(1/n)$, оставляя коэффициент пропорционального температурного слагаемого строго равным единице. Таким образом, при выполнении условия $Z^2/(n^3 k_B T) \ll 1$ и без учета экспоненциально малой вероятности термоиндуцированной ионизации полную ширину циркулярного ридберговского уровня энергии можно представить в виде

$$\begin{aligned} \Gamma_n^{\text{tot}}(T) = & \Gamma_n^{\text{sp}}(T) + \Gamma_n^{\text{d}}(T) + \Gamma_n^{\text{e}}(T) \\ = & \frac{4Z^2 k_B T}{3c^3 n^2} \left\{ 1 + \frac{1}{12} \left(\frac{Z^2}{n^3 k_B T} \right)^2 \left[1 + \frac{3}{n} + \frac{25}{4n^2} + \frac{45}{4n^3} \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{301}{16n^4} + \frac{483}{16n^5} + o(1/n^6) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (30)$$

Здесь учтены все слагаемые разложения в ряды по степеням малого параметра $1/n \ll 1$ матричных элементов (26) и частот $\omega_{n'n}$ вплоть до $1/n^7$, а также по малому аргументу $\eta = Z^2/(n^3 k_B T)$ экспоненты, присутствующей в выражениях (23) и (25) для термоиндуцированных ширин, вплоть до η^3 . При $T = 100$ К и $n = 15$ второе слагаемое в фигурной скобке (30) не превышает 0.1 для нейтрального атома ($Z = 1$), и его вклад убывает пропорционально η^2 . Таким образом, при $\eta < 1$ суммарная ширина уровня энергии циркулярного состояния (спонтанная и термоиндуцированная) совпадает с асимптотическим выражением $\Gamma_n^{\text{BBR}}(T) = 4Z^2 k_B T / (3c^3 n^2)$ для термоиндуцированной ширины [5, 6] с относительной точностью порядка $\eta^2/12$.

4.3. Индуцированная ИЧТ ионизация циркулярного состояния

Мнимая часть интеграла по энергии непрерывного спектра в выражении (20) для радиальной функции Грина $g_{l' = l \pm 1}^{E_{nl} + \omega + i0}$ на частоте $\omega > |E_{nl}|$ представляет собой произведение волновых функций состояний континуума с энергией $\varepsilon = E_{nl} + \omega$:

$$\text{Im}[g_{l' = l \pm 1}^{E_{nl} + \omega + i0}(r'; r)] = \pi \langle r | \varepsilon l' \rangle \langle \varepsilon l' | r' \rangle. \quad (31)$$

Этому произведению соответствует мнимая часть динамической поляризуемости (19), которая определяет сечение ионизации состояния $|nl\rangle$ фотонами теплового излучения:

$$\sigma_{nl}(\omega) = \frac{4\pi\omega}{c} \text{Im}[\alpha_{nl}(\omega)] = \frac{4\pi^2\omega}{3c(2l+1)} \sum_{l' = l \pm 1} l' |\langle \varepsilon l' | r | nl \rangle|^2. \quad (32)$$

Таким образом, ионизационная составляющая термоиндуцированного уширения может быть представлена в виде

$$\Gamma_{nl}^{\text{ion}}(T) = \int_{|E_{nl}|}^{\infty} \sigma_{nl}(\omega) \frac{cE^2(\omega, T)}{8\pi\omega} d\omega, \quad (33)$$

где дробь в подынтегральном выражении определяет плотность потока числа фотонов ИЧТ [13].

Результаты численных расчетов для ридберговских состояний с малыми орбитальными моментами $l \ll n$ (S-, P-, D- и F-состояний атомов щелочных металлов [13]) показывают, что асимптотическая зависимость от главного квантового числа ионизационной компоненты термоиндуцированного уширения $\Gamma_{nl}^{\text{ion}}(T) \propto n^{-7/3}$ заметно отличается от зависимостей от n суммарной вероятности термоиндуцированных переходов $\Gamma_{nl}^{\text{d}}(T) + \Gamma_{nl}^{\text{e}}(T) \propto n^{-2}$ в состоянии дискретного спектра. Для состояний с большими значениями орбитального момента, $1 \ll l \leq n-1$, различие вкладов в термоиндуцированное уширение от переходов в состояния континуума и дискретного спектра существенно возрастает.

Для переходов из высоковозбужденных циркулярных состояний с $n \gg 1$ в непрерывный спектр можно получить достаточно простые аналитические выражения, демонстрирующие экспоненциальное убывание матричных элементов с ростом n :

$$\begin{aligned} |\langle \varepsilon l' = l + 1 | r | nl \rangle|^2 = & 4n^2 |\langle \varepsilon l' = l - 1 | r | nl \rangle|^2 \\ \approx & \sqrt{\frac{n}{\pi}} \left(\frac{4n^2}{Z^2} \right)^2 \frac{2^{2n}}{\Omega^{7/2+n}} \exp\left(-2n \frac{\arctan \sqrt{\Omega - 1}}{\sqrt{\Omega - 1}}\right), \end{aligned} \quad (34)$$

где $\Omega = \omega/|E_{nl}|$ – энергия ионизирующего фотона в единицах энергии связи. Экспоненциальное уменьшение матричных элементов «переходит» на сечение ионизации $\sigma_n(\omega) \propto \exp(-2n)$ [10] и далее – на ионизационную ширину (33). Поэтому вклад $\Gamma_{nl}^{\text{ion}}(T)$ в тепловое уширение $\Gamma_n^{\text{BBR}}(T)$ оказывается меньше погрешностей численных расчетов вероятностей распадов (24) и возбуждений связанных состояний (29) уже при $n > 5$.

5. Термоиндуцированный сдвиг энергии циркулярного состояния

Действительную часть сдвига энергии (18) после подстановки выражений (19)–(21) в подынтегральное выражение в правой части (18) можно представить в виде

$$\begin{aligned} \varepsilon_{nl}^{\text{BBR}}(T) = & -\frac{2}{3\pi c^3 (2l+1)} \sum_{l' = l \pm 1} l' \mathcal{P} \\ & \times \int_0^{\infty} \left\{ \sum_n \frac{2\omega_{n'n} |\langle n' l' | r | nl \rangle|^2}{\omega_{n'n}^2 - \omega^2} + \int_0^{\infty} \frac{2(\varepsilon + |E_{nl}|) |\langle \varepsilon l' | r | nl \rangle|^2 d\varepsilon}{(\varepsilon + |E_{nl}|)^2 - \omega^2} \right\} \\ & \times \frac{\omega^3 d\omega}{\exp[\omega/(k_B T)] - 1}. \end{aligned} \quad (35)$$

Интегрирование по частоте теплового излучения в этом выражении удобно представить в виде функции Фарли–Винга, введенной в работе [6]:

$$\mathcal{F}(y) = -2y\mathcal{P} \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{(x^2 - y^2)(\exp x - 1)}. \quad (36)$$

С помощью этой функции сдвиг энергии (35) можно записать в виде

$$\begin{aligned} \varepsilon_{nl}^{\text{BBR}}(T) = & -\frac{2}{3\pi c^3(2l+1)}(k_B T)^3 \\ & \times \sum_{l'=l\pm 1} l' \left[\sum_{n'} |\langle n'l'|r|nl \rangle|^2 \mathcal{F}\left(\frac{\omega_{n'n}}{k_B T}\right) \right. \\ & \left. + \int_0^\infty \langle \varepsilon l'|r|nl \rangle|^2 \mathcal{F}\left(\frac{\varepsilon + |E_{nl}|}{k_B T}\right) d\varepsilon \right]. \end{aligned} \quad (37)$$

Аргументы функции \mathcal{F} здесь определены отношениями энергий дискретно-дискретных и дискретно-непрерывных переходов к тепловой энергии ИЧТ.

Функция (36) – главное значение Коши для интеграла с полюсной особенностью логарифмического типа. Она является плавной нечетной функцией своего аргумента, автоматически учитывающей сингулярности интегралов по частоте теплового излучения и по состояниям непрерывного спектра в (20). С помощью преобразования подынтегрального выражения функцию (36) можно представить в виде, для которого существует замкнутое аналитическое выражение [14]:

$$\mathcal{F}(y) = -\pi^2 y/3 - 2y^3 \operatorname{Re}[\Phi(iy)], \quad (38)$$

где

$$\begin{aligned} \Phi(z) &= \int_0^\infty \frac{x dx}{(x^2 + z^2)(\exp x - 1)} \\ &= \frac{1}{2} \left[\ln\left(\frac{z}{2\pi}\right) - \frac{\pi}{z} - \psi\left(\frac{z}{2}\right) \right]; \quad \operatorname{Re} z > 0; \end{aligned}$$

$\psi(x) = d\{\ln[\Gamma(x)]\}/dx$ – логарифмическая производная гамма-функции. Полагая $z = \pm i|y| + \delta$ при $\delta \rightarrow +0$, получаем

$$\mathcal{F}(y) = -\frac{\pi^2}{3}y - \left\{ \ln\left(\frac{|y|}{2\pi}\right) - \operatorname{Re}\left[\psi\left(i\frac{|y|}{2\pi}\right)\right] \right\} y^3. \quad (39)$$

Для определения действительной части функции ψ в этом выражении можно воспользоваться разложением в ряд [15]

$$\operatorname{Re}\left[\psi\left(i\frac{|y|}{2\pi}\right)\right] = -\gamma + \frac{y^2}{4\pi^2} \sum_{k=1}^\infty \frac{1}{k[k^2 + y^2/(4\pi^2)]}, \quad (40)$$

где $\gamma = 0.5772156649$ – постоянная Эйлера. Используя разложение слагаемых данного ряда по степеням отношения $y^2/(4\pi^2 k^2)$ и выполняя суммирование по k , получаем формальное разложение функции Фарли–Винга в степенной ряд по нечетным степеням аргумента:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(y) = & -\frac{\pi^2}{3}y - \left[\ln\left(\frac{|y|}{2\pi}\right) + \gamma \right] y^3 \\ & + \frac{y^5}{4\pi^2} \sum_{p=0}^\infty \zeta(2p+3) \left(-\frac{y^2}{4\pi^2}\right)^p, \end{aligned} \quad (41)$$

где $\zeta(s) = \sum_{k=1}^\infty k^{-s}$ – дзета-функция Римана [14, 15]. Формальный радиус сходимости знакопеременного ряда в (41) определяется неравенством $|y| < 2\pi$.

При $|y| > 5$ экспонента в знаменателе подынтегрального выражения в (36) существенно снижает вклад в интеграл особой точки $x = y$ и всей области $x > y$. В связи с этим для оценки интеграла достаточно разложить подынтегральное выражение в ряд по степеням отношения $x^2/y^2 < 1$ и воспользоваться аналитическими выражениями несобственных интегралов от каждого слагаемого. В результате получаем асимптотическое разложение функции (36) по нечетным степеням обратной величины аргумента, которое можно представить в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(y) &= 2 \sum_{p=0}^\infty \frac{(2p+3)! \zeta(2p+4)}{y^{2p+1}} \\ &= \frac{2\pi^4}{15y} \left[1 + \frac{10}{21} \left(\frac{2\pi}{y}\right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{2\pi}{y}\right)^4 + \frac{30}{33} \left(\frac{2\pi}{y}\right)^6 + \dots \right]. \end{aligned} \quad (42)$$

Присутствие факториала в слагаемых данного ряда указывает на его асимптотический характер. Поскольку все слагаемые в этом разложении положительны, максимальную точность оценки $\mathcal{F}(y)$ при заданном y могут обеспечить $N_{\max} < |y|/2$ слагаемых. Численные оценки показывают, что четыре слагаемых ряда, выписанные в явном виде в (42), определяют значение функции (36) с точностью до шестого десятичного знака в области $|y| > 30$.

Следует обратить внимание на существенные количественные и качественные различия процедур и результатов численных расчетов сумм бесконечного ряда по состояниям дискретного спектра и интегралов по непрерывному спектру в выражении (37). Подробный анализ вкладов дискретных состояний и континуума в сумму сил осцилляторов, в сумму моментов сил осцилляторов и в термоиндуцированные сдвиги состояний с малыми орбитальными моментами представлен в работах [10, 12, 16]. Для циркулярных состояний с большими n вклад непрерывного спектра определяется экспоненциально малыми матричными элементами (34) ионизационного перехода. Поэтому учет интеграла по непрерывному спектру практически не изменяет результата расчета сдвига (37), полученного только суммированием нескольких слагаемых ряда по состояниям дискретного спектра.

Для сдвига, как и для уширения уровней энергии ридберговского циркулярного состояния, можно предложить полиномиальную аппроксимацию, существенно расширяющую область использования асимптотического приближения $\varepsilon_n^{\text{BBR}}(T) = \pi(k_B T)^2/(3c^3)$ [6], определяющего сдвиг (37) с точностью до трех-четырех десятичных знаков при условии $1/\eta = n^3 k_B T/Z^2 > 100$.

Выражение, применимое для меньших значений главного квантового числа n и температуры T , можно получить с помощью полиномиального приближения [12]

$$\varepsilon_n^{\text{BBR}}(T) = \varepsilon_0 \left(\frac{T}{300 \text{ К}}\right)^2 (a_0^{(e)} + a_1^{(e)} x + a_2^{(e)} x^2), \quad (43)$$

где $\varepsilon_0 = \pi(k_B 300 \text{ К})^2/(3c^3) = 2416.65$ Гц – асимптотическое (для $n^3 k_B T > 100$) значение термоиндуцированного сдвига при комнатной температуре $T = 300$ К. Аргумент квадратичного полинома в (43) можно представить в виде комбинированного параметра

$$x = \sqrt{\frac{2|E_n|}{k_B T}} = \frac{Z}{n\sqrt{k_B T}}.$$

Для определения коэффициентов $a_i^{(e)}$ использовался метод полиномиальной интерполяции результатов численного расчета сдвига энергии (43) при $n = 15, 60$ и 150 для температур $T = 100, 300$ и 1000 К. Эту зависимость можно аппроксимировать полиномом

$$a_i^{(e)}(T) = \sum_{j=0}^2 \frac{b_{ij}^{(e)}}{(k_B T)^j}, \quad i = 0, 1, 2, \quad (44)$$

в котором коэффициенты $b_{ij}^{(e)}$ являются константами, численные значения которых представлены в табл. 1.

Табл. 1. Коэффициенты $b_{ij}^{(e)}$ полиномиальных аппроксимаций (43) и (44) для термоиндуцированных сдвигов уровней энергии циркулярных ридберговских состояний (35).

i	$b_{i0}^{(e)}$	$b_{i1}^{(e)}$	$b_{i2}^{(e)}$
0	1	1.085×10^{-7}	-1.726×10^{-10}
1	1.165×10^{-4}	7.287×10^{-9}	5.234×10^{-10}
2	-3.145×10^{-4}	-2.675×10^{-7}	-3.109×10^{-10}

6. Заключение

Полученные в настоящей работе результаты аналитических расчетов сдвигов и уширений уровней энергии циркулярных состояний дают важную информацию о влиянии межатомных взаимодействий и взаимодействия с ИЧТ на спектральные характеристики высоковозбужденных ридберговских атомов. Выбор циркулярных состояний обусловлен возможностью аналитических расчетов констант межатомного взаимодействия, а также термоиндуцированного уширения и сдвига уровней энергии состояний с большими главными квантовыми числами. Продемонстрирована пропорциональность компонент постоянной Ван-дер-Ваальса, определяющих зависимость дальнедействующего взаимодействия от ориентации межатомной оси, 12-й степени главного квантового числа.

Вероятность ионизации циркулярных состояний полем ИЧТ оказывается экспоненциально малой. Для состояний с $n > 10$ вклад ионизации в уширение энергетических уровней не превышает 10^{-6} от вклада термоиндуцированных переходов в связанные состояния. Температурно-независимые слагаемые вероятности индуцированных ИЧТ переходов, возникающие при разложении по степеням малых параметров $1/n$ и $\eta = Z^2/(n^3 k_B T)$, полностью ком-

пенсуют вклад в полную ширину (30) спонтанной ширины Γ_n^{sp} . Следовательно, при больших значениях параметра $1/\eta = n^3 k_B T / Z^2$ в выражении для полной ширины уровня энергии циркулярного состояния остаются только слагаемые, прямо пропорциональные температуре и обратно пропорциональные ее целым степеням. При этом коэффициент при линейном по T слагаемом $4Z^2 k_B T \times (3c^3 n^2)^{-1}$ строго равен единице и не имеет никаких поправок, зависящих от n . Второе исчезающее слагаемое в фигурных скобках в выражении (30), определяющем полную ширину $\Gamma_n^{tot}(T)$, пропорционально параметру η^2 , домноженному на асимптотический ряд по параметру $1/n$, и вносит поправку к единичному коэффициенту, пропорциональную $\eta^2/12$.

Наряду с водородоподобными атомами и ионами циркулярные состояния имеются у всех многоэлектронных атомов. Поэтому результаты выполненных расчетов применимы практически к любому атому или иону любого химического элемента.

Настоящая работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 18-02-00053-а), а также Министерства образования и науки РФ в рамках Госзадания по проектам № 3.1659.2017/4.6 (А.А.К.) и № 3.7514.2017/8.9 (В.Д.О.).

1. Nguen T.L., Raimond J.M., et al. *Phys. Rev. X*, **8**, 011032 (2018).
2. Saffman M., Walker T.G., Mølmer K. *Rev. Mod. Phys.*, **82**, 2313 (2010).
3. Browaeys A., Barredo D., Lahaye T. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **49**, 152001 (2016).
4. Le Roy R.J. *Can. J. Phys.*, **52**, 246 (1974).
5. Cooke W.E., Gallagher T.F. *Phys. Rev. A*, **21**, 588 (1980).
6. Farley J.W., Wing W.H. *Phys. Rev. A*, **23**, 2397 (1981).
7. Варшавович Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К. *Квантовая теория углового момента* (Л.: Наука, 1975).
8. Kamenski A.A., Manakov N.L., Mokhnenko S.N., Ovsiannikov V.D., Zenischeva A.A. *Eur. Phys. J. D*, **72**, 174 (2018).
9. Бете Г., Солпитер Э. *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами* (М.: ГИФМЛ, 1960).
10. Glukhov I.L., Mokhnenko S.N., Nikitina E.A., Ovsiannikov V.D. *Eur. Phys. J. D*, **69**, 1 (2015).
11. Manakov N.L., Ovsiannikov V.D., Rapoport L.P. *Phys. Rep.*, **141**, 319 (1986).
12. Glukhov I.L., Nikitina E.A., Ovsiannikov V.D. *J. Phys. B*, **49**, 035003 (2016).
13. Ovsiannikov V.D., Glukhov I.L., Nekipelov E.A. *J. Phys. B*, **44**, 195010 (2011).
14. Градштейн И.С., Рыжик И.М. *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений* (М.: Физматгиз, 1963, с. 342, формула 3.415.1).
15. Прудников А.П., Брычков Ю.А., Маричев О.И. *Интегралы и ряды. Элементарные функции* (М.: Наука, 1981, с. 775).
16. Ovsiannikov V.D., Glukhov I.L., Nekipelov E.A. *J. Phys. B*, **45**, 095003 (2012).