Суммы моментов сил осцилляторов и асимптотика термоиндуцированного уширения и сдвига уровней энергии циркулярных ридберговских состояний атомов

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

С помощью правил суммирования моментов сил осцилляторов получены аналитические выражения для индуцированных тепловым излучением окружающей среды сдвигов и уширений уровней энергии циркулярных ридберговских состояний с максимальными орбитальными l и магнитными m квантовыми числами, $l = |m| = n - 1$. Формулы для энергии взаимодействия с излучением черного тела представлены в виде разложения в ряд по четным степеням малого параметра $\eta = Z^2/(n^3k_BT) \ll 1$ в области высоких температур T и главных квантовых чисел n (Z – заряд остаточного иона). Выражение для термоиндуцированной ширины содержит не зависящее от температуры отрицательное по знаку слагаемое, совпадающее по абсолютной величине со спонтанной шириной, так что в выражении для суммы спонтанной и термоиндуцированной ширин не зависящее от температуры слагаемое отсутствует. Аналогичное разложение по степеням η для термоиндуцированного сдвига также содержит не зависящее от температуры слагаемое, пропорциональное $1/n^6$.

Ключевые слова: *атом, ридберговские циркулярные состояния, суммы сил осцилляторов, тепловое излучение, сдвиг, ширина уровня энергии.*

1. Введение

Методы многофотонной лазерной спектроскопии позволяют возбуждать атомы и ионы в циркулярные ридберговские состояния $|nlm\rangle$ с большими значениями главных n, орбитальных l и магнитных m ($l = |m| = n - 1$) квантовых чисел [1–4]. Спонтанный распад таких состояний возможен за счет дипольно разрешенных радиационных переходов в состояния $|n'l'm'\rangle$ с главным, орбитальным и магнитным квантовыми числами $n' = n - 1$, $l' = l - 1$, $|m'| = |m| - 1$. Матричные элементы таких переходов быстро убывают с ростом n и l. Поэтому естественное время жизни ридберговских состояний возрастает пропорционально n^5, в полном согласии с общей зависимостью, для которой это время пропорционально произведению n^3l^2 [5]. С помощью специально подобранных внешних условий, исключающих возможность испускания спонтанного излучения, время жизни ридберговских состояний можно увеличить на несколько порядков [1–4], существенно расширяя возможности для манипулирования сильно возбужденными атомами и их практического использования. В поле фактически неустранимого теплового излучения времена жизни и частоты радиационных переходов для ридберговских состояний могут существенно изменяться. Поэтому для успешного управления свойствами циркулярных состояний необходим детальный расчет зависимостей сдвигов и уширений ридберговских уровней энергии от температуры T окружающей среды.

Волновые функции и энергии ридберговских циркулярных состояний близки к водородоподобным и одинаковы для всех атомов, в отличие от состояний с малыми орбитальными моментами, которые имеют специфическую энергетическую структуру, характерную для атомных частиц каждого конкретного химического элемента. Спектр энергий состояний с орбитальным моментом $l < 5$ описывается формулой Ридберга, отличающейся от формулы для спектра водородоподобного атома заменой главного квантового числа n эффективным главным квантовым числом $\nu = n - \delta_l$, определяемым квантовым дефектом δ_l серии состояний с определенным угловым моментом l. Для состояний с $l > 5$ дефект δ_l практически не отличается от нуля во всех многоэлектронных атомах. Таким образом, набор одноэлектронных энергетических состояний с одним и тем же главным квантовым числом n совпадает с соответствующим набором для водородоподобного атома, в котором отсутствуют состояния с малыми орбитальными моментами $l < 6$. Поэтому высоковозбужденные циркулярные состояния идентичны соответствующим состояниям атома водорода, описываемым кулоновскими волновыми функциями. Использование этих функций позволило получить аналитические выражения для констант поляризационного и дисперсионного дальнодействующих взаимодействий атомов в циркулярных ридберговских состояниях [6, 7], необходимых для оценки возможности использования эффекта блокады резонансного возбуждения ридберговских состояний [8–10].

Наряду с эффектами межатомного взаимодействия важное влияние на структуру энергетических уровней ридберговских состояний оказывает тепловое излучение окружающей среды. В работах [11–13] были получены асимптотические выражения для сдвига и уширения, точность которых до настоящего времени определялась путем сравнения с результатами численных расчетов для конкретных состояний в конкретной области температур излучения черного тела. Для аналитического представления результатов таких расчетов использовалось разделение вкладов

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

Поступила в редакцию 11 марта 2020 г.

в термоиндуцированный сдвиг и уширение от ионизации [14–16], а также от вынужденных распадов и возбуждений в состояния дискретного спектра [17, 18].

В настоящей работе получены аналитические выражения для поправок к асимптотическим формулам с использованием правил суммирования моментов сил осцилляторов. В разд.2 представлены процедуры нахождения замкнутых выражений для сумм моментов сил осцилляторов. Для циркулярных состояний из правил сумм получены аналитические выражения для суммирования моментов по бесконечному набору вышележащих состояний, включая интегралы по непрерывному спектру. В разд.3 обсуждается влияние теплового излучения окружающей среды, называемого в литературе излучением черного тела (ИЧТ), на время жизни, описываемое мнимой частью энергии уровня. С помощью правил суммирования моментов сил осцилляторов найдены аналитические формулы для поправок к асимптотическому выражению для термоиндуцированной скорости распада. В разд.4 получены аналитические выражения для поправок к асимптотической формуле, описывающей индуцированные ИЧТ сдвиги энергии циркулярных ридберговских состояний.

Всюду в работе, если специально не оговорено, используется атомная система единиц $e = m = \hbar = 1$, скорость света численно совпадает с обратной постоянной тонкой структуры $c = \alpha^{-1} = 137.036$, температура выражена в кельвинах, постоянная Больцмана определяется отношением $k_B = 1/T_a$ атомной единицы энергии к атомной единице температуры $T_a = 315776$ K.

2. Суммы моментов сил осцилляторов

2.1. Моменты сил осцилляторов

Силы осцилляторов $f_{n'n(\mu)} = 2\omega_{n'n}|\langle n'|r_\mu|n\rangle|^2$ электродипольных переходов являются важными характеристиками атомных спектров. Здесь символ $n(n')$ обозначает полный набор квантовых чисел nlm $(n'l'm')$ стационарных состояний атома, r_μ – координата ридберговского электрона (используются циклические координаты [19] $\mu = 0, \pm 1$; $r_0 = z$ – проекция на ось z, направленную вдоль вектора поляризации испускаемого или поглощаемого при переходе между состояниями n и n' фотона). В одноэлектронном приближении компоненты дипольного момента совпадают по абсолютной величине и противоположны по знаку координатам валентного электрона.

При расчетах вероятностей радиационных переходов и энергии взаимодействия с внешними полями возникают суммы моментов сил осцилляторов по полному набору собственных состояний атома, включая интеграл по непрерывному спектру [20, 21],

$$S^{(q)}_{nlm(\mu)} = \sum_{n'} \omega^q_{n'n} f_{n'n(\mu)}. \qquad (1)$$

В частности, дипольная динамическая поляризуемость атома в состоянии $|nlm\rangle$ определяется выражением

$$\alpha_{nlm}(\omega) = \sum_{n'l'm'\mu} \frac{2\omega_{n'n}|\langle n'l'm'|z|nlm\rangle|^2}{\omega^2_{n'n} - \omega^2} = \sum_{n'l'm'\mu} \frac{f_{n'n(0)}}{\omega^2_{n'n} - \omega^2} \qquad (2)$$

и может быть представлена в виде разложения в ряд по степеням квадрата частоты ω^2 с использованием формулы для суммы ряда геометрической прогрессии. Коэффициентами такого разложения являются суммы моментов сил осцилляторов (1). В зависимости от соотношения между ω^2 и квадратом собственной частоты атома $\omega^2_{n'n}$ имеют место два типа разложений:

1) при $\omega^2 < \omega^2_{n'n}$ ряд содержит только положительные степени ω^2, а коэффициентами являются суммы моментов (1) с четными отрицательными показателями степени q, начиная с $q = -2$, соответствующего статической поляризуемости, $S^{(-2)}_{nlm} = \alpha_{nlm}(0)$:

$$\alpha_{nlm}(\omega) = \sum_{p=0}^{\infty} S^{(-2p-2)}_{nlm(0)}\omega^{2p} = \alpha_{nlm}(0) + S^{(-4)}_{nlm(0)}\omega^2 + S^{(-6)}_{nlm(0)}\omega^4 + \ldots; \qquad (3)$$

2) противоположное неравенство $\omega^2 > \omega^2_{n'n}$ формально справедливо для связанных состояний при условии, что частота превышает потенциал ионизации уровня, $\omega > |E_{nl}|$. Если при этом можно пренебречь вкладом состояний непрерывного спектра, а также вкладом нижних связанных состояний с $n' < n$, не удовлетворяющих условию $\omega^2 > \omega^2_{n'n}$, то можно воспользоваться разложением в ряд по отрицательным степеням ω^2. Коэффициентами такого разложения являются суммы моментов (1) с четными положительными показателями $q \geqslant 0$, причем $S^{(0)}_{nlm} = 1$:

$$\alpha_{nlm}(\omega) = -\sum_{p=0}^{\infty} S^{(2p)}_{nlm(0)}\omega^{-2-2p} = -\frac{1}{\omega^2} - \frac{S^{(2)}_{nlm(0)}}{\omega^4} - \frac{S^{(4)}_{nlm(0)}}{\omega^6} - \ldots. \qquad (4)$$

Наряду с $S^{(0)}_{nlm}$, сразу можно получить замкнутое выражение и для $S^{(-1)}_{nlm(0)} = 2\langle nlm|z^2|nlm\rangle$ [20, 21], которое для произвольных значений орбитального и магнитного квантовых чисел может быть представлено в виде произведения углового и радиального матричных элементов:

$$S^{(-1)}_{nlm(0)} = 2\langle lm|\cos^2\theta|lm\rangle\langle nl|r^2|nl\rangle = \frac{2}{2l+3} \times \left(1 + 2\frac{l^2 - m^2}{2l-1}\right)\langle nl|r^2|nl\rangle. \qquad (5)$$

Для циркулярного состояния водородоподобного атома это выражение принимает вид

$$S^{(-1)}_{nlm(0)} = 2\langle nl|r^2|nl\rangle/(2n+1) = n^2(n+1)/Z^2,$$

где Z – заряд атомного остова. Аналогично можно получить достаточно простые аналитические выражения для сумм (1) и с другими показателями степени q. Ниже приведены правила для сумм (1) при отрицательных и положительных значениях q.

2.2. Аналитические выражения для сумм моментов сил осцилляторов с отрицательными показателями *q*

Строго говоря, правила сумм (1) можно выразить в замкнутом виде, если известны аналитические выражения для волновых функций и энергий одноэлектронных стационарных состояний. Самое простое решение этой задачи можно получить для циркулярных ридберговских состояний, описываемых для всех атомов с помощью волновых функций водородоподобного атома. После интегрирования по угловым переменным матричного элемента выражение для сумм (1) с отрицательным показателем $q = -p$, определяющих низкочастотное разложение поляризуемости (3), можно представить в виде

$$S^{(-p)}_{nlm(0)} = \frac{2}{2n+1}\langle n\,l = n-1\,|\,r[g^{(n)}_{l'=n}(r;r')]^{p-1}r'|nl\rangle, \qquad (6)$$

где возведение в степень, $[g^{(n)}_{l'}(r;r')]^{p-1}$, представляет собой $(p-2)$-кратное интегрирование произведения $p-1$ радиальных функций Грина,

$$[g^{(n)}_{l'}(r;r')]^{p-1} = \int_0^\infty r_1^2 \mathrm{d}r_1 \int_0^\infty r_2^2 \mathrm{d}r_2 \ldots \int_0^\infty r_{p-2}^2 \mathrm{d}r_{p-2}\, g^{(n)}_{l'}(r;r_1) \times g^{(n)}_{l'}(r_1;r_2)\ldots g^{(n)}_{l'}(r_{p-2};r'). \qquad (7)$$

Для функции $g^{(n)}_{l'}(r;r')$ можно использовать спектральное разложение

$$g^{(n)}_{l'}(r,r') = \sum_{n'}\frac{R_{n'l'}(r)R_{n'l'}(r')}{E_{n'}-E_n} + \int_0^\infty \frac{R_{\varepsilon l'}(r)R_{\varepsilon l'}(r')}{\varepsilon - E_n}\mathrm{d}\varepsilon, \quad (8)$$

где $R_{n'l'}(r)$ – радиальная волновая функция связанного состояния; $R_{\varepsilon l'}(r)$ – радиальная функция стационарного состояния непрерывного спектра с положительной энергией, $\varepsilon > 0$; E_n – энергия уровня. Орбитальный момент промежуточных состояний в (6)–(8) $l' = l + 1 = n$, поскольку результат интегрирования в матричном элементе по угловым переменным

$$|\langle n'l'm'|z|nlm\rangle|^2 = \frac{l_>^2 - m^2}{(2l'+1)(2l+1)}|\langle n'l'|r|nl\rangle|^2\delta_{m'm} = \frac{|\langle n'l'|r|nl\rangle|^2}{2n+1}\delta_{l'l+1}\delta_{m'm} \qquad (9)$$

обращается в нуль для $l' = l - 1$. Здесь $l_> = \max(l', l)$.

Ортогональность радиальных волновых функций дает возможность записать соотношение

$$[g^{(n)}_{l'}(r,r')]^{2p+1} = \sum_{n'}\frac{R_{n'l'}(r)R_{n'l'}(r')}{(E_{n'}-E_n)^{2p+1}} + \int_0^\infty \frac{R_{\varepsilon l'}(r)R_{\varepsilon l'}(r')}{(\varepsilon - E_n)^{2p+1}}\mathrm{d}\varepsilon. \qquad (10)$$

Использование выражений (8), (10) не позволяет рассчитать матричный элемент (6) в замкнутом аналитическом виде. Поэтому более эффективным оказывается разложение функции Грина по функциям Штурма [22] $F_{kl'}(x) = x^{l'}\exp(-x/2)L_k^{2l'+1}(x)$, где $L_k^{2l'+1}(x)$ – присоединенный полином Лагерра [23]:

$$g^{(n)}_{l'=n}(r,r') = \frac{4Z}{(2n+1)!n}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{k!}{(2n+2)_k(k+1)} \times F_{kn}\Big(\frac{2Zr}{n}\Big)F_{kn}\Big(\frac{2Zr'}{n}\Big), \qquad (11)$$

здесь $(a)_k = \Gamma(a+k)/\Gamma(a) = a(a+1)\ldots(a+k-1)$ – символ Похгаммера [23].

Радиальная волновая функция также может быть выражена через функцию Штурма:

$$R_{n'l'}(r) = \frac{2Z^{3/2}}{(n')^2}\sqrt{\frac{n_r!}{(n'+l')!}}F_{n_r l'}\Big(\frac{2Zr}{n}\Big), \qquad (12)$$

где $n_r = n' - l' - 1$ – радиальное квантовое число. В частности, для циркулярного состояния $|nlm\rangle$ имеем $|m| = l = n-1$, так что $n_r = 0$, полином Лагерра $L_0^{2l'+1}(x) = 1$, а волновая функция имеет вид

$$R_{nl=n-1}(r) = \frac{2Z^{3/2}}{n^2\sqrt{(2n-1)!}}\Big(\frac{2Zr}{n}\Big)^{n-1}\exp(-Zr/n). \qquad (13)$$

Используя выражения (7), (11), (13) и свойство ортогональности полиномов Лагерра, получаем аналитические выражения сумм для (6) для циркулярных состояний:

$$\begin{aligned} S^{(-2)}_{nlm(0)} &= \alpha_{nlm}(0) = \sum_{n'l'm'}\frac{2|\langle n'l'm'|z|nlm\rangle|^2}{\omega_{n'n}} = \frac{n^4(n+1)(4n+5)}{4Z^4},\\ S^{(-3)}_{nlm(0)} &= \sum_{n'l'm'}\frac{2|\langle n'l'm'|z|nlm\rangle|^2}{\omega^2_{n'n}} = \frac{n^6(n+1)(8n^2+21n+14)}{8Z^6},\\ S^{(-4)}_{nlm(0)} &= \sum_{n'l'm'}\frac{2|\langle n'l'm'|z|nlm\rangle|^2}{\omega^3_{n'n}} = \frac{n^8(n+1)}{48Z^8} \times (48n^3+195n^2+269n+126), \ldots . \end{aligned} \qquad (14)$$

Эти выражения применимы не только для ридберговских, но и для любых циркулярных состояний водородоподобных атомов с квантовыми числами $l = |m| = n-1$. Например, для 1s-состояния имеем хорошо известные значения матричных элементов с функцией Грина в первой, второй и третьей степени, определяющих восприимчивости атома в статических электрическом и магнитном полях [24]:

$$S^{(-2)}_{1s} = \alpha_{1s}(0) = 9/(2Z^4),$$

$$S^{(-3)}_{1s} = 43/(8Z^6),$$

$$S^{(-4)}_{1s} = 319/(12Z^8).$$

Выражения (14) определяют, в частности, область применимости разложения (3) для динамических поляризуемостей циркулярных ридберговских состояний неравенством $\omega \ll Z^2/n^3$. Очевидно, что в правой части этого неравенства стоит частота перехода между соседними ридберговскими состояниями. Для состояний с $n \approx 30$ данная величина составляет примерно 200 ГГц, следовательно разложение (3) применимо в окрестности этих значений n для частоты СВЧ излучения, не превышающей 20 ГГц.

2.3. Аналитические выражения для сумм моментов сил осцилляторов с положительными *q*

В разложениях поляризуемости (3) и (4) использованы силы осцилляторов с фиксированными направлениями вектора поляризации фотона вдоль оси z и вектора орбитального момента атома, определяемого магнитным квантовым числом m. В ряде задач направления векторов поляризации и/или орбитального момента могут быть произвольными. В частности, распределение всех возможных направлений векторов поляризации фотонов действующего на атом теплового излучения (ИЧТ) можно считать равновероятным. В случае свободной ориентации атомов направления вектора орбитального момента (численные значения магнитного квантового числа) также можно считать равновероятными. Общие соотношения квантовой теории углового момента [19] позволяют продемонстрировать полную эквивалентность результатов усреднений по направлениям вектора поляризации при фиксированном магнитном квантовом числе m и усреднений по направлениям вектора орбитального момента (по m) при фиксированной проекции электродипольного момента μ:

$$\overline{S_{nlm}^{(q)}} = \frac{1}{2l+1}\sum_m S_{nlm(\mu)}^{(q)} = \frac{1}{3}\sum_\mu S_{nlm(\mu)}^{(q)}, \tag{15}$$

где $S_{nlm(\mu)}^{(q)}$ определена в (1). Обе суммы в (15) дают один и тот же результат, не зависящий ни от m, ни от μ.

Далее при вычислении сумм (1) с $q > 0$ наряду с фиксированными направлениями векторов (как в выражениях (3)–(6)) мы будем использовать усреднение по проекциям вектора поляризации фотона, которое сводится к дополнительному суммированию по проекциям оператора дипольного электрического момента и делению на 3. Усреднение по проекциям дипольного момента необходимо при расчетах энергии взаимодействия атома с хаотически поляризованным излучением, в частности с тепловым излучением окружающей среды. Заметим, что указанные усреднения не влияют на основное правило суммирования при $q = 0$ (правило Томаса–Рейхе–Куна), так что $S_{nlm(0)}^{(0)} = \overline{S_{nlm}^{(0)}} = 1$. Следует также отметить, что в расчетах сумм моментов (1) при $q \neq 0$ обычно проводится усреднение по проекциям дипольного момента [20, 21].

При вычислении усредненных сумм (15) можно использовать следующие операторные тождества:

$$\begin{gathered} \mathrm{i}[\hat{\boldsymbol p},\boldsymbol r] = 3, \quad \mathrm{i}[H,\boldsymbol r] = \hat{\boldsymbol p}, \\ \mathrm{i}[H,\hat{\boldsymbol p}] = -\nabla V(r) = \frac{Z\boldsymbol r}{r^3}, \\ [\hat{\boldsymbol p},[H,\hat{\boldsymbol p}]] = \Delta V(r) = 4\pi Z\delta(\boldsymbol r), \end{gathered} \tag{16}$$

с гамильтонианом H, внутриатомным потенциалом $V(r)$, радиус-вектором $\boldsymbol r$ и оператором импульса $\hat{\boldsymbol p}$ оптического электрона. Из этих соотношений следуют тождества для матричных элементов [20]:

$$\begin{gathered} \omega_{n'n}\langle n'l'm'|x_\mu|nlm\rangle = \mathrm{i}\langle n'l'm'|\hat p_\mu|nlm\rangle, \\ \omega_{n'n}\langle n'l'm'|\hat{\boldsymbol p}|nlm\rangle = \mathrm{i}\langle n'l'm'|\nabla V(r)|nlm\rangle, \end{gathered} \tag{17}$$

преобразующие частотные сомножители в соответствующие операторы внутри матричного элемента. После таких преобразований достаточно использовать условие полноты набора собственных состояний валентного электрона

$$\sum_{n'l'm'}\langle \boldsymbol r|n'l'm'\rangle\langle n'l'm'|\boldsymbol r'\rangle = \delta(\boldsymbol r - \boldsymbol r'), \tag{18}$$

чтобы выразить суммы (15) в виде среднего значения функции радиальной переменной, аналогично выражению (5). Используя соотношение (15) для усредненных значений, а также усреднение матричного элемента от угловых переменных

$$\begin{aligned} \frac{1}{2l+1}\sum_{m=-l}^{l}\langle lm|\cos^2\theta|lm\rangle &= \frac{1}{2l+1}\sum_{m=-l}^{l}\frac{1}{2l+3} \\ &\times\left(1+2\frac{l^2-m^2}{2l-1}\right) = \frac{1}{3}, \end{aligned} \tag{19}$$

получаем выражения

$$\begin{aligned} S_{nlm(0)}^{(1)} &= 2\langle nl|\frac{Z}{r}|nl\rangle\langle lm|\cos^2\theta|lm\rangle, \\ \overline{S_{nlm}^{(1)}} &= \frac{2}{3}\langle nl|\hat{\boldsymbol p}^2|nl\rangle = \frac{2}{3}\langle nl|\frac{Z}{r}|nl\rangle = \frac{2Z^2}{3n^2}, \\ S_{nlm(0)}^{(2)} &= \langle nl|\frac{Z}{r^3}|nl\rangle(1-3\langle lm|\cos^2\theta|lm\rangle), \\ \overline{S_{nlm}^{(2)}} &= \frac{Z}{3}|R_{nl}(0)|^2 = \frac{4Z^4}{3n^3}\delta_{l0}, \end{aligned} \tag{20}$$

где δ_{l0} – символ Кронекера.

Следует отметить, что суммы $S_{nlm}^{(0)}$ и $\overline{S_{nlm}^{(1)}}$ были использованы для вывода асимптотических формул сдвига и уширения ридберговских уровней энергии тепловым излучением [11–13]. Для состояний с ненулевым орбитальным моментом $\overline{S_{nlm}^{(2)}} = 0$, что означает взаимное сокращение отрицательного вклада $\overline{S_{nlm}^{(2-)}}$ конечного числа слагаемых с $n' < n$ из суммы в правой части выражения (1) с положительным вкладом $\overline{S_{nlm}^{(2+)}}$ бесконечного числа слагаемых суммы по состояниям дискретного спектра и интеграла по непрерывному спектру: $\overline{S_{nlm}^{(2-)}} = -\overline{S_{nlm}^{(2+)}}$. При этом отрицательный вклад пропорционален скорости спонтанного распада: $\overline{S_{nlm}^{(2-)}} = -(c^3/2)\Gamma_{nl}^{\rm sp}$ (см. ниже п.3.1). Следовательно, для бесконечной суммы по $n' > n$ и интеграла по непрерывному спектру из правой части выражения (1) тоже можно записать замкнутое аналитическое выражение $\overline{S_{nlm}^{(2+)}} = (c^3/2)\Gamma_{nl}^{\rm sp}$. Используя аналитическое выражение для $\Gamma_{nl}^{\rm sp}$ в случае циркулярных состояний [7], находим соотношение

$$\begin{aligned} -\overline{S_{nlm}^{(2-)}} = \overline{S_{nlm}^{(2+)}} &= \frac{2}{3}\sum_{(n'>n)l'm'\mu}\omega_{n'n}^3|\langle n'l'm'|r_\mu|nlm\rangle|^2 \\ &= \frac{Z^4}{3n^3(n-1/2)(n-1)}\left[1-\frac{1}{(2n-1)^2}\right]^{2n-1}. \end{aligned} \tag{21}$$

Аналогичным образом можно также получить замкнутые выражения для бесконечных сумм и интегралов, следующие из замкнутых выражений для правил суммирования моментов сил осцилляторов более высоких степеней. Очевидно, что с ростом индекса q в слагаемых сумм (15) появляются дополнительные коммутаторы, выражающиеся через операторы кинетической и потенциальной энергии и их производные. Для циркулярных состояний имеем выражения

$$\begin{aligned}
S^{(3)}_{nlm(0)} &= 2\left\langle nl\left|\frac{Z^2}{r^4}\right|nl\right\rangle\langle lm|\cos^2\theta|lm\rangle,\\
\overline{S^{(3)}_{nlm}} &= \frac{2}{3}\left\langle nl\left|\frac{Z^2}{r^4}\right|nl\right\rangle = \frac{16Z^6}{3n^5(2n-3)_3},\\
S^{(4)}_{nlm(0)} &= \left\langle nl\left|\frac{Z^2}{r^6}\right|nl\right\rangle(1+3\langle lm|\cos^2\theta|lm\rangle),\\
\overline{S^{(4)}_{nlm}} &= 2\left\langle nl\left|\frac{Z^2}{r^6}\right|nl\right\rangle = \frac{64Z^8}{n^7(2n-5)_5},
\end{aligned} \tag{22}$$

$$\overline{S^{(5)}_{nlm}} = \frac{2}{3}n(n-1)\left\langle nl\left|\frac{Z^2}{r^8}\right|nl\right\rangle - \frac{8Z^2}{3}\left\langle nl\left|\left(\frac{1}{r^3}\frac{\partial}{\partial r}\right)^2\right|nl\right\rangle + \frac{8Z^2}{3}\left\langle nl\left|\frac{1}{r^7}\frac{\partial}{\partial r}\right|nl\right\rangle = \frac{Z}{6}\left(\frac{2Z}{n}\right)^9\frac{n^2+n+18}{(2n-7)_7}. \tag{23}$$

Как видно из выражений (20)–(23) для сумм моментов сил осцилляторов, с возрастанием степени q величины $S^{(q)}_{nlm}$ быстро убывают с ростом главного квантового числа n. При этом $S^{(q)}_{nlm} \propto Z^{2q}/n^{3q}$ для четных $q = 2k$ и $S^{(q)}_{nlm} \propto Z^{2q}/n^{3q-1}$ для нечетных $q = 2k - 1$ ($k = 0, 1, 2, ...$ – натуральные числа). Эти асимптотики учитывают первые неисчезающие члены разложений точных значений сумм (20)–(23), с помощью которых ниже рассчитываются поправки к асимптотическим формулам для индуцированных ИЧТ уширений и сдвигов уровней энергии циркулярных ридберговских состояний.

3. Естественная и индуцированная ИЧТ ширины уровня энергии циркулярного состояния

3.1. Естественная ширина

Спонтанная энергетическая ширина уровня циркулярного состояния $|nlm\rangle$ представляет собой скорость дипольного радиационного распада в ближайшее состояние $|n' = n - 1\ l' = l - 1\rangle$. Для этой вероятности можно получить замкнутое аналитическое выражение [7] в удобном для упрощенных оценок виде:

$$\Gamma^{\rm sp}_n = -\frac{2}{c^3}\overline{S^{(2-)}_{nlm}} = 1704.554\frac{Z^4}{n^5}\gamma_n (\text{в МГц}), \tag{24}$$

где фактор

$$\gamma_n = \frac{1}{(1-1/n)[1-1/(2n)]}\left\{\frac{1-1/n}{[1-1/(2n)]^2}\right\}^{2n-1} \tag{25}$$

медленно убывает с ростом n ($\gamma_2 = 1.873$, $\gamma_{20} = 1.052$, $\gamma_n \xrightarrow[n\to\infty]{} 1$). Из (24) следует также простая формула для оценки естественного времени жизни циркулярного состояния:

$$\tau^{\rm sp}_n = \frac{1}{\Gamma^{\rm sp}_n} = 9.337\frac{(n/10)^5}{\gamma_n Z^4}\ (\text{в мкс}). \tag{26}$$

Спонтанную энергетическую ширину состояний с произвольными орбитальными моментами $1 < l < n - 1$ можно представить в виде $\Gamma^{\rm sp}_{nl} \approx [855.4/(n^3l^2)]\,f(n,l)Z^4$ (в МГц). Здесь $f(n,l)$ – плавно зависящий от l безразмерный фактор, практически совпадающий с единицей для малых l и медленно возрастающий с ростом l, так что для больших значений орбитального момента $f(n, l = n - 1) \approx 2$ [5, 7, 20]. Отсюда видно, что естественная ширина циркулярного состояния примерно в n^2 раз меньше ширины высоковозбужденного водородоподобного состояния с малым угловым моментом $l \ll n$. Это обстоятельство способствует «выживанию», повышая возможность практического использования состояний с максимальными орбитальными моментами из водородоподобной энергетической оболочки с фиксированным n.

3.2. Уширение, индуцированное ИЧТ

Из выражения (26) видно, что естественное время жизни циркулярного состояния из ридберговской оболочки с $n = 100$ равно примерно 1 с. Для $n = 200$ время жизни составит около 30 с. Однако на практике вездесущее тепловое излучение окружающей среды может существенно уменьшить время пребывания атома в сильно возбужденном состоянии и даже превратить атом в ион за счет фотоионизации [14–16].

Взаимодействие с электромагнитным полем ИЧТ приводит к уширению атомных уровней, которое равно суммарной вероятности вынужденных переходов

$$\begin{aligned}
\Gamma^{\rm BBR}_{nlm}(T) &= \frac{4}{3c^3}\sum_{n'l'm'\mu}\frac{|\omega_{n'n}|^3|\langle n'l'm'|r_\mu|nlm\rangle|^2}{\exp[|\omega_{n'n}|/(k_{\rm B}T)]-1}\\
&= \frac{2}{3c^3}\sum_{n'}\frac{\omega^2_{n'n}|f_{n'n(\mu)}|}{\exp[|\omega_{n'n}|/(k_{\rm B}T)]-1},
\end{aligned} \tag{27}$$

где суммирование выполняется по проекциям μ дипольного момента, а также по полному набору состояний с фиксированными орбитальным l' и магнитным m' квантовыми числами, включая состояния непрерывного спектра. Слагаемое, соответствующее единственно возможному вынужденному радиационному распаду циркулярного состояния $|nlm\rangle$ с переходом в состояние с квантовыми числами $n' = n - 1$, $l' = l - 1$, $|m'| = |m| - 1$, представляет собой вероятность термоиндуцированного распада

$$\Gamma^{\rm d}_{nl} = \Gamma^{\rm sp}_{nl}\bar{n}(\omega_{n\,n-1}, T), \tag{28}$$

отличающуюся от вероятности спонтанного распада (24) множителем

$$\bar{n}(\omega_{nn-1}, T) = \frac{1}{\exp[\omega_{nn-1}/(k_{\rm B}T)]-1}. \tag{29}$$

Функция (29) определяет число тепловых фотонов (число заполнения или населенность) из распределения Планка на частоте $\omega_{n\,n-1} = Z^2[1 - 1/(2n)]/[n^3(1 - 1/n)^2]$. Эту функцию можно рассматривать как относительную (по сравнению со спонтанной) скорость вынужденного радиационного распада $\bar{n}(\omega_{n\,n-1}, T) = \Gamma^{\rm d}_{nl}(T)/\Gamma^{\rm sp}_{nl}$ циркулярного состояния атома под действием теплового излучения. Следует отметить, что при малом параметре $\eta = Z^2/(n^3k_{\rm B}T) \ll 1$ величина $\bar{n}(\omega_{n\,n-1}, T) \approx n^3k_{\rm B}T/Z^2$ быстро растет с ростом произведения n^3T, и при этом она в кратное Z^2 раз меньше для ионов по сравнению с $\bar{n}(\omega_{n\,n-1}, T)$ для нейтральных атомов. Такая оценка числа фотонов соответствует учету только главного слагаемого ($1/x$) в разложении по степеням показателя экспоненты в дроби из правой части (29)

$$\frac{1}{\exp(x)-1} = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\coth\left(\frac{x}{2}\right) = \frac{1}{x} - \frac{1}{2} + \frac{x}{12} - \frac{x^3}{720} + \frac{x^5}{30240} - o((x/6)^7). \tag{30}$$

Замена множителя $\{\exp[|\omega_{n'n}|/(k_{\rm B}T)]-1\}^{-1}$ первым членом разложения (30) и использование правила суммирования для $\overline{S_{nlm}^{(1)}}$ из выражений (20) дает известный асимптотический результат для вероятности индуцированного ИЧТ распада ридберговского состояния [11, 12]:

$$\varGamma_{nlm}^{\rm BBR}(T) \approx \varGamma_n^{(0)}(T) = \frac{2k_{\rm B}T\overline{S_n^{(1)}}}{c^3} = \frac{4Z^2k_{\rm B}T}{3c^3n^2}. \tag{31}$$

При $x < 1$ члены знакопеременного ряда в правой части выражения (30) быстро убывают, так что первые три слагаемых обеспечивают аппроксимацию функции $\{\exp[|\omega_{n'n}|/(k_{\rm B}T)]-1\}^{-1}$ с относительной погрешностью, не превышающей 0.2 %, а учет четвертого слагаемого снижает погрешность еще на два порядка. Отметим, что при комнатной температуре ($T \approx 300$ K) аргумент экспоненты в (27), (29) принимает значения, меньшие единицы, уже при $n \geqslant 11Z^{2/3}$.

Интересным с точки зрения численного расчета и определения области применимости выражения для термоиндуцированной ширины (27) является не зависящее от x постоянное слагаемое в разложении (30), равное –1/2. Это слагаемое с учетом равенства вкладов состояний с $n' < n$ и с $n' > n$ в сумме (27) дает отрицательную поправку к асимптотическому выражению для термоиндуцированной ширины (31), в точности совпадающую по абсолютной величине со спонтанной шириной (24). Таким образом, в разложении по степеням параметра η суммарной вероятности $\varGamma_n^{\rm tot}(T) = \varGamma_n^{\rm sp} + \varGamma_n^{\rm BBR}(T)$ распада ридберговского состояния отсутствует не зависящая от температуры составляющая, а первая неисчезающая поправка к $\varGamma_n^{(0)}(T)$ пропорциональна η^2. Следовательно, асимптотическую формулу для $\varGamma_n^{\rm tot}(T)$ можно представить в виде

$$\varGamma_n^{\rm tot}(T) = \varGamma_n^{(0)}(T)[1 + a_1\eta^2 - a_2\eta^4 + o(\eta^6)]. \tag{32}$$

Коэффициенты этого разложения a_k определяются коэффициентами ряда (30) и правилами сумм для моментов $\overline{S_{nlm}^{(q)}}$ с нечетными показателями $q = 2k + 1$:

$$a_1 = \frac{n^6\overline{S_{nlm}^{(3)}}}{12Z^4\overline{S_{nlm}^{(1)}}} = \frac{2n^3}{3(2n-3)_3},$$
$$a_2 = \frac{n^{12}\overline{S_{nlm}^{(5)}}}{720Z^8\overline{S_{nlm}^{(1)}}} = \frac{8n^5(n^2+n+18)}{45(2n-7)_7}. \tag{33}$$

Противоположные знаки поправок $a_1\eta^2$ и $-a_2\eta^4$ отвечают знакам соответствующих членов $x/12$ и $-x^3/720$ в разложении (30). Отметим, что коэффициент при η^2 в работе [7] записан в виде разложения по степеням малого параметра $1/n$, которое в точности совпадает с разложением замкнутого выражения для a_1 из (33).

Таким образом, при $\eta \leqslant 1$ суммарная ширина (32) (спонтанная плюс термоиндуцированная) уровня энергии циркулярного состояния совпадает с асимптотическим выражением (31) для термоиндуцированной ширины с относительной погрешностью порядка $a_1\eta^2 \approx \eta^2/12$. Поправки высших порядков при $\eta \leqslant 1$ пренебрежимо малы, поскольку коэффициент a_2 в 12 раз меньше a_1 при $n = 10$, а с ростом n это соотношение плавно уменьшается, так что $a_2/a_1 \to 1/60$ при $n \to \infty$, как это видно из явных выражений (33). При $T = 100$ K и $n = 15$ параметр $\eta \approx Z^2$ и поправка к $\varGamma_n^{(0)}(T)$ для нейтрального атома ($Z = 1$) не превышает 10 % (40 % для однократного иона, $Z = 2$).

Сравнение $\varGamma_n^{(0)}(T)$ со спонтанной шириной (24) показывает, что при комнатной температуре полная ширина (32) превышает спонтанную для всех циркулярных ридберговских состояний атомов и ионов с главными квантовыми числами $n > 8$. Зависимость от заряда остова и температуры для этого неравенства можно дополнить выражением $n > 8(Z^2\,300/T)^{1/3}$. Обратим внимание на то, что эта зависимость является более плавной по сравнению с аналогичной зависимостью в неравенстве $n > bZ^2\,300/T$ для состояний с малыми орбитальными моментами, где коэффициент b принимает различные значения для ридберговских состояний разных серий многоэлектронных атомов: $2 < b < 20$ [17, 25].

4. Термоиндуцированный сдвиг уровня энергии циркулярного состояния

Сдвиг уровня энергии циркулярного состояния под действием электрического поля ИЧТ можно представить в виде [13]

$$\varepsilon_{nlm}^{\rm BBR}(T) = -\frac{\alpha_{nlm}(\omega_{\max})}{2}\overline{E^2}(T), \tag{34}$$

где $\alpha_{nlm}(\omega_{\max})$ – динамическая поляризуемость на частоте максимума $\omega_{\max} \approx 2.82k_{\rm B}T$ распределения $E^2(\omega, T) = [8\omega^3/(\pi c^3)]\{\exp[\omega/(k_{\rm B}T)]-1\}^{-1}$ квадрата напряженности электрического поля ИЧТ по частоте;

$$\overline{E^2}(T) = \int_0^\infty \frac{E^2(\omega, T)}{2}{\rm d}\omega = \frac{4\pi^3}{15c^3}(k_{\rm B}T)^4 \tag{35}$$

– средний квадрат напряженности электрического поля ИЧТ. Для низких температур окружающей среды, т. е. при $1/\eta = (n^3k_{\rm B}T)/Z^2 \ll 1$, частота $\omega_{\max}$ тоже мала, так что динамическую поляризуемость в (34) можно заменить статической (14), $\alpha_{nlm}(\omega_{\max}) \approx \alpha_{nlm}(0)$. Тогда с учетом (14) выражение (34) для циркулярного состояния можно переписать в виде

$$\varepsilon_{nlm}^{\rm BBR}(T) = -2.1528\frac{n^4(n+1)(4n+5)}{4Z^4}\left(\frac{T}{300}\right)^4 (\text{в мГц}). \tag{36}$$

В частности, для $n = 5$ при температуре $T < 300Z^2$ (в K), удовлетворяющей условию $\eta \gg 1$, термоиндуцированный сдвиг $\varepsilon_{nlm}^{\rm BBR}(T) \approx -[T/(300Z)]^4 \times 247.86$ (в Гц). При этом динамическая поправка, учитывающая квадратичное слагаемое в разложении поляризуемости по частоте (3), составляет менее $[T/(300Z^2)]^2 \times 0.05$ % от этой величины.

В случае противоположного неравенства для отношения энергии перехода к тепловой энергии, $\eta \ll 1$, можно было бы использовать разложение действительной части поляризуемости в ряд (4) по четным степеням обратной частоты. Однако интегрирование по частоте ИЧТ произведения ряда (4) и распределения $E^2(\omega, T)$ оказывается возможным только для первого слагаемого этого ряда, не зависящего от главного квантового числа n. Результат такого интегрирования дает хорошо известное асимптотическое выражение [11–13]

$$\varepsilon_0(T) = \frac{\pi(k_B T)^2}{3c^3} = 2416.65(T/300)^2 \text{ (в Гц)}. \tag{37}$$

Интегралы по частотам ИЧТ со следующими слагаемыми ряда (4) расходятся на нижнем пределе, $\omega = 0$. Поэтому для получения поправок к $\varepsilon_0(T)$ в аналитическом виде можно воспользоваться функцией [13]

$$F(y) = -2yP\int_0^\infty \frac{x^3 dx}{(x^2 - y^2)[\exp(x) - 1]}, \tag{38}$$

где P – главное значение интеграла, эффективно учитывающей частотную зависимость действительной части динамической поляризуемости в интеграле, определяющем индуцированный ИЧТ сдвиг уровня энергии атома [26]:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{nl}^{\rm BBR}(T) = &-\frac{2}{3\pi c^3}P\int_0^\infty \Bigg[\sum_{n'l'm'\mu}\frac{2\omega_{n'n}|\langle n'l'm'|r_\mu|nlm\rangle|^2}{\omega_{n'n}^2 - \omega^2} \\ &+ \int_0^\infty \frac{2(\varepsilon + |E_{nl}|)|\langle \varepsilon l'm'|r_\mu|nlm\rangle|^2}{(\varepsilon + |E_{nl}|)^2 - \omega^2}d\varepsilon\Bigg]\frac{\omega^3 d\omega}{\exp[\omega/(k_B T)] - 1} \\ = &-\frac{2(k_B T)^3}{3\pi c^3}\Bigg\{\sum_{n'l'm'\mu}\Bigg[|\langle n'l'm'|r_\mu|nlm\rangle|^2 F\left(\frac{\omega_{n'n}}{k_B T}\right)\Bigg] \\ &+ \int_0^\infty |\langle \varepsilon l'm'|r_\mu|nlm\rangle|^2 F\left(\frac{(\varepsilon + |E_{nl}|)}{k_B T}\right)d\varepsilon\Bigg\}.\end{aligned} \tag{39}$$

Здесь суммирование по проекциям дипольного момента соответствует учету всех возможных поляризаций фотонов ИЧТ. Функцию (38) можно преобразовать к виду, позволяющему получить замкнутое аналитическое выражение [7] $F(y) = -\pi^2 y/3 - 2y^3 \mathrm{Re}[\Phi(\mathrm{i}y)]$, где [27]

$$\begin{aligned}\Phi(z) &= \int_0^\infty \frac{x dx}{(x^2 + z^2)[\exp(x) - 1]} \\ &= \frac{1}{2}\left[\ln\left(\frac{z}{2\pi}\right) - \frac{\pi}{z} - \psi\left(\frac{z}{2\pi}\right)\right], \quad \mathrm{Re}\, z > 0.\end{aligned} \tag{40}$$

Функция $\psi(x) = \mathrm{d}\{\ln[\Gamma(x)]\}/\mathrm{d}x$ – логарифмическая производная гамма-функции. Используя аналитическое продолжение для правой части выражения (40) и полагая $z = \pm\mathrm{i}|y| + \delta$ при $\delta \to +0$, получаем

$$F(y) = -\frac{\pi^2}{3}y - \left\{\ln\left(\frac{|y|}{2\pi}\right) - \mathrm{Re}\left[\psi\left(\mathrm{i}\frac{|y|}{2\pi}\right)\right]\right\}y^3. \tag{41}$$

Для определения действительной части ψ-функции в этом выражении можно воспользоваться разложением в ряд [28]

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

где $\gamma = 0.5772156649$ – постоянная Эйлера. Используя разложение слагаемых ряда по степеням отношения $y^2/(4\pi^2 k^2)$ и выполняя суммирование по k, получаем формальное разложение функции (38) в степенной ряд по нечетным степеням аргумента [7]:

$$\begin{aligned}F(y) = &-\frac{\pi^2}{3}y - \Bigg[\ln\left(\frac{|y|}{2\pi}\right) + \gamma + \sum_{p=1}^\infty (-1)^p \\ &\times \zeta(2p+1)\left(\frac{y}{2\pi}\right)^{2p}\Bigg]y^3,\end{aligned} \tag{42}$$

где

$$\zeta(s) = \sum_{k=1}^\infty k^{-s}$$

– дзета-функция Римана [27, 28]. Слагаемое, пропорциональное y^3, необходимо учитывать в области $|y| > 0.01$, а для достижения точности в шестом десятичном знаке в области $0.1 < |y| < 1$ следует учесть еще и первое слагаемое суммы из сомножителя (в квадратных скобках) с y^3. Подробные обсуждения свойств выражения (42) даны в работе [7].

Для сдвига, как и для уширения уровня энергии ридберговского циркулярного состояния, можно предложить полиномиальную аппроксимацию, существенно расширяющую область использования одинакового для всех ридберговских состояний и не зависящего от n и Z асимптотического приближения (37), которое соответствует учету только первого (линейного) слагаемого в разложении (42). Такое приближение определяет сдвиг (39) с относительной погрешностью порядка 10^{-3} при условии $n^3 k_B T > 100Z^2$, что соответствует численным значениям главного квантового числа $n > 47\sqrt[3]{300Z^2/T}$.

Выражение для поправок к $\varepsilon_0(T)$, уточняющих величину $\varepsilon_n^{\rm BBR}(T)$ при меньших значениях главного квантового числа n и температуры T, можно получить при учете слагаемого, пропорционального y^3 из правой части выражения (42). Для этого подставим (42) в (39) и перепишем выражение для $\varepsilon_n^{\rm BBR}(T)$ с использованием определения (14) для усредненных сил осцилляторов:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{nl}^{\rm BBR}(T) = \frac{1}{\pi c^3}\Bigg[&\frac{(\pi k_B T)^2}{3}\overline{S_{nlm}^{(0)}} + \tilde{S}_{nlm}^{(2)} + \gamma\overline{S_n^{(2)}} \\ &+ \sum_{p=1}^\infty \frac{(-1)^p \zeta(2p+1)}{(2\pi k_B T)^{2p}}\overline{S_n^{(2p+2)}}\Bigg].\end{aligned} \tag{43}$$

Здесь введено специальное обозначение для сил осцилляторов с логарифмическим фактором

$$\tilde{S}_{nlm}^{(2)} = \frac{2}{3}\sum_{n'l'm'\mu}\omega_{n'n}^3 |\langle n'l'm'|r_\mu|nlm\rangle|^2 \ln\left(\frac{|\omega_{n'n}|}{2\pi k_B T}\right). \tag{44}$$

Поскольку $\overline{S_n^{(2)}} = 0$, третье слагаемое (постоянную Эйлера γ) в квадратных скобках в правой части (42) можно опустить, а к логарифму в правой части (44) можно добавить не зависящее от n' слагаемое $\ln(2\pi/\eta)$. Тогда выражение (44) преобразуется к виду

$$\tilde{S}^{(2)}_{nlm} = \frac{2}{3}\sum_{n'l'm'\mu}\omega^3_{n'n}|\langle n'l'm'|r_\mu|nlm\rangle|^2\ln\left(\frac{n^3|\omega_{n'n}|}{Z^2}\right), \quad (45)$$

явно показывающему, что термоиндуцированный сдвиг (43) содержит не зависящее от температуры слагаемое. Аналитическое выражение для суммы (45) в замкнутом виде получить не представляется возможным. Поэтому для оценки $\tilde{S}^{(2)}_{nlm}$ можно воспользоваться разложением в ряд по степеням малого параметра $|p/n| \ll 1$, где $p = n' - n$, для каждого из трех сомножителей суммируемого по n' произведения из правой части выражения (45). Поскольку аргумент логарифма в (45) близок к единице, разложение для него имеет вид

$$\ln\left(\frac{n^3}{Z^2}|\omega_{n'n}|\right) = \ln|p| - \frac{3p}{2n} + \frac{7p^2}{8n^2} - \frac{5p^3}{8n^3} + \ldots . \quad (46)$$

Подставляя в (45) аналогичные (46) разложения для $\omega^3_{n'n}$ и радиальных матричных элементов $|\langle n'l'|r|nl\rangle|^2$ (после интегрирования по угловым переменным матричных элементов $\langle n'l'm'|r_\mu|nlm\rangle$ [7]), получаем ряд слагаемых, представляющих величину $\tilde{S}^{(2)}_{nlm}$ в виде разложения по степеням малого параметра $1/n \ll 1$. Ограничиваясь слагаемыми порядка $1/n^3$, можно записать

$$\tilde{S}^{(2)}_{nlm} = -A_1\pi c^3\varepsilon_0(T)\eta^2B_1(n) = -\frac{\pi^2Z^4}{3n^6}A_1B_1(n), \quad (47)$$

где $A_1 = [3 - 4\ln(2)]/\pi^2 = 0.0230416$ – константа; $B_1(n) = 1 + b_1/n + b_2/n^2 + b_3/n^3$ – кубический полином с коэффициентами

$$b_1 = \frac{9[32\ln(2) - 27\ln(3) + 8]}{8[3 - 4\ln(2)]} \approx 2.56342,$$

$$b_2 = -\frac{42496\ln(2) - 25515\ln(3) - 1464}{48[3 - 4\ln(2)]} \approx 3.58290, \quad (48)$$

$$b_3 = \frac{7819264\ln(2) - 2123577\ln(3) - 1953125\ln(5) + 56880}{384[3 - 4\ln(2)]} \approx 4.11773.$$

Таким образом, по аналогии с формулой для термоиндуцированного уширения (32) выражение для сдвига (43) можно записать в виде разложения по четным степеням параметра η:

$$\varepsilon^{\rm app}_{nl}(T) = \varepsilon_0(T)[1 - \eta^2A_1B_1(n) - \eta^4A_2B_2(n) + o(\eta^6)], \quad (49)$$

где константа $A_2 = 3\zeta(3)/(2\pi^4) \approx 0.0185104$ и сомножитель $B_2(n) = (2n)^5/(2n-5)_5$ определяется из явного выражения в (22) для суммы моментов сил осцилляторов $\overline{S^{(4)}_{nlm}}$. Второе слагаемое в (49) соответствует второму члену в квадратных скобках в выражении (43) и определяет не зависящую от температуры составляющую термоиндуцированного сдвига

$$\tilde{\varepsilon} = \frac{\tilde{S}^{(2)}_n}{\pi c^3} = -\frac{\pi Z^4}{3c^3n^6}A_1B_1(n). \quad (50)$$

Для наглядности в табл.1 приведены численные значения параметра η/Z^2 и величины $-\eta^2A_1B_1(n)/Z^4$ при комнатной температуре T = 300 K и различных значениях главного квантового числа n. В четвертом и пятом столбцах табл.1 представлены численные значения относительных поправок к асимптотической величине $\Gamma^{(0)}_n(T)$ для полного уширения (32) в нейтральном атоме ($Z = 1$)

$$\Delta\Gamma^{\rm app}_n(T) = [\Gamma^{\rm tot}_n(T) - \Gamma^{(0)}_n(T)]/\Gamma^{(0)}_n(T) \approx a_1\eta^2 - a_2\eta^4$$

и поправок к $\Gamma^{(0)}_n(T)$ для точного значения ширины (27)

$$\Delta\Gamma^{\rm BBR}_n(T) = [\Gamma^{\rm BBR}_n(T) - \Gamma^{(0)}_n(T)]/\Gamma^{(0)}_n(T).$$

В шестом и седьмом столбцах даны численные значения относительных поправок к $\varepsilon_0(T)$ для приближенного значения (49)

$$\Delta\varepsilon^{\rm app}_{nl}(T) = [\varepsilon^{\rm app}_{nl}(T) - \varepsilon_0(T)]/\varepsilon_0(T) = -\eta^2A_1B_1(n) - \eta^4A_2B_2(n)$$

и поправок к $\varepsilon_0(T)$ для точного значения (39)

$$\Delta\varepsilon^{\rm BBR}_{nl}(T) = [\varepsilon^{\rm BBR}_{nl}(T) - \varepsilon_0(T)]/\varepsilon_0(T).$$

5. Заключение

Полученные в настоящей работе результаты аналитических расчетов дают важную информацию о точности и области применимости асимптотического выражения (31) для термоиндуцированного (27) и полного (32) уширений, а также выражения (37) для сдвига уровней энергии циркулярных состояний атомов в поле ИЧТ. Выбор циркулярных орбит оправдан не только их наличием у сильно возбужденных атомов практически всех элементов периодической системы, но и возможностью аналитических расчетов, поскольку циркулярные ридберговские состояния имеют нулевые квантовые дефекты и описываются водородоподобными волновыми функциями. В аналитическом виде продемонстрированы сокращение не зависся-

Табл.1. Численные значения параметра η, пропорциональной η^2 поправки к $\varepsilon_0(T)$, поправок к уширению $\Delta\Gamma^{\rm app}_n(T) = a_1\eta^2/Z^4 - a_2\eta^4/Z^8$ и $\Delta\Gamma^{\rm BBR}_n(T) = [\Gamma^{\rm BBR}_n(T) - \Gamma^{(0)}_n(T)]/\Gamma^{(0)}_n(T)$, а также к сдвигам $\Delta\varepsilon^{\rm app}_{nl}(T) = -\eta^2A_1B_1(n) - \eta^4A_2B_2(n)$ и $\Delta\varepsilon^{\rm BBR}_{nl}(T) = [\varepsilon^{\rm BBR}_{nl}(T) - \varepsilon_0(T)]/\varepsilon_0(T)$ для циркулярных состояний с главными квантовыми числами n для нейтральных атомов ($Z = 1$) при $T = 300$ K.

n	η/Z^2	$-\eta^2A_1B_1(n)/Z^4$	$\Delta\Gamma^{\rm app}_n$	$\Delta\Gamma^{\rm BBR}_n$	$\Delta\varepsilon^{\rm app}_{nl}(T)$	$\Delta\varepsilon^{\rm BBR}_{nl}(T)$
10	1.0526	-3.3093×10^{-2}	1.1604×10^{-1}	1.2040×10^{-1}	-8.3791×10^{-2}	-6.2326×10^{-2}
15	0.3119	-2.6626×10^{-3}	9.9404×10^{-3}	9.9114×10^{-3}	-2.9594×10^{-3}	-2.9631×10^{-3}
20	0.1316	-4.5379×10^{-4}	1.6828×10^{-3}	1.6765×10^{-3}	-4.6199×10^{-4}	-4.7189×10^{-4}
30	0.0390	-3.8156×10^{-5}	1.4025×10^{-4}	1.4006×10^{-4}	-3.8211×10^{-5}	-3.8588×10^{-5}
50	0.0084	-1.7200×10^{-6}	6.2789×10^{-6}	6.2784×10^{-6}	-1.7201×10^{-6}	-1.7213×10^{-6}

щей от температуры спонтанной составляющей $\Gamma_n^{\rm sp}$ в суммарной ширине $\Gamma_n^{\rm tot}(T) = \Gamma_n^{\rm sp} + \Gamma_n^{\rm BBR}(T)$, а также наличие не зависящей от температуры составляющей $\tilde{\varepsilon}$ (50) в выражении для сдвига ридберговского уровня энергии. Отметим, что поправки к асимптотическому значению уширения положительны, как это и следует из (32) и (33), а поправки к асимптотике сдвига отрицательны, как это видно из (49) и данных табл.1.

При $n > 15$ и фиксированной температуре $T = 300$ K основной вклад в отклонения $\Delta\Gamma_n^{\rm app}(T)$ и $\Delta\varepsilon_{nl}^{\rm app}(T)$ от асимптотических значений $\Gamma_n^{(0)}(T)$ и $\varepsilon_0(T)$ термоиндуцированного уширения и сдвига циркулярных состояний нейтрального атома дают пропорциональные η^2 поправки: $a_1\eta^2$ и $-A_1B_1(n)\eta^2$ соответственно.

Настоящая работа выполнена при поддержке РФФИ (грант №18-02-00053-а), а также Министерства науки и высшего образования РФ в рамках госзаданий по проектам №3.1659.2017/4.6 и 3.7514.2017/8.9, а также госзадания по проекту FZGU-2020-0035.

1. Kleppner D. *Phys. Rev. Lett.*, **47**, 233 (1981).
2. Hulet R.G., Kleppner D. *Phys. Rev. Lett.*, **51**, 1430 (1983).
3. Hulet R.G., Hilfer E.S., Kleppner D. *Phys. Rev. Lett.*, **55**, 2137 (1985).
4. Nguen T.L., Raimond J.M., Sayrin C., et al. *Phys. Rev. X*, **8**, 011032 (2018).
5. Glukhov I.L., Mokhnenko S.N., Nikitina E.A., Ovsiannikov V.D. *Eur. Phys. J. D*, **69**, 1 (2015).
6. Kamenski A.A., Manakov N.L., Mokhnenko S.N., Ovsiannikov V.D., Zenischeva A.A. *Eur. Phys. J. D*, **72**, 174 (2018).
7. Каменский А.А., Овсянников В.Д., Глухов И.Л. *Квантовая электроника*, **49**, 464 (2019) [*Quantum Electron.*, **49**, 464 (2019)].
8. Walker T.G., Saffman M. *Phys. Rev. A*, **77**, 032723 (2008).
9. Saffman M., Walker T.G., Mølmer K. *Rev. Mod. Phys.*, **82**, 2313 (2010).
10. Рябцев И.И., Бетеров И.И., Третьяков Д.Б., Якшина Е.А., Энтин В.М. *Квантовая электроника*, **49**, 455 (2019) [*Quantum Electron.*, **49**, 455 (2019)].
11. Gallagher T.F., Cooke W.E. *Phys. Rev. Lett.*, **42**, 835 (1979).
12. Cooke W.E., Gallagher T.F. *Phys. Rev. A*, **21**, 588 (1980).
13. Farley J.W., Wing W.H. *Phys. Rev. A*, **23**, 2397 (1981).
14. Spencer W.P., Vaidyanathan A.G., Kleppner D., Ducas T.W. *Phys. Rev. A*, **26**, 1490 (1982).
15. Beterov I.I., Tretyakov D.B., Ryabtsev I.I., Ekers A., Bezuglov N.N. *Phys. Rev. A*, **75**, 052720 (2007).
16. Glukhov I.L., Ovsiannikov V.D. *J. Phys. B*, **42**, 075001 (2009).
17. Glukhov I.L., Nekipelov E.A., Ovsiannikov V.D. *J. Phys. B*, **43**, 125002 (2010).
18. Ovsiannikov V.D., Glukhov I.L., Nekipelov E.A. *J. Phys. B*, **44**, 195010 (2011).
19. Варшалович Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К. *Квантовая теория углового момента* (Л.: Наука, 1975).
20. Бете Г., Солпитер Э. *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами* (М.: ГИФМЛ, 1960).
21. Fano U., Cooper J.W. *Rev. Mod. Phys.*, **40**, 441 (1968).
22. Manakov N.L., Ovsiannikov V.D., Rapoport L.P. *Phys. Rep.*, **141**, 319 (1986).
23. Бейтмен Г., Эрдейи А. *Высшие трансцендентные функции. Т. 1,2* (М.: Наука, 1973).
24. Marmo S.I., Ovsiannikov V.D. *Phys. Lett. A*, **202**, 201 (1995).
25. Овсянников В.Д., Глухов И.Л. *Вестник ВГУ. Сер. Физика. Математика*, № 2, 99 (2006).
26. Glukhov I.L., Nikitina E.A., Ovsiannikov V.D. *J. Phys. B*, **49**, 035003 (2016).
27. Градштейн И.С., Рыжик И.М. *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений* (М.: Физматгиз, 1963, с. 342, 3.415.1).
28. Прудников А.П., Брычков Ю.А., Маричев О.И. *Интегралы и ряды. Элементарные функции* (М.: Наука, 1981, с. 775, П. II.2).