

ТЕРМОИНДУЦИРОВАННЫЕ ШТАРКОВСКИЕ СДВИГИ ВЫСОКОВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ АТОМА ВОДОРОДА

Т. А. Залялютдинов^{a,b*}, А. А. Аникин^a, Д. А. Соловьев^a

^a Санкт-Петербургский государственный университет
198504, Санкт-Петербург, Россия

^b Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт»
188300, Гатчина, Ленинградская область, Россия

Поступила в редакцию 26 апреля 2022 г.,
после переработки 3 июня 2022 г.
Принята к публикации 3 июня 2022 г.

Исследуются термоиндуцированные штарковские сдвиги и уширение линий высоковозбужденных уровней атомарного водорода. Проведены численные расчеты для ns/nd -состояний (n — главное квантовое число) с целью использования результатов в текущих и планируемых прецизионных измерениях частот переходов в атоме водорода. Результаты приведены для криогенной температуры и широкого диапазона значений, охватывающих комнатную температуру. Установлено, что для состояний с главным квантовым числом $n \geq 8$ аккуратные численные расчеты теплового эффекта Штарка с учетом лэмбовского сдвига и тонкой структуры выявляют значительное отклонение от значений, полученных ранее в рамках приближенных методов. Представленные результаты могут быть использованы для анализа данных современных прецизионных экспериментов и уточнения фундаментальных констант, в частности постоянной Ридберга и зарядового радиуса протона.

DOI: 10.31857/S0044451022110013
EDN: KXYGSW

1. ВВЕДЕНИЕ

Высоковозбужденные состояния в простых атомных системах представляют фундаментальный интерес для прецизионных тестов квантовой электродинамики, поиска ограничений на “новую” физику, создания стандартов частоты и астрофизических исследований [1]. В то же время они имеют и перспективы прикладного применения при создании элементов логики квантовых компьютеров, в частности квантовых вентилях [2, 3]. Высоковозбужденные атомы, в свою очередь, чрезвычайно чувствительны к внешним полям, в том числе и к полю равновесного теплового излучения, что делает исследование его влияния на уровни энергий и времена жизни состояний чрезвычайно важным. Преследуя цель повышения точности определения стандартов частоты и времени, в прецизионных экспери-

ментах на нейтральных атомах в оптических решетках необходимо потребовать стабилизации внешних условий и, в частности, контроля тепловых эффектов. Таким образом, детальное теоретическое описание количественных характеристик термоиндуцированных сдвигов и уширения спектральных линий остается актуальным и в настоящее время [4–11].

В рамках квантовой механики (КМ) сдвиги энергии и вероятности излучения, индуцированные равновесным тепловым излучением (излучением абсолютно черного тела), возникают во втором порядке теории возмущений. Недавно в работе [12] было показано, что в рамках релятивистской квантовой электродинамики (КЭД) при конечной температуре квантовомеханические результаты возникают из радиационной поправки на собственную энергию связанного электрона в нерелятивистском пределе путем замены фотонного пропагатора на соответствующую тепловую функцию Грина. В частности, тепловой штарковский сдвиг представлен действительной частью термальной собственно-энергетической поправки, в то время как мнимая часть соответству-

* E-mail: t.zalialutdinov@spbu.com

ет уширению линии за счет переходов индуцированных равновесным тепловым излучением. Следует отметить, что КЭД-подход имеет очевидное преимущество по сравнению с КМ-теорией. Если действовать в полной аналогии с “обычной” квантовой электродинамикой для нулевых температур, становится возможным изучать тепловые радиационные эффекты, относящиеся к различным диаграммам Фейнмана. Так, в работах [13–17] в рамках метода контура линии и адиабатической S -матрицы [18–22] были рассчитаны однопетлевые термальные поправки к вероятностям переходов, сечениям рекомбинации, сдвигам энергий в одно- и двухэлектронных системах.

В данной работе представлены аккуратные теоретические расчеты теплового штарковского сдвига и уширения линий для ns/nd -состояний атомарного водорода для криогенной температуры и диапазона температур, охватывающего лабораторные (комнатные) условия. Такой выбор обусловлен следующими факторами. Во-первых, с целью уменьшения влияния внешних условий на измерения используются криогенные температуры. Во-вторых, поскольку излучение абсолютно черного тела является микроволновым и, как следствие, плохо экранируемым, уменьшение влияния комнатных температур требует использования специального оборудования [23]. Более того, весьма затруднительно с экспериментальной точки зрения охладить до криогенных температур область, где проводятся измерения. Наконец, теоретические расчеты для различных температур позволяют выявить характерное поведение исследуемых величин, допускающее последующую численную экстраполяцию на требуемые температуры.

Статья имеет следующую структуру. В разд. 2 в рамках релятивистской квантовой электродинамики при конечных температурах приводится краткий вывод однопетлевых тепловых поправок к связанным состояниям в одноэлектронных системах. Численные результаты термоиндуцированных сдвигов и уширений линий обсуждаются в разд. 3. В тексте используются релятивистские единицы (р.е.) ($\hbar = c = m = 1$, где m — масса электрона).

2. КЭД-ОПИСАНИЕ ТЕПЛОВЫХ СДВИГОВ И УШИРЕНИЯ СПЕКТРАЛЬНОЙ ЛИНИИ ДЛЯ АТОМА ВОДОРОДА

В работе [12] в рамках КЭД-теории была рассмотрена температурно-зависимая однопетлевая

собственно-энергетическая (СЭ) поправка к связанному состоянию атомного электрона. Согласно этому подходу штарковский сдвиг возникает в качестве вещественной части СЭ-поправки, а соответствующая мнимая часть представляет скорость депопуляции, индуцированную чернотельным излучением (ЧИ), для данного атомного состояния.

В КЭД-теории радиационная однопетлевая СЭ-поправка для атомного электрона дается графиком Фейнмана на рис. 1.

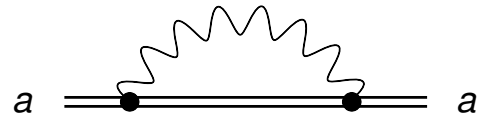


Рис. 1. Однопетлевая тепловая собственно-энергетическая поправка для энергии атомного электрона в состоянии a . Двойная сплошная линия обозначает электронные состояния и электронный пропагатор во внешнем потенциале ядра (картина Фарри). Волнистая линия обозначает фотон “тепловой бани”

В формализме S -матрицы можно записать [24]

$$S_{fi} = e^2 \int dx_1^4 dx_2^4 \times \bar{\psi}_f(x_1) \gamma^{\mu_1} S(x_1, x_2) \gamma^{\mu_2} \psi_i(x_2) D_{\mu_1 \mu_2}(x_1, x_2), \quad (1)$$

где интегрирование выполняется по пространственно-временным четырехвекторам $x_1, x_2, x \equiv (t, \mathbf{r})$, \mathbf{r} — пространственный вектор и t — время. Матрицы Дирака обозначаются как γ_{μ_i} , где индекс μ_i принимает значения $\mu_i = (0, 1, 2, 3)$, $\psi(x) = \psi(\mathbf{r})e^{-iEt}$ — дираковская волновая функция электрона (E — энергия соответствующего уровня), $\bar{\psi}$ — дираковски-сопряженная волновая функция. Индексы f и i обозначают конечные и начальные состояния, а $S(x_1, x_2)$ и $D_{\mu_1 \mu_2}(x_1, x_2)$ — соответственно электронный и фотонный пропагаторы.

Стандартный (при нулевой температуре) электронный пропагатор, определяемый как вакуумное среднее от Т-хронологического произведения операторов электрон-позитронного поля, может быть представлен в виде разложения [24]:

$$S(x_1 x_2) = -i \langle 0 | T [\psi(x_1) \bar{\psi}(x_2)] | 0 \rangle = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t_1 - t_2)} \sum_n \frac{\psi_n(\mathbf{r}_1) \bar{\psi}(\mathbf{r}_2)}{\omega - E_n(1 - i0)}. \quad (2)$$

Суммирование в (2) ведется по всему дираковскому спектру энергий. В фейнмановской калибров-

Таблица 1. Тепловые штарковские сдвиги для ns -состояний ($n = 2, 3, 4, 6, 8, 20$) атома водорода в Гц для разных температур с учетом лэмбовского сдвига и тонкой структуры в кельвинах. Вторая строка для значения температуры $T = 300$ К соответствует значениям из работы [28]

Состояние	2s	3s	4s	6s	8s	12s	20s
$T = 77$	$-4.94 \cdot 10^{-3}$	$-3.80 \cdot 10^{-2}$	-0.19	2.11	14.32	15.77	108.44
$T = 290$	-0.91	-7.67	-43.79	-262.68	338.72	1258.29	2004.9
$T = 300$	-1.04	-8.79	-50.80	-273.48	398.08	1520.74	2149.64
	-1.077	-9.103	-51.19	-274.7	390.08	1533	-
$T = 310$	-1.19	-10.05	-58.68	-282.11	462.22	1651.15	2299.27
$T = 320$	-1.35	-11.43	-67.51	-288.38	530.58	1782.03	2453.78
$T = 330$	-1.53	-12.95	-77.36	-292.09	604.55	1918.2	2613.16

Таблица 2. Тепловые штарковские сдвиги для nd -состояний ($n = 2, 3, 4, 6, 8, 20$) атома водорода в Гц для разных температур с учетом Лэмбовского сдвига и тонкой структуры в кельвинах. Вторая строка для значения температуры $T = 300$ К соответствует значениям из работы [28]

Состояние	3d	4d	6d	8d	12d	20d
$T = 77$	$-6.80 \cdot 10^{-2}$	-0.28	2.66	16.54	18.02	110.75
$T = 290$	-14.25	-67.50	-310.06	434.02	1507.09	2032.34
$T = 300$	-16.35	-78.39	-318.86	505.91	1638.03	2178.59
	-16.60	-79.36	-323.0	490.3	1620	-
$T = 310$	-18.69	90.64	-324.39	583.10	1774.35	2329.74
$T = 320$	-21.27	104.39	-326.38	665.62	1916.14	2485.78
$T = 330$	-24.11	119.74	-324.62	753.54	2063.33	2646.72

ке стандартный фотонный пропагатор (при нулевой температуре) определяется как вакуумное среднее от Т-хронологического произведения операторов электромагнитного поля и может быть представлен в следующем виде [24]:

$$D_{\mu_1\mu_2}(x_1, x_2) = -i\langle 0 | T [A_{\mu_1}(x_1)A_{\mu_2}(x_2)] | 0 \rangle = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\Omega I_{\mu_1\mu_2}(|\Omega|, r_{12}) e^{-i\Omega r_{12}}, \quad (3)$$

$$I_{\mu_1\mu_2}(\Omega, r_{12}) = \frac{g_{\mu_1\mu_2}}{r_{12}} e^{i\Omega r_{12}}, \quad (4)$$

где $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ и $g_{\mu_1\mu_2}$ — метрический тензор (в дальнейшем используется псевдоевклидова метрика).

Поправка к уровню энергии атомного электрона a , возникающая из выражения (1), может быть представлена в виде вещественной и мнимой частей [24, 25]:

$$\Delta E_a = L^{SE} - \frac{i}{2}\Gamma_a. \quad (5)$$

Здесь L^{SE} обозначает низший порядок вклада собственной энергии электрона в лэмбовский сдвиг, а Γ_a определяет ширину уровня a . Другая радиационная поправка низшего порядка, также приводящая к сдвигу энергии, представляет собой поляризацию вакуума. Однако она не дает вклада в ширину уровня Γ_a и не важна для наших целей.

В дальнейшем мы рассмотрим влияние ЧИ на атом, когда связанные электроны подвержены воздействию “тепловой бани” (окружающей среды) при устойчивом тепловом равновесии. Теоретическое описание эффектов удобно проводить в рамках квантовой теории поля при конечных температурах. В соответствии с этой теорией (см., например, [26, 27]), вакуумное среднее бозе- и ферми-операторов заменяется на усреднение по каноническому ансамблю. В случае низких температур оказывается достаточным рассмотреть только бозонную часть (фермионная экспоненциально подавлена). Тогда фотонный пропагатор $D_{\mu_1\mu_2}$ может быть

определен следующим образом:

$$\begin{aligned} iD_{\mu_1\mu_2}(x_1, x_2) &= \langle T [A_{\mu_1}(x_1)A_{\mu_2}(x_2)] \rangle_\beta = \\ &= \text{Tr} (\rho \{ T [A_{\mu_1}(x_1)A_{\mu_2}(x_2)] \}) = \\ &= iD_{\mu_1\mu_2}^0(x_1, x_2) + iD_{\mu_1\mu_2}^\beta(x_1, x_2), \end{aligned} \quad (6)$$

где ρ обозначает (в нулевом приближении) статистический оператор для невзаимодействующих фотонов, электронов и позитронов. След, обозначенный как Tr , в выражении (6) пробегает все (многочастичные) фокковские состояния. Согласно теореме Вика, Т-хронологическое произведение операторов электромагнитного поля может быть представлено в виде суммы свертки (вакуумное среднее Т-произведения) и нормально упорядоченного произведения $\langle : \dots : \rangle$ [24]:

$$\begin{aligned} \langle T [A_{\mu_1}(x_1)A_{\mu_2}(x_2)] \rangle_\beta &= \\ &= \langle 0 | T [A_{\mu_1}(x_1)A_{\mu_2}(x_2)] | 0 \rangle + \\ &+ \langle : A_{\mu_1}(x_1)A_{\mu_2}(x_2) : \rangle_\beta. \end{aligned} \quad (7)$$

Таким образом, фотонный пропагатор при конечных температурах возникает как сумма части с нулевой температурой $D_{\mu_1\mu_2}^0$ и зависящей от температуры части $D_{\mu_1\mu_2}^\beta$, включающей планковское распределение фотонов “тепловой бани” $n_\beta(\omega)$ [27], детальный вывод выражения (6) см. также в [13].

В рамках КЭД при конечных температурах газ свободных электронов (без внешнего поля) взаимодействует с фотонным газом. Обычно он рассматривается как находящийся в тепловом равновесии и определяется большим каноническим статистическим оператором, который модифицирует как электронный, так и фотонный пропагаторы. Поскольку наша задача состоит в описании влияния ЧИ на атомные уровни, где электроны являются сильно связанными кулоновским полем ядра, мы сохраняем стандартный электронный пропагатор Фейнмана, а соответствующая термальная поправка возникает из тепловой части фотонного пропагатора. Согласно [12], полная форма фотонного пропагатора (включая тепловую часть) в координатном пространстве может быть получена в виде

$$\begin{aligned} D_{\mu\nu}(x_1, x_2) &= \frac{g_{\mu\nu}}{2\pi i r_{12}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{i|\omega|r_{12}-i\omega(t_1-t_2)} - \\ &- \frac{g_{\mu\nu}}{\pi r_{12}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega n_\beta(|\omega|) \sin(|\omega|r_{12}) e^{-i\omega(t_1-t_2)}, \end{aligned} \quad (8)$$

где первый член дает фотонный пропагатор в фейнмановской калибровке при нулевой температуре, а

второй соответствует тепловому полю фотонов. Отметим, что второе слагаемое в (8) не имеет ультрафиолетовой расходимости, так как функция $n_\beta(\omega)$ обеспечивает естественное обрезание при $\omega \rightarrow \infty$.

Подстановка выражения (8) в (1) и вычисление вещественной части ΔE_a приводят к обычной СЭ-части лэмбовского сдвига и штарковского сдвига, индуцированного ЧИ. Температурно-зависимая однопетлевая СЭ-поправка дается выражением [12]

$$\Delta E_a = \frac{e^2}{\pi} \sum_n \left(\frac{1 - \alpha_1 \alpha_2}{r_{12}} I_{na}^\beta(r_{12}) \right)_{anna}, \quad (9)$$

где введено обозначение

$$I_{na}^\beta(r_{12}) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega n_\beta(|\omega|) \frac{\sin|\omega|r_{12}}{E_n(1-i0) - E_a + \omega} \quad (10)$$

и $\alpha_{1(2)}$ являются альфа-матрицами Дирака. Суммирование по n по-прежнему включает весь дираковский спектр энергий. Для легких атомных систем, таких как водород, удобно перейти к нерелятивистскому пределу в выражении (9). Тогда соответствующий сдвиг энергии в низшем порядке по α (постоянная тонкой структуры) равен

$$\begin{aligned} \Delta E_a &= \frac{2e^2}{3\pi} \sum_n \int_0^\infty d\omega n_\beta(\omega) \omega^3 |\langle a|\mathbf{r}|n \rangle|^2 \times \\ &\times \left[\frac{1}{E_n(1-i0) - E_a + \omega} + \frac{1}{E_n(1-i0) - E_a - \omega} \right]. \end{aligned} \quad (11)$$

Здесь суммирование проводится уже по состояниям дискретного и сплошного спектров решения уравнения Шредингера, четность которых противоположна четности состояния a (согласно правилам отбора для дипольного матричного элемента $\langle a|\mathbf{r}|n \rangle$).

Интегрирование по частоте ω может быть проведено по формуле Сохоцкого:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{x \pm i\epsilon} = \text{P.V.} \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x), \quad (12)$$

где обозначение P.V. подразумевает вычисление интеграла в смысле главного значения. Тогда зависящая от температуры вещественная часть выражения (11) определяет тепловой сдвиг

$$\begin{aligned} \Delta E_a^{\text{Stark}} &= \frac{2e^2}{3\pi} \sum_n \text{P.V.} \int_0^\infty d\omega n_\beta(\omega) \omega^3 |\langle a|\mathbf{r}|n \rangle|^2 \times \\ &\times \left[\frac{1}{E_n - E_a + \omega} + \frac{1}{E_n - E_a - \omega} \right], \end{aligned} \quad (13)$$

Таблица 3. Уширение линии для ns -состояний ($n = 2, 3, 4, 6, 8, 20$) атома водорода в с^{-1} для разных температур в кельвинах. Вторая строка для значения температуры $T = 300$ К соответствует значениям из работы [28]

Состояние	2s	3s	4s	6s	8s	12s	20s
$T = 77$	$3.59 \cdot 10^{-6}$	$2.11 \cdot 10^{-6}$	$1.85 \cdot 10^{-6}$	$8.04 \cdot 10^{-2}$	88.15	$2.15 \cdot 10^3$	$3.65 \cdot 10^3$
$T = 290$	$1.39 \cdot 10^{-5}$	$3.97 \cdot 10^{-5}$	10.60	$6.07 \cdot 10^3$	$2.33 \cdot 10^4$	$3.38 \cdot 10^4$	$2.29 \cdot 10^4$
$T = 300$	$1.44 \cdot 10^{-5}$	$8.20 \cdot 10^{-5}$	15.95	$7.03 \cdot 10^3$	$2.54 \cdot 10^4$	$3.56 \cdot 10^4$	$2.38 \cdot 10^4$
	$1.42 \cdot 10^{-5}$	$7.97 \cdot 10^{-5}$	16.02	$7.04 \cdot 10^3$	$2.54 \cdot 10^4$	$3.59 \cdot 10^4$	-
$T = 310$	$1.49 \cdot 10^{-5}$	$1.74 \cdot 10^{-4}$	23.37	$8.08 \cdot 10^3$	$2.75 \cdot 10^4$	$3.76 \cdot 10^4$	$2.48 \cdot 10^4$
$T = 320$	$1.54 \cdot 10^{-5}$	$3.64 \cdot 10^{-4}$	33.44	$9.20 \cdot 10^3$	$2.98 \cdot 10^4$	$3.96 \cdot 10^4$	$2.58 \cdot 10^4$
$T = 330$	$1.59 \cdot 10^{-5}$	$7.42 \cdot 10^{-4}$	46.82	$1.04 \cdot 10^4$	$3.21 \cdot 10^4$	$4.15 \cdot 10^4$	$2.68 \cdot 10^4$

Таблица 4. Уширение линии для nd -состояний ($n = 2, 3, 4, 6, 8, 20$) атома водорода в с^{-1} для разных температур в кельвинах. Вторая строка для значения температуры $T = 300$ К соответствует значениям из работы [28]

Состояние	3d	4d	6d	8d	12d	20d
$T = 77$	$1.34 \cdot 10^{-5}$	$3.29 \cdot 10^{-5}$	0.11	$1.07 \cdot 10^2$	$2.40 \cdot 10^3$	$3.82 \cdot 10^3$
$T = 290$	$8.85 \cdot 10^{-4}$	17.88	$8.29 \cdot 10^3$	$2.90 \cdot 10^4$	$3.83 \cdot 10^4$	$2.42 \cdot 10^4$
$T = 300$	$1.03 \cdot 10^{-3}$	26.90	$9.61 \cdot 10^3$	$3.19 \cdot 10^4$	$4.04 \cdot 10^4$	$2.52 \cdot 10^4$
	$3.5 \cdot 10^{-4}$	27.02	$9.62 \cdot 10^3$	$3.16 \cdot 10^4$	$4.04 \cdot 10^4$	-
$T = 310$	$1.28 \cdot 10^{-3}$	39.42	$1.11 \cdot 10^4$	$3.43 \cdot 10^4$	$4.27 \cdot 10^4$	$2.62 \cdot 10^4$
$T = 320$	$1.75 \cdot 10^{-3}$	56.41	$1.26 \cdot 10^4$	$3.71 \cdot 10^4$	$4.49 \cdot 10^4$	$2.73 \cdot 10^4$
$T = 330$	$2.61 \cdot 10^{-3}$	78.98	$1.43 \cdot 10^4$	$4.00 \cdot 10^4$	$4.72 \cdot 10^4$	$2.83 \cdot 10^4$

совпадающий с КМ-результатом [28] для теплового сдвига Штарка. Соответствующая удвоенная мнимая приводит к выражению для термоиндуцированной ширины уровня, см. [12, 28]:

$$\Gamma_a^{BBR} = \frac{4e^2}{3} \sum_n \omega_{na}^3 |\langle a|\mathbf{r}|n\rangle|^2 n_\beta(\omega_{na}), \quad (14)$$

где $\omega_{na} = |E_n - E_a|$.

В выражениях (9), (11), (12) энергии в знаменателях не учитывают КЭД-поправок, так как являются собственными значениями гамильтониана для электрона в кулоновском поле ядра. Учет КЭД-эффектов, в частности лэмбовского сдвига, может быть проведен феноменологически, т.е. добавлением соответствующих сдвигов в энергетических знаменателях, как это было сделано в [29]. В работе [12] было показано, что тот же результат можно получить в рамках строгой квантовоэлектродинамической процедуры, которая заключается в суммировании бесконечного ряда однопетлевых собственно-энергетических фейнмановских диаграмм со всевозможными последовательными вставками фотонных и поляризационных петель (петля за петлей)

во внутренние и внешние электронные линии. Возникающая в результате геометрическая прогрессия приводит к возникновению соответствующих сдвигов энергий в энергетическом знаменателе выражения (13) [21].

3. РАСЧЕТ СДВИГОВ И УШИРЕНИЙ ДЛЯ ns/nd -СОСТОЯНИЙ

Согласно результатам (13) и (14) равновесное тепловое излучение вызывает сдвиги энергетических уровней и переходы между различными уровнями ($a \rightarrow n$). В рамках КМ-подхода эти эффекты изучались подробно в [28, 30] для температуры $T = 300$ К. Позже в работе [29] аналогичные расчеты, но с учетом лэмбовского сдвига, проводились и для легких водородоподобных ионов. Строгий КЭД-подход к выводу тепловых поправок для связанных одноэлектронных систем с учетом радиационных поправок был представлен в работах [12, 13]. Стоит отметить, что в реальных лабораторных условиях температура может значительно варьироваться. Это прежде всего связано с трудностью контро-

Таблица 5. Значения уширений и штарковских сдвигов, полученные в [32] и в данной работе. Все значения приведены для температуры $T = 330$ К. Абсолютные значения относительной разницы для уширений $\delta\Gamma$ и сдвигов δE приведены в процентах

Переход	Сдвиг, Гц	Сдвиг [32], Гц	δE , %	Уширение, кГц	Уширение [32], кГц	$\delta\Gamma$, %
$2s - 6s$	-290.566(13)	-360(90)	19.3	1.66	1.2(0.1)	38.3
$2s - 6d$	-323.1(1)	-430(105)	24.6	2.3	1.7(0.2)	35.3
$2s - 8s$	606.1(0.4)	520(130)	16.6	5.1	4.4(0.4)	15.9
$2s - 8d$	755.071(19)	650(160)	16.2	6.4	5.5(0.5)	18.2
$2s - 12d$	2064.9(3.1)	2100(500)	1.7	7.5	7.1(0.7)	5.6

ля нагрева отдельных элементов в конкретной экспериментальной установке. Так, в работах [31, 32] по измерению частот переходов $2s - ns/nd$ магнитный экран, окружающий атомный пучок, нагревается примерно до 330 К. Ввиду отсутствия в литературе значений штарковских сдвигов для этой температуры авторы [31, 32] предположили, что уширение линии ведет себя линейно по температуре, а сдвиги ведут себя как $T^{2.7}$. Такая экстраполяция следует непосредственно из выражений (13) и (14) соответственно.

В табл. 1, 2 представлены результаты численных расчетов тепловых штарковских сдвигов для широкого диапазона температур, включая криогенную $T = 77$ для ns/nd -состояний. Соответствующие уширения линий (мнимая часть однопетлевой тепловой собственной энергии) также представлены в табл. 3, 4. Вычисления для тепловых штарковских сдвигов проводились по формуле (13) с суммированием по состояниям как дискретного, так и сплошного спектров. Матричные элементы переходов вычислялись аналитически с использованием известных решений уравнений Шредингера для электрона в кулоновском поле точечного ядра [33] (см. также [34]), что позволяет провести прямое суммирование по спектру промежуточных состояний в выражении (13). Следует также отметить, что расчет выражения (13) также может быть проведен с помощью нерелятивистской кулоновской функции Грина [35], метода В-сплайнов [36], гипервириальных соотношений [37] и с использованием динамических групп симметрии для атома водорода [38].

Численные значения для лэмбовского сдвига ns/nd -состояний брались из работы [39]. Важно отметить, что непосредственный учет состояний непрерывного спектра сказывается на величине сдвига на уровне одного процента, что находится в полном согласии с выводами работы [28], где он не учитывался. Учет лэмбовского сдвига и тонкого

расщепления приводит к изменениям того же порядка. Результаты расчетов показывают, что для температуры $T = 330$ К относительная разница для тепловых штарковских сдвигов между значениями из табл. 1, 2 и полученными в работе [32] достигает 19% и уменьшается с ростом главного квантового числа. Последнее говорит о том, что использованная в [32] экстраполяция верна лишь для сильно возбужденных состояний. Результаты сравнения полученных значений сдвигов и уширений для различных переходов $2s - ns/nd$ при $T = 330$ К со значениями из работы [32] представлены в табл. 5. Указанные в табл. 5 погрешности рассчитанных значений относятся только к точности численного интегрирования по частоте ω в выражении (13).

Важно отметить, что тепловые эффекты также учитывались в недавней работе по измерению частоты перехода $2s_{1/2} - 8d_{5/2}$ в атоме водорода [40]. Так, в [40] термоиндуцированный сдвиг измеряемой линии полагался равным $-0.49(16)$ кГц, что соответствует температуре 300 К. При этом, учитывая невозможность точно контролировать температурные параметры в эксперименте, авторы использовали значение погрешности из работы [32], рассчитанной при значении $T = 330$ К. Таким образом, непосредственный численный расчет, проведенный в нашей работе, значительно уточняет значения термоиндуцированных сдвигов энергий для высоковозбужденных состояний, что, в свою очередь, должно уменьшить погрешность определения частот в экспериментах типа [31, 32], необходимых для определения фундаментальных констант, в частности, постоянной Ридберга и зарядового радиуса протона.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке грантов Президента Российской Федерации (грант № МК-4796.2022.1.2) и Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 20-02-00111).

ЛИТЕРАТУРА

1. Y. Gnedin, A. Mihajlov, L. Ignjatović, N. Sakan, V. Srečković, M. Zakharov, N. Bezuglov, and A. Klycharev, *New Astron. Rev.* **53**, 259 (2009).
2. H. Bernien, S. Schwartz, A. Keesling, H. Levine, A. Omran, H. Pichler, S. Choi, A. Zibrov, M. Endres, M. Greiner, V. Vuletic, and M. Lukin, *Nature* **551**, 11 (2017).
3. B. Zelener, B. Zelener, and E. Zelener, *Energy* **2** (2018).
4. M. G. Kozlov, M. S. Safronova, J. R. Crespo López-Urrutia, and P. O. Schmidt, *Rev. Mod. Phys.* **90**, 045005 (2018).
5. T. L. Nicholson, S. L. Campbell, R. B. H. G. E. Marti, B. J. Bloom, R. L. McNally, W. Zhang, M. D. Barrett, M. S. Safronova, G. F. Strouse, W. L. Tew, and J. Ye, *Nature Commun.* **6**, 263004 (2015).
6. M. S. Safronova, D. Jiang, B. Arora, C. W. Clark, M. G. Kozlov, U. I. Safronova, and W. R. Johnson, *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Control* **57**, 94 (2010).
7. M. S. Safronova and et al., *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Control* **57**, 94 (2010).
8. M. S. Safronova, M. G. Kozlov, and C. W. Clark, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 143006 (2011).
9. W. M. Itano, L. L. Lewis, and D. J. Wineland, *Phys. Rev. A* **25**, 1233 (1982).
10. T. Middelmann, C. Lisdat, S. Falke, J. S. R. V. Winfred, F. Riehle, and U. Sterr, *Instrum. Measur. IEEE Trans.* **60**, 2550 (2011).
11. S. G. Porsev and A. Derevianko, *Phys. Rev. A* **74**, 020502(R) (2006).
12. D. Solov'yev, L. Labzowsky, and G. Plunien, *Phys. Rev. A* **92**, 022508 (2015).
13. D. Solov'yev, *Ann. Phys.* **415**, 168128 (2020).
14. D. Solov'yev, T. Zalialiutdinov, A. Anikin, J. Triaskin, and L. Labzowsky, *Phys. Rev. A* **100**, 012506 (2019).
15. D. Solov'yev, T. Zalialiutdinov, and A. Anikin, *Phys. Rev. A* **101**, 052501 (2020).
16. T. Zalialiutdinov, D. Solov'yev, and L. Labzowsky, *Phys. Rev. A* **101**, 052503 (2020).
17. T. Zalialiutdinov, A. Anikin, and D. Solov'yev, *Phys. Rev. A* **102**, 032204 (2020).
18. M. Gell-Mann and F. Low, *Phys. Rev.* **84**, 350 (1951).
19. F. Low, *Phys. Rev.* **88**, 53 (1952).
20. J. Sucher, *Phys. Rev.* **107**, 1448 (1957).
21. O. Y. Andreev, L. N. Labzowsky, G. Plunien, and D. A. Solov'yev, *Phys. Rep.* **455**, 135 (2008).
22. T. A. Zalialiutdinov, D. A. Solov'yev, L. N. Labzowsky, and G. Plunien, *Phys. Rep.* **737**, 1 (2018).
23. K. Beloy et al., *Phys. Rev. Lett.* **113**, 260801 (2014).
24. A. I. Akhiezer and V. B. Berestetskii, *Quantum Electrodynamics*, Wiley-Interscience, New York (1965).
25. L. Labzowsky, G. Klimchitskaya, and Y. Dmitriev, *Relativistic Effects in Spectra of Atomic Systems*, Institute of Phys. Publ., Bristol, Philadelphia (1993).
26. J. F. Donoghue, B. R. Holstein, and R. W. Robinett, *Ann. Phys.* **164**, 233 (1985).
27. J. F. Donoghue and B. R. Holstein, *Phys. Rev. D* **28**, 340 (1983).
28. J. W. Farley and W. H. Wing, *Phys. Rev. A* **23**, 2397 (1981).
29. U. D. Jentschura and M. Haas, *Phys. Rev. A* **78**, 042504 (2008).
30. T. F. Gallagher and W. E. Cooke, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 835 (1979).
31. C. Schwob, L. Jozefowski, B. de Beauvoir, L. Hilico, F. Nez, L. Julien, F. Biraben, O. Acef, J.-J. Zondy, and A. Clairon, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 4960 (1999).
32. B. Beauvoir, C. Schwob, O. Acef, L. Jozefowski, L. Hilico, F. Nez, L. Julien, A. Clairon, and F. Biraben, *Europ. Phys. J. D* **12**, 61 (2000).
33. W. Gordon, *Ann. Physik* **394**, 1031 (1929).
34. J. Chluba and R. A. Sunyaev, *Astron. Astrophys.* **512**, A53 (2010).

- 35.** N. Manakov, A. Maquet, S. Marmo, and C. Szymanowski, *Phys. Lett. A* **237**, 234 (1998).
- 36.** V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, V. A. Yerokhin, G. Plunien, and G. Soff, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 130405 (2004).
- 37.** C. Lai, *Phys. Lett. A* **83**, 322 (1981).
- 38.** S. P. Alliluev and I. A. Malkin, *Sov. Phys. JETP* **39**, 627 (1974).
- 39.** A. Czarnecki, U. D. Jentschura, and K. Pachucki, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 180404 (2005).
- 40.** A. D. Brandt, S. F. Cooper, C. Rasor, Z. Burkley, A. Matveev, and D. C. Yost, *Phys. Rev. Lett.* **128**, 023001 (2022).