

ЛОКАЛІЗОВАНІ СТАНИ ЕЛЕКТРОНА В ЕКРАНОВАНОМУ ПОЛІ: ТОЧНІ РОЗВ'ЯЗКИ Й НАБЛИЖЕНИЙ РОЗРАХУНОК ЕНЕРГЕТИЧНОГО СПЕКТРА

М. В. Ваврух, Н. Л. Тишко, О. М. Стельмах, Р. І. Коритко
*Львівський національний університет імені Івана Франка, кафедра астрофізики
вул. Кирила і Мефодія, 8, Львів, 79005, Україна*
(Отримано 08 лютого 2008 р.)

Одержано точні аналітичні розв'язки рівняння Шредингера, що описує зв'язані стани електрона в полі екранованого заряду, у вигляді інтегралів безмежної кратності за параметром $0 \leq t \leq 1$ від елементарних функцій. Розроблено методику використання розв'язків для наближеного розрахунку спектра, хвильових функцій та порогових значень параметра екранування. Аналітичними та числовими методами досліджено залежність енергетичного спектра від параметра екранування.

Ключові слова: потенціал Дебая–Юкави, зв'язані стани, спектр, радіальні хвильові функції, граничні значення параметра екранування.

PACS number(s): 05.30.Fk

I. ВСТУП

Рівнянню Шредингера, що описує рух мікрочастинки в екранованому полі з потенціалом $V(\mathbf{r}) = -\frac{\alpha}{r}e^{-\beta r}$, присвячено багато праць. Інтерес до цієї задачі зумовлений передусім важливим значенням застосувань у статистичній фізиці частково йонізованих систем (квантова плазма, домішки в напівпровідниках і металах, де використовують потенціал Дебая–Гюккеля), у задачах ядерної фізики, в яких короткосяжні взаємодії моделюють потенціалом Юкави або потенціалом Гюльтена, а також у теорії багатоелектронних атомів та розсіяння, в теорії термоядерного синтезу, в астрофізиці та ін. [1–4]. Задача про опис квантових станів мікрочастинки в екранованому полі має також самостійне значення, оскільки у квантовій механіці відомо небагато реалістичних потенціалів, що допускають точні або майже точні розв'язки [5].

У ранніх працях [6–12], присвячених дослідженню рівняння Шредингера з екранованим потенціалом, використовували теорію збурень та варіаційний підхід для розрахунку спектра енергетичних рівнів. Розвиток обчислювальної техніки дав змогу одержати спектр енергетичних рівнів частинки в екранованому полі шляхом чисельного розрахунку радіального рівняння Шредингера. Так, у праці [13] знайдено спектр енергетичних рівнів для $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d$ -станів для потенціалів, подібних до екранованого. У статті [14] обчислено спектр для значно більшої кількості рівнів електрона в полі екранованого потенціалу та критичні значення параметра екранування, при яких рівень $E_{n,l}$ переходить у неперервний спектр. Задача про рух мікрочастинки в полі з екранованим потенціалом, а також зі складнішими потенціалами такого типу актуальні й тепер. Наближені розв'язки рівняння Шредингера для частково екранованого потенціалу $V(r) = -\frac{\alpha}{r}\{1 + (1 + br)e^{-\beta r}\}$, що відповідають станам $1s, 2s, 3s$, знайдено у праці [15]. У роботах [16, 17] розглянуто рівняння Шредингера з потенціалом

Гюльтена $V(r) = -\alpha e^{-\beta r}[1 - e^{-\gamma r}]^{-1}$. Знаходженню s -спектра енергетичних рівнів для лінійно зростаючого потенціалу разом із потенціалом Юкави присвячена праця [18]. Формалізм суперсиметричного квантовомеханічного підходу в поєднанні з варіаційним методом застосовано в роботі [19], де чисельно розраховано спектр рівнів, яким відповідають безвузлові радіальні функції ($1s, 2p, 3d, 4f$) для звичайного екранованого потенціалу.

На жаль, нам не відомі праці, присвячені знаходженню строгих аналітичних розв'язків рівняння Шредингера з екранованим потенціалом без використання теорії збурень або варіаційного методу. У статті одного з авторів [20] одержано аналітичні розв'язки рівняння Шредингера із загальним потенціалом $V(r) = -\frac{\alpha}{r}f(r)$, де $f(r)$ є цілою функцією змінної r і має асимптотику $f(r) \rightarrow 1$ при $r \rightarrow 0$, $f(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$. Для радіальної функції використано розклад за степенями r з наступним підсумовуванням безмежних рядів шляхом використання перетворення Лапласа. Як приклад розглянуто екранований потенціал. Однак складні багаточленні рекурентні співвідношення ускладнюють практичні розрахунки спектра і хвильових функцій. Ідея знаходження точних розв'язків рівняння Шредингера з екранованим потенціалом запропонована у праці [21], однак відсутність потужних вичислювальних засобів не дала змоги реалізувати на ту пору запроповану ідею повною мірою.

II. АНАЛІТИЧНІ РОЗВ'ЯЗКИ РАДІАЛЬНОГО РІВНЯННЯ ШРЕДИНГЕРА

Метою цієї праці є розрахунок енергетичних рівнів та хвильових функцій зв'язаних станів електрона в полі екранованого заряду

$$V(\mathbf{r}) = -z \frac{e^2}{r} e^{-\alpha r}. \quad (1)$$

Переходячи до безрозмірних величин $\rho = za_0^{-1}\mathbf{r}$, $\xi = z^{-1}ae a_0$, $\varepsilon = 2ma_0^2\hbar^{-2}z^{-2}E$ ($a_0 = \hbar^2m^{-1}e^{-2}$ — радіус Бора, E — енергія електрона, $E < 0$), запишімо рівняння Шредингера в безрозмірній формі:

$$\{-\nabla_{\rho}^2 - \varepsilon\} \Psi_{\varepsilon}(\rho) = \frac{2}{\rho} e^{-\xi\rho} \Psi_{\varepsilon}(\rho). \quad (2)$$

Уведемо функцію Гріна, яка задовольняє рівняння

$$(-\nabla_{\rho}^2 - \varepsilon)G_{\varepsilon}(\rho - \rho') = \delta(\rho - \rho'). \quad (3)$$

Застосувавши для $G_{\varepsilon}(\rho - \rho')$ розклад Фур'є

$$G_{\varepsilon}(\rho - \rho') = \int G_{\varepsilon}(\mathbf{q})e^{i(\mathbf{q},\rho-\rho')} \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3}, \quad (4)$$

знаходимо, що $G_{\varepsilon}(\mathbf{q}) = \{\mathbf{q}^2 - \varepsilon\}^{-1}$, а

$$G_{\varepsilon}(\rho - \rho') = \{4\pi|\rho - \rho'|\}^{-1} \exp\{-\sqrt{-\varepsilon}|\rho - \rho'|\}. \quad (5)$$

Функція Гріна дозволяє звести рівняння (2) до такого лінійного однорідного інтегрального рівняння:

$$\Psi_{\varepsilon}(\rho) = 2 \int d\rho' \frac{e^{-\xi\rho'}}{\rho'} \Psi_{\varepsilon}(\rho') G_{\varepsilon}(\rho - \rho'). \quad (6)$$

На відміну від теорії розсіяння, неоднорідний складник у цьому рівнянні відсутній, адже локалізованого розв'язку рівняння (2) без правої частини немає.

Унаслідок переходу до сферичної системи координат, у якій $\Psi_{\varepsilon}(\rho) = R_l(\rho)Y_{l,m}(\theta, \varphi)$, і стандартної підстановки для радіальної функції $R_l(\rho) =$

$\rho^l \omega_l(\rho) \exp(-\sqrt{-\varepsilon}\rho)$ [5] зведемо рівняння (6) до одновимірного інтегрального рівняння для функції $\omega_l(\rho)$, а саме:

$$\omega_l(\rho) = \int_0^{\infty} d\rho' e^{-\xi\rho'} g_l(\rho, \rho') \omega_l(\rho'). \quad (7)$$

Тут $g_l(\rho, \rho')$ — радіальна функція Гріна — визначена так:

$$g_l(\rho, \rho') = 2\rho^{-l}(\rho')^{l+1} e^{\sqrt{-\varepsilon}(\rho-\rho')}(2l+1)^{-1} \times \sum_{m=-l}^l \int \int d\varphi d\varphi' d\theta \times \sin\theta d\theta' \sin\theta' Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta', \varphi') G_{\varepsilon}(\rho - \rho'). \quad (8)$$

Використаймо теорему додавання сферичних функцій [22]

$$\sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta', \varphi') = \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos\gamma), \quad (9)$$

де $P_l(\cos\gamma)$ — поліном Лежандра, а γ — кут між векторами ρ і ρ' ($\cos\gamma = [\rho\rho']^{-1}(\rho, \rho')$). Наступний розрахунок $g_l(\rho, \rho')$ зводиться до обчислення однократного інтеграла

$$\int_{-1}^{+1} dt P_l(t) [\rho^2 + (\rho')^2 - 2\rho\rho't]^{-1/2} \exp\{-\sqrt{-\varepsilon}[\rho^2 + (\rho')^2 - 2\rho\rho't]^{1/2}\}, \quad (10)$$

що в результаті дає таке зображення радіальної функції Гріна:

$$g_l(\rho, \rho') = 2 \left[\frac{\rho'}{\rho} \right]^{l+1/2} e^{\sqrt{-\varepsilon}(\rho-\rho')} \begin{cases} K_{l+1/2}(\sqrt{-\varepsilon}\rho) I_{l+1/2}(\sqrt{-\varepsilon}\rho') & \text{при } \rho > \rho'; \\ I_{l+1/2}(\sqrt{-\varepsilon}\rho) K_{l+1/2}(\sqrt{-\varepsilon}\rho') & \text{при } \rho < \rho'. \end{cases} \quad (11)$$

Тут фігурують так звані циліндричні функції уявного аргумента, індекс яких дорівнює цілому числу плюс одна друга [22]:

$$K_{l+1/2}(z) = \left(\frac{\pi}{2z} \right)^{1/2} e^{-z} \beta_l(z); \quad (12)$$

$$I_{l+1/2}(z) = (2\pi z)^{-1/2} \{e^z \beta_l(-z) - (-1)^l e^{-z} \beta_l(z)\};$$

$$\beta_l(z) = \sum_{k=0}^l \frac{(l+k)!}{k!(l-k)!} (2z)^{-k}.$$

Розв'язки рівняння (7) знайдемо методом ітерацій, використовуючи в ролі нульового наближення функцію $\omega_l^{(0)}(\rho')$ для кулонівської задачі.

$k \backslash l$	0	1	2	3	радіальні функції
0	1s	2p	3d	4f	безвузлові
1	2s	3p	4d	5f	одновузлові
2	3s	4p	5d	6f	двовузлові
3	4s	5p	6d	7f	тривузлові

Таблиця 1.

Як відомо, радіальний множник хвильової функції визначається двома квантовими числами, а саме, n та l . Оскільки $n = l + 1 + k$, де k — радіальне квантове число, яке задає число вузлів радіальної функції при $\rho \neq 0$, то для нумерації квантових станів зручно використовувати квантові числа l

та k : при заданому l рівняння (7) має сім'ю розв'язків, які відрізняються числом вузлів. Надалі для радіальної функції будемо використовувати позначення $R_{l,k} = \rho^l \omega_{l,k}(\rho) e^{\sqrt{-\varepsilon_{l,k}} \rho}$. Відповідність між прийнятою тут класифікацією станів та звичайною спектроскопічною видно з таблиці 1. Насамперед розгляньмо безвузлові функції $R_{l,0}(\rho)$, що відповідають станам $1s, 2p, 3d, \dots$, а далі — функції з декількома вузлами. Така класифікація вибрана з міркувань зручності розв'язування рівняння (7) методом послідовних наближень. У кулонівському випадку $\omega_{l,k}(\rho) \in$ поліном порядку k , а $\sqrt{-\varepsilon_{l,k}} = (l+1+k)^{-1}$. Таку асимп-

тотику повинні мати розв'язки рівняння (7) та відповідні їм енергетичні рівні у границі $\xi \rightarrow 0$.

III. БЕЗВУЗЛОВІ РАДІАЛЬНІ ФУНКЦІЇ

Для зручності та прозорості викладу розгляньмо насамперед безвузлові розв'язки рівняння (7), застосувавши метод послідовних наближень, а в ролі нульової ітерації виберемо відповідну функцію кулонівської задачі $\omega_{l,0}^{(0)}(\rho) = 1$. Підставляючи її у праву частину рівняння (7), одержуємо перше наближення,

$$\begin{aligned} \omega_{l,0}^{(1)}(\rho) = & 2e^{\sqrt{-\varepsilon_l} \rho} \rho^{-(l+1/2)} K_{l+1/2}(\sqrt{-\varepsilon_l} \rho) \int_0^\rho dx x^{l+1/2} e^{-x(\xi + \sqrt{-\varepsilon_l})} I_{l+1/2}(\sqrt{-\varepsilon_l} x) \\ & + 2e^{\sqrt{-\varepsilon_l} \rho} \rho^{-(l+1/2)} I_{l+1/2}(\sqrt{-\varepsilon_l} \rho) \int_\rho^\infty dx x^{l+1/2} e^{-x(\xi + \sqrt{-\varepsilon_l})} K_{l+1/2}(\sqrt{-\varepsilon_l} x), \end{aligned} \quad (13)$$

де $\varepsilon_l \equiv \varepsilon_{l,0}$. Для ілюстрації наведемо тут вирази для перших двох членів цієї послідовності ($l = 0, 1$):

$$\omega_{0,0}^{(1)}(\rho) = 2(\xi + 2\sqrt{-\varepsilon_0})^{-1} (\xi \rho)^{-1} \{1 - e^{-\xi \rho}\}; \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \omega_{1,0}^{(1)}(\rho) = & 2(\xi + 2\sqrt{-\varepsilon_1})^{-2} \xi^{-2} \rho^{-3} \\ & \times \{2(1 + \sqrt{-\varepsilon_1} \rho) [1 - e^{-\xi \rho} (1 + \xi \rho)] - \xi^2 \rho^2 e^{-\xi \rho}\}. \end{aligned}$$

Оскільки у границі $\xi \rightarrow 0$ функції $\omega_{l,0}^{(1)}(\rho)$ прямують до значення $[(l+1)\sqrt{-\varepsilon_l}]^{-1}$, переконаємося, що $\omega_{l,0}^{(1)}(\rho) = 1$ справді є розв'язками рівняння (7) для кулонівської задачі зі спектром $\sqrt{-\varepsilon_l} = (l+1)^{-1}$. Основна ідея цієї роботи полягає в тому, щоб для функцій $\omega_{l,0}^{(1)}(\rho)$ використати інтегральне зображення, подібне до перетворення Лапласа:

$$\begin{aligned} \omega_{l,0}^{(1)}(\rho) = & \int_0^1 dt F_l(t|\xi) e^{-\xi \rho t}, \quad (15) \\ F_l(t|\xi) = & 2(\xi + 2\sqrt{-\varepsilon_l})^{-l-1} t^l \{2\sqrt{-\varepsilon_l} + \xi t\}^l. \end{aligned}$$

Тоді розрахунок другого наближення виконуємо аналогічно до розрахунку $\omega_{l,0}^{(1)}(\rho)$, унаслідок чого одержуємо $\omega_{l,0}^{(2)}(\rho)$ у вигляді компактного двократного інтеграла за параметром:

$$\begin{aligned} \omega_{l,0}^{(2)}(\rho) = & \int_0^1 dt_1 F_l(t_1|\xi) \int_0^1 dt_2 F_l(t_2|\xi + \xi t_1) \quad (16) \\ & \times \exp\{-t_2 \rho \xi [1 + t_1]\}. \end{aligned}$$

Продовжуючи ітераційний процес, отримуємо зображення розв'язку рівняння (7) у вигляді безмежнократного інтеграла за параметром:

$$\begin{aligned} \omega_{l,0}(\rho) = & \lim_{s \rightarrow \infty} \int_0^1 dt_1 F_l(t_1|\xi) \int_0^1 dt_2 F_l(t_2|\xi + \xi t_1) \\ & \times \int_0^1 dt_3 F_l(t_3|\xi + \xi t_2 + \xi t_2 t_1) \times \dots \times \int_0^1 dt_s F_l(t_s|\xi + \xi t_{s-1} + \dots + \xi t_{s-1} \dots t_1) \\ & \times \exp\{-t_s \rho \xi [1 + t_{s-1} + t_{s-1} t_{s-2} + \dots + t_{s-1} \dots t_1]\}. \end{aligned}$$

Оскільки при $\rho \rightarrow 0$ екранований потенціал прямує до кулонівського, маємо природну граничну умову $\omega_{l,0}(0) = 1$, яка визначає енергетичні рівні електрона в полі екранованого заряду для квантових станів із безвузловими радіальними функціями. Рівняння

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \int_0^1 dt_1 F_l(t_1|\xi) \int_0^1 dt_2 F_l(t_2|\xi + \xi t_1) \times \dots \times \int_0^1 dt_s F_l(t_s|\xi + \dots + \xi t_{s-1} \dots t_1) = 1 \quad (17)$$

є розгорнутою формою запису цієї умови. Неважко бачити, що при $\xi = 0$ спектр рівнів є кулонівським ($\sqrt{-\varepsilon_l} = [1+l]^{-1}$). Порогове значення параметра екранування $\xi_{l,0}$, при якому енергетичний рівень переходить у неперервний спектр, визначається рівнянням (18), у якому слід покласти $\sqrt{-\varepsilon_l} = 0$:

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \left[\frac{2}{\xi_{l,0}} \right]^s \int_0^1 \frac{dt_1 t_1^{2l}}{1+t_1} \int_0^1 \frac{dt_2 t_2^{2l}}{1+t_2+t_2 t_1} \int_0^1 \dots \int_0^1 \frac{dt_{s-1} t_{s-1}^{2l}}{1+t_{s-1}+\dots+t_{s-1} \dots t_1} \int_0^1 dt_s t_s^{2l} = 1. \quad (18)$$

Одержане рівняння цілком відрізняється від умови, знайденої для $l = 0$ у праці [23], а також для довільних l у статті [20].

Вирази (17)–(19) є точними. Їх можна використовувати для наближеного розрахунку спектру та хвильових функцій при скінченних значеннях s . Щобільше, навіть порогові значення параметра екранування $\xi_{l,0}$ можна обчислити, користуючись інтегралами скінченної кратності у формулі (19). Це видно з таблиці 2, у якій наведено значення $\xi_{0,0}$, $\xi_{1,0}$ та $\xi_{2,0}$, розраховані за цією формулою при $1 \leq s \leq 12$ (заданому s відповідає $\xi_{l,0}^{(s)}$). Величини $\xi_{l,0}^{(s)}$ утворюють монотонно спадну послідовність, яка збігається до значення $\xi_{l,0}$, а 5-відсоткова точність забезпечується при $s = 12$.

s	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	12
$\xi_{0,0}^{(s)}$	2.0	1.66511	1.51135	1.42836	1.37823	1.34523	1.32201	1.30484	1.29162	1.28115	1.26560
$\xi_{1,0}^{(s)}$	0.66667	0.50747	0.42564	0.37667	0.34471	0.32262	0.30667	0.29476	0.28560	0.27256	0.26779
$\xi_{2,0}^{(s)}$	0.29640	0.24195	0.20849	0.18601	0.16700	0.15813	0.14906	0.14196	0.13628	0.13167	

Таблиця 2. Залежність $\xi_{0,0}^{(s)}$, та $\xi_{1,0}^{(s)}$ та $\xi_{2,0}^{(s)}$ від s .

Тут необхідно розраховувати чисельно інтеграли високої кратності, але слід узяти до уваги, що ми маємо справу з “найгіршим” випадком — адже нульове наближення для $\omega_{l,0}(\rho)$ відповідає ситуації з потенціалом Кулона, а розглядаємо випадок, коли відповідний енергетичний рівень зникає взагалі.

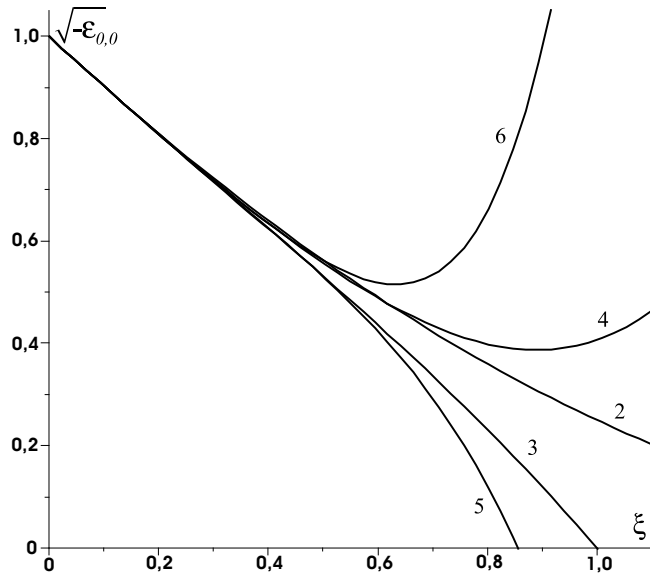
Є декілька шляхів використання виразів (17)–(19). Зі співвідношень (17)–(18) можна одержати вирази

для хвильової функції та енергії у вигляді розкладів за параметром екранування ξ , що відповідає теорії збурень за різницею між екранованим потенціалом і кулонівським. Розкладаючи функції $F_l(t|\xi)$ за степенями ξ , виконуючи елементарне інтегрування за параметром t і підсумовуючи безмежні числові ряди типу геометричної прогресії, з рівняння (18) знаходимо такі розклади для $\sqrt{-\varepsilon_{l,0}}$:

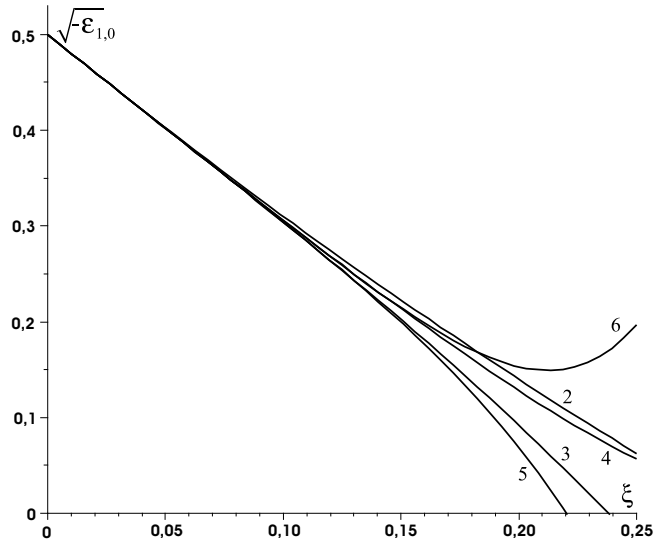
$$\begin{aligned} \sqrt{-\varepsilon_{0,0}} &= 1 - \xi + \frac{1}{4}\xi^2 - \frac{1}{4}\xi^3 + \frac{13}{32}\xi^4 - \frac{27}{32}\xi^5 + \frac{785}{384}\xi^6 + \dots; \\ \sqrt{-\varepsilon_{1,0}} &= \frac{1}{2} - 2\xi + \xi^2 - 6\xi^3 + \frac{45}{2}\xi^4 - 186\xi^5 + \frac{3956}{3}\xi^6 + \dots; \\ \sqrt{-\varepsilon_{2,0}} &= \frac{1}{3} - 3\xi + \frac{9}{4}\xi^2 - \frac{171}{4}\xi^3 + \frac{7857}{32}\xi^4 - \frac{171801}{32}\xi^5 + \frac{8738037}{128}\xi^6 + \dots \end{aligned} \quad (19)$$

тощо. Рисунки 1а–1в ілюструють цю залежність. Крива з номером r відповідає наближенню $\sqrt{-\varepsilon_{l,0}} = \frac{1}{l+1} + \xi\alpha_1 + \xi^2\alpha_2 + \dots + \xi^r\alpha_r$. Як видно з рисунків, розклади (20) збігаються в області $0 < \xi \leq \frac{1}{2}\xi_{l,0}$, де $\xi_{l,0}$ близьке до $(l+1)^{-2}$. Ряди (20) є асимптотичними.

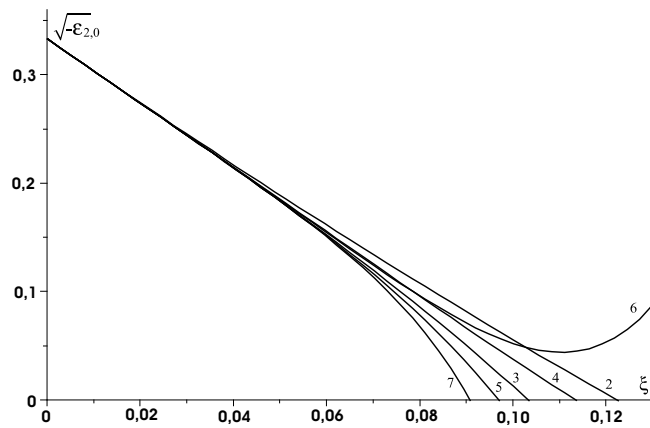
Якщо обмежитися невеликим числом членів розкладу, то вони дають непоганий опис залежності енергії від параметра екранування, особливо при $l \neq 0$, що видно з рисунків 1а–1в (наближення ξ^3 при $l = 0$, ξ^5 при $l = 1$, ξ^7 при $l = 2$).



а)



б)



в)

Рис. 1. а). Залежність $\sqrt{-\varepsilon_{0,0}}$ від параметра екранування ξ відповідно до формули (20). Крива з номером r відповідає наближенню ξ^r ; б). Залежність $\sqrt{-\varepsilon_{1,0}}$ від параметра екранування. Позначення ті самі, що й на рис. 1а); в). Залежність $\sqrt{-\varepsilon_{2,0}}$ від параметра екранування згідно з формулою (20). Позначення ті ж, що й на рис. 1а).

Інша можливість полягає у використанні результатів розрахунку при $1 \leq s \leq s_0$. Оскільки $\xi_{l,0}^{(s)}$ та $\sqrt{-\varepsilon_{l,0}^{(s)}}$ є монотонними функціями параметра s , можна виконати екстраполяцію результатів на область $s_0 \leq s < \infty$. Покажемо це на прикладі таблиці 2. Застосуємо апроксимацію наведених там результатів формулами з трьома невідомими параметрами:

$$\xi_{0,0}^{(s)} = c_{l,0}^{(0)} + \frac{c_{l,0}^{(1)}}{s} + \frac{c_{l,0}^{(2)}}{s^2}.$$

Використовуючи дані таблиці 2, коефіцієнти $c_{l,0}^{(i)}$ ми знайшли за методом найменших квадратів. Екстраполяція цих виразів на область великих значень s дає такі порогові значення параметрів екранування: $\xi_{0,0} = 1.1906$, $\xi_{1,0} = 0.2157$, $\xi_{2,0} = 0.0860$. Ці значення дуже близькі до знайдених при чисельному розв'язуванні рівняння Шредингера у праці [14].

IV. САМОУЗГОДЖЕНА ФАКТОРИЗАЦІЯ БАГАТОКРАТНИХ ІНТЕГРАЛІВ: "ОДНОПАРАМЕТРИЧНЕ НАБЛИЖЕННЯ"

Ще одна можливість пов'язана з наближеною факторизацією безмежнократних інтегралів. Беручи до уваги, що співвідношення (17)–(19) є точними лише при $s \rightarrow \infty$, можна виконати наближену факторизацію багатократних інтегралів у них. Справді, у рівнянні (18) суттєвими є інтеграли за параметром t_j при $j \gg 1$. Тому ліву частину рівняння (18) наближено можна зобразити як однократний інтеграл у степені s , замінюючи в ньому "чужі" змінні t деяким середнім значенням $\tau_{l,0}(\xi)$ і розраховуючи його самоузгодженим чином. У такому наближенні спектр визначається рівнянням

$$\int_0^1 dt \beta_{l,0}^{(1)}(t|z_l^{(1)}(\xi)) = 1, \quad (20)$$

де

$$\beta_{l,0}^{(1)}(t|z_l^{(1)}(\xi)) = 2t^l \{2\sqrt{-\varepsilon_l} + \xi(1 + tz_l^{(1)}(\xi))\}^{-1} \times \{2\sqrt{-\varepsilon_l} + \xi tz_l^{(1)}(\xi)\}^l \{2\sqrt{-\varepsilon_l} + \xi z_l^{(1)}(\xi)\}^{-l}; \quad (21)$$

$l \geq 0, \quad \varepsilon_l \equiv \varepsilon_l,$

а параметр $\tau_{l,0}(\xi)$ — рівнянням самоузгодження

$$\tau_{l,0}(\xi) = \int_0^1 dt t \beta_{l,0}^{(1)}(t|z_l^{(1)}(\xi)). \quad (22)$$

Для спрощення запису тут уведено позначення

$$z_l^{(1)}(\xi) = z_l^{(1)}(\xi) = \{1 - \tau_{l,0}(\xi)\}^{-1}. \quad (23)$$

Інтегруючи за змінною t у формулі (23) і враховуючи співвідношення (21), одержуємо рівняння $(l+1)$ -го степеня для $z_l(\xi)$:

$$\left[z_l^{(1)}(\xi) \right]^{(l+1)} + \sum_{i=0}^l \left[z_l^{(1)}(\xi) \right]^i \alpha_l^{l-i} \{ \alpha_l c_{l+1}^i - 2\xi^{-1} c_l^i (l+i+1)^{-1} \} = 0, \quad (24)$$

у якому $\alpha_l = 2\xi^{-1}(-\varepsilon_l)^{1/2}$, $c_s^m = s! [m!(s-m)!]^{-1}$. Фізичний зміст має дійсний додатний корінь цього рівняння:

$$z_0^{(1)}(\xi) = 2\xi^{-1} \{1 - \sqrt{-\varepsilon_0}\},$$

$$z_1^{(1)}(\xi) = (3\xi)^{-1} \left\{ 1 - 6\sqrt{-\varepsilon_1} + (1 + 6\sqrt{-\varepsilon_1})^{1/2} \right\}, \quad (25)$$

$$z_2^{(1)}(\xi) = (15\xi)^{-1} \left\{ 2 - 30x_2 + [A(x_2)]^{1/3} + (4 + 30x_2)[A(x_2)]^{-1/3} \right\},$$

де

$$A(x_2) = 450x_2^2 + 90x_2 + 8 + 30\{60x_2^3 + 5x_2^2 + 225x_2^4\}^{1/2}, \quad (26)$$

$x_2 = (-\varepsilon_2)^{1/2}$. Зі співвідношень (26) випливає доцільність підстановки

$$z_l^{(1)}(\xi) = 2\xi^{-1} y_l(x_l), \quad x_l = (-\varepsilon_l)^{1/2}. \quad (27)$$

У рівнянні для $y_l(x_l)$ параметр ξ не фігурує:

$$y_l^{l+1}(x_l) + \sum_{i=0}^l y_l^i(x_l) x_l^{l-i} \{ x_l c_{l+1}^i - c_l^i (l+i+1)^{-1} \} = 0. \quad (28)$$

Ураховуючи аналітичні розв'язки (26) та розв'язуючи рівняння (29) чисельно при $l \geq 3$, ми встановили, що при довільному значенні l існує лише один дійсний додатний корінь рівнянь (25), (29) на інтервалі $0 \leq x_l \leq (l+1)^{-1}$, а $y_l(x_l)$ має такі граничні значення:

$$y_l(0) = (2l+1)^{-1}, \quad y_l([l+1]^{-1}) = 0. \quad (29)$$

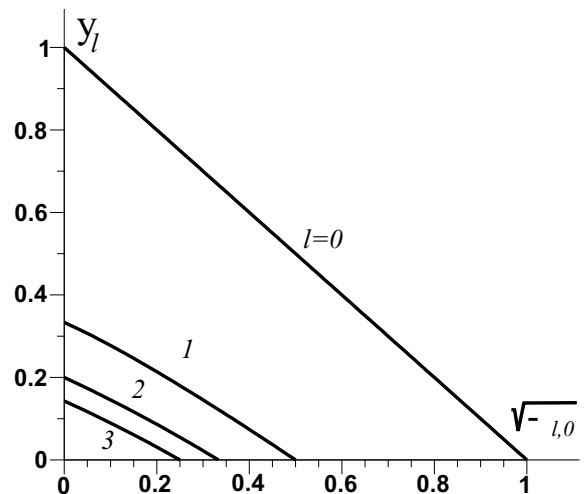


Рис. 2. Енергетична залежність параметра y_l в "однопараметричному" наближенні.

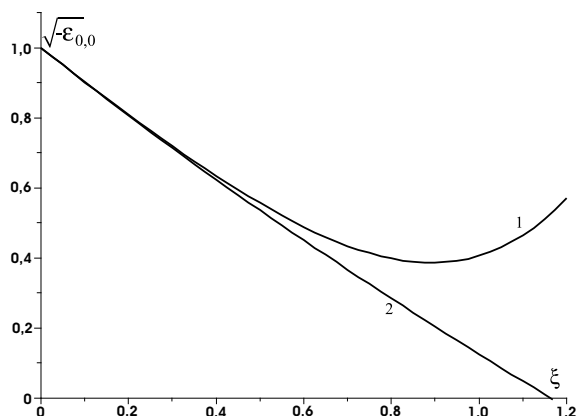


Рис. 3. Залежність $\sqrt{-\varepsilon_{0,0}}$ від параметра екранування. Крива 1 відповідає формулі (20) з точністю до ξ^4 , крива 2 — розв’язкам рівняння (32) (див. формулу (34)).

Розв’язки рівняння (29) зображені на рисунку 2. Вони є майже лінійними функціями змінної x_l і при $l \geq 3$ можуть бути апроксимовані виразом

$$y_l(x) \cong (2l + 1)^{-1} \times \{1 - (l + 1)x_l + \alpha_l - \alpha_l[1 - 2x_l(l + 1)]^2\}. \quad (30)$$

При цьому $\alpha_3 = 0.0042$, $\alpha_4 = 0.0025$ і т. д. Підставляючи знайдене $z_{l,0}^{(1)}(\xi)$ у рівняння (21), одержуємо алгебраїчне рівняння, яке визначає залежність $(-\varepsilon_l)^{1/2}$ від параметра екранування. Як приклад розгляньмо основний стан ($l = 0$), енергія якого визначається рівнянням

$$\sqrt{-\varepsilon_{0,0}} = \left(1 + \frac{\xi}{2}\right) \exp\{\sqrt{-\varepsilon_{0,0}} - 1\} - \frac{\xi}{2}. \quad (31)$$

Покладаючи $\sqrt{-\varepsilon_{0,0}} = 0$, знаходимо порогове значення параметра екранування, при якому відсутній дискретний спектр:

$$\xi_{0,0}^{(1)} = 2(e - 1)^{-1} \simeq 1.16395\dots \quad (32)$$

Це число на 2.5% відрізняється від “точного” значення 1.1906, знайденого у праці [14] шляхом чисельного інтегрування рівняння Шредингера. Розв’язок рівняння (31) з високою точністю можна записати такими двома еквівалентними розкладами:

$$\sqrt{-\varepsilon_{0,0}} = 1 + \sum_{i=1}^6 (-1)^i \alpha_i \xi^i, \quad (33)$$

$$\sqrt{-\varepsilon_{0,0}} = \sum_{i=1}^6 \delta_i \left[\xi_{0,0}^{(1)} - \xi\right]^i.$$

При цьому $\alpha_1 = 1$, $\alpha_2 = 1/6$, $\alpha_3 = 1/18$, $\alpha_4 = 11/540$, $\alpha_5 = 13/1620$, $\alpha_6 = 5/1512$; $\delta_1 = (e - 1)^2 [2e(e - 2)]^{-1} = 0.7560829\dots$, $\delta_2 = (3 - e)(e - 1)^3 [8e^2(e - 2)^3]^{-1} = 0.0652431\dots$, $\delta_3 = 0.014487\dots$, $\delta_4 = 0.003354\dots$, $\delta_5 = 0.0008398\dots$,

$\delta_6 = 0.0001979\dots$. Легко переконатися, що рівняння (31) має ще й “тривіальний” розв’язок $\sqrt{-\varepsilon_0} = 1$, а взагалі при довільних значеннях l існують розв’язки $\sqrt{-\varepsilon_l} = (l + 1)^{-1}$ при будь-яких значеннях ξ , так що $\xi = 0$ є точкою біфуркації. Ми не будемо брати до уваги розв’язки такого типу, оскільки вони відповідають $z_{l,0}^{(1)}(\xi) = 0$, що не має фізичного змісту за означенням.

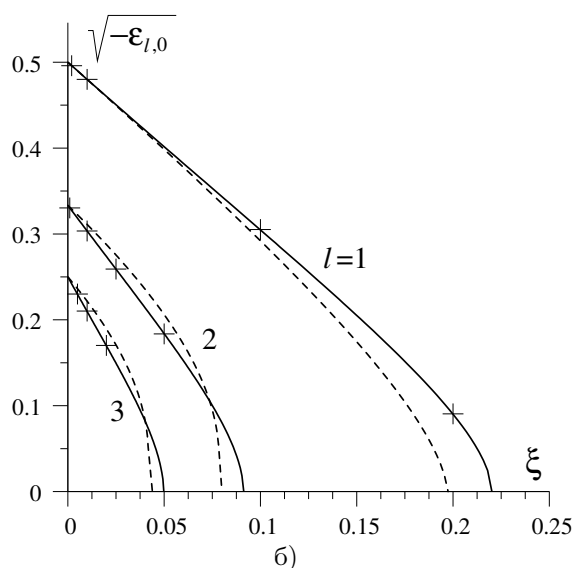
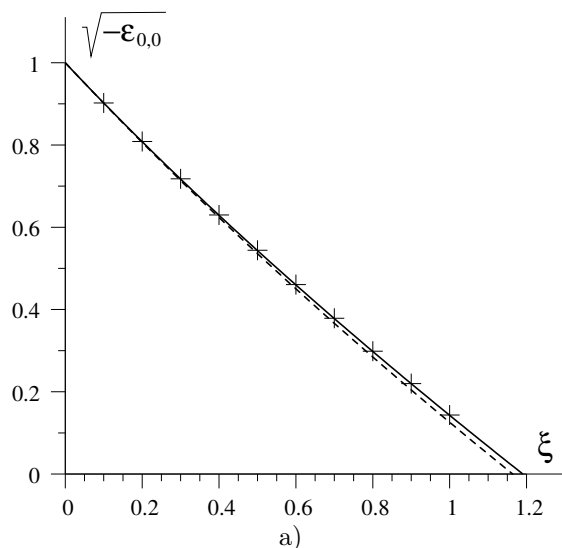


Рис. 4. Залежність $\sqrt{-\varepsilon_{l,0}}$ від параметра екранування для станів $1s, 2p, 3d, 4f$. Пунктирні криві відповідають “однопараметричному” наближенню, суцільні криві — “5-параметричному”. Хрестики відповідають результатам чисельного розрахунку праці [14].

На рисунку 3 зображено залежність $\sqrt{-\varepsilon_{0,0}}$ від параметра екранування: крива 1 відповідає теорії збурень у наближенні ξ^4 (див. ф. (20)), а крива 2 — розкладам (33).

В “однопараметричному” наближенні функція $\omega_{0,0}(\rho)$ має таке зображення:

$$\omega_{0,0}(\rho) = 2 \int_0^1 dt \{2\sqrt{-\varepsilon_0} + \xi z_0^{(1)}(\xi)\}^{-1} \exp\{-\rho \xi t z_0^{(1)}(\xi)\} = \omega_{0,0}(\rho) \simeq \{2\rho[1 - \sqrt{-\varepsilon_{0,0}}]\}^{-1} \times \{1 - \exp[-2\rho(1 - \sqrt{-\varepsilon_{0,0}})]\}. \quad (34)$$

Як впливає з результатів чисельного розрахунку, $\sqrt{-\varepsilon_l}$ є майже лінійною функцією параметра екранування ξ , яка на інтервалі $0 \leq \xi \leq \xi_l^{(1)}$ змінюється від $(l+1)^{-1}$ до нуля (див. рис. 4; пунктирні криві).

V. “БАГАТОПАРАМЕТРИЧНЕ” НАБЛИЖЕННЯ: РОЗРАХУНОК ПОРОГОВИХ ЗНАЧЕНЬ $\xi_{l,0}$ ТА ЕНЕРГЕТИЧНОГО СПЕКТРА

Формули (20)–(23) є “однопараметричним” самоузгодженим наближенням, вони побудовані на інтегралах за одним параметром t . Точніші результати одержуємо, якщо s -кратний інтеграл (17) наближено зобразити як двократний інтеграл у степені $s/2$ або трикратний інтеграл у степені $s/3$ і т.д. В “ m -параметричному” наближенні аналогом співвідношень (20)–(23) є така система рівнянь ($m = 1, 2, 3, \dots$):

$$\begin{cases} 1 = \int_0^1 dt_1 \int_0^1 dt_2 \int_0^1 \dots \int_0^1 dt_m \Gamma_{l,0}^{(m)}(t_1, t_2, \dots, t_m | z_l^{(m)}(\xi)), \\ 1 - [z_l^{(m)}(\xi)]^{-1} = \int_0^1 dt_1 t_1 \int_0^1 dt_2 \int_0^1 \dots \int_0^1 dt_m \Gamma_{l,0}^{(m)}(t_1, t_2, \dots, t_m | z_l^{(m)}(\xi)). \end{cases} \quad (35)$$

При цьому $z_l^{(m)}(\xi) \equiv z_{l,0}^{(m)}(\xi)$, $\varepsilon_l \equiv \varepsilon_{l,0}$,

$$\begin{aligned} \Gamma_{l,0}^{(1)}(t_1 | z_l^{(1)}(\xi)) &= \beta_{l,0}^{(1)}(t_1 | z_l^{(1)}(\xi)), \\ \Gamma_{l,0}^{(2)}(t_1, t_2 | z_l^{(2)}(\xi)) &= \beta_{l,0}^{(1)}(t_1 | z_l^{(2)}(\xi)) \beta_{l,0}^{(2)}(t_2, t_1 | z_l^{(2)}(\xi)), \\ \Gamma_{l,0}^{(3)}(t_1, t_2, t_3 | z_l^{(3)}(\xi)) &= \beta_{l,0}^{(1)}(t_1 | z_l^{(3)}(\xi)) \beta_{l,0}^{(2)}(t_2, t_1 | z_l^{(3)}(\xi)) \beta_{l,0}^{(3)}(t_3, t_2, t_1 | z_l^{(3)}(\xi)), \end{aligned} \quad (36)$$

тощо. Функція $\beta_{l,0}^{(1)}(t | z_l^{(1)}(\xi))$ визначена формулою (22), а функції $\beta_{l,0}^{(i)}(t_i, \dots, t_1 | z)$ при $i \geq 2$ задаються таким алгоритмом:

$$\begin{aligned} \beta_{l,0}^{(2)}(t_2, t_1 | z_l^{(2)}(\xi)) &= 2t_2^l \{2\sqrt{-\varepsilon_l} + \xi + \xi t_2 + \xi t_2 t_1 z_l^{(2)}(\xi)\}^{-1} \\ &\times \{2\sqrt{-\varepsilon_l} + \xi t_2 + \xi t_2 t_1 z_l^{(2)}(\xi)\}^l \{2\sqrt{-\varepsilon_l} + \xi + \xi t_1 z_l^{(2)}(\xi)\}^{-l}; \\ \beta_{l,0}^{(3)}(t_3, t_2, t_1 | z_l^{(3)}(\xi)) &= 2t_3^l \{2\sqrt{-\varepsilon_l} + \xi + \xi t_3 + \xi t_2 t_3 + \xi t_3 t_2 t_1 z_l^{(3)}(\xi)\}^{-1} \\ &\times \{2\sqrt{-\varepsilon_l} + \xi t_3 + \xi t_2 t_3 + \xi t_2 t_3 t_1 z_l^{(3)}(\xi)\}^l \\ &\times \{2\sqrt{-\varepsilon_l} + \xi + \xi t_2 + \xi t_2 t_1 z_l^{(3)}(\xi)\}^{-l}, \dots \end{aligned} \quad (37)$$

Ми проілюструємо поліпшення точності результатів, а також збіжність запропонованої процедури на прикладі розрахунку порогових значень параметра екранування $\xi_{l,0}$, покладаючи у формулах (36) $\sqrt{-\varepsilon_l} = 0$. У цій границі $z_l^{(m)}(\xi) \equiv z_l^{(m)}$ визначається лише значенням l , а від $\xi_{l,0}^{(m)}$ не залежить і є коренем рівняння

$$\begin{aligned} 1 - (z_l^{(m)})^{-1} &= \left\{ \int_0^1 dt_1 \int_0^1 dt_2 \dots \int_0^1 dt_m \gamma_{l,0}^{(m)}(t_1, t_2, \dots, t_m | z_l^{(m)}) \right\}^{-1} \\ &\times \int_0^1 dt_1 t_1 \int_0^1 dt_2 \int_0^1 dt_3 \dots \int_0^1 dt_m \gamma_{l,0}^{(m)}(t_1, t_2, \dots, t_m | z_l^{(m)}), \end{aligned} \quad (38)$$

а порогове значення параметра екранування в цьому наближенні дорівнює

$$\xi_{l,0}^{(m)} = 2 \left\{ \int_0^1 dt_1 \int_0^1 dt_2 \dots \int_0^1 dt_m \gamma_{l,0}^{(m)}(t_1, \dots, t_m | z_l^{(m)}) \right\}^{1/m}, \quad (39)$$

де

$$\begin{aligned} \gamma_{l,0}^{(m)}(t_1, \dots, t_m | z_l^{(m)}) &= \{t_1 t_2 \dots t_m\}^{2l} \{1 + t_1 z_l^{(m)}\}^{-1} \{1 + t_2 + t_2 t_1 z_l^{(m)}\}^{-1} \\ &\times \dots \times \{1 + t_m + t_m t_{m-1} + \dots + t_m t_{m-1} \dots t_1 z_l^{(m)}\}^{-1}. \end{aligned} \quad (40)$$

$Z_l^{(m)}$	$\xi_{l,0}^{(m)}$
$Z_0^{(1)} = 1.71828183$	$\xi_{0,0}^{(1)} = 1.16395341$
$Z_0^{(2)} = 1.64410419$	$\xi_{0,0}^{(2)} = 1.18426964$
$Z_0^{(3)} = 1.62357975$	$\xi_{0,0}^{(3)} = 1.18830566$
$Z_0^{(4)} = 1.61796512$	$\xi_{0,0}^{(4)} = 1.18931048$
$Z_0^{(5)} = 1.61645965$	$\xi_{0,0}^{(5)} = 1.18966430$
$Z_0^{(6)} = 1.61606152$	$\xi_{0,0}^{(6)} = 1.18984294$
$Z_0^{(7)} = 1.61595704$	$\xi_{0,0}^{(7)} = 1.18995749$
$Z_0^{(8)} = 1.61592972$	$\xi_{0,0}^{(8)} = 1.19004040$
$Z_0^{(9)} = 1.61592259$	$\xi_{0,0}^{(9)} = 1.19010419$
$Z_0^{(10)} = 1.61592073$	$\xi_{0,0}^{(10)} = 1.19015506$
$Z_0^{(11)} = 1.61592025$	$\xi_{0,0}^{(11)} = 1.19019665$
$Z_1^{(1)} = 3.37685394$	$\xi_{1,0}^{(1)} = 0.197422417$
$Z_1^{(2)} = 3.04787258$	$\xi_{1,0}^{(2)} = 0.211616247$
$Z_1^{(3)} = 2.87853896$	$\xi_{1,0}^{(3)} = 0.217777564$
$Z_1^{(4)} = 2.79029649$	$\xi_{1,0}^{(4)} = 0.220244219$
$Z_1^{(5)} = 2.74397939$	$\xi_{1,0}^{(5)} = 0.221151234$
$Z_1^{(6)} = 2.71968604$	$\xi_{1,0}^{(6)} = 0.221424403$
$Z_1^{(7)} = 2.70700131$	$\xi_{1,0}^{(7)} = 0.221450416$
$Z_1^{(8)} = 2.70041225$	$\xi_{1,0}^{(8)} = 0.221387771$
$Z_1^{(9)} = 2.69700488$	$\xi_{1,0}^{(9)} = 0.221299942$
$Z_1^{(10)} = 2.69524882$	$\xi_{1,0}^{(10)} = 0.221211208$
$Z_2^{(1)} = 5.23006004$	$\xi_{2,0}^{(1)} = 0.0764809575$
$Z_2^{(2)} = 4.69700901$	$\xi_{2,0}^{(2)} = 0.0832985994$
$Z_2^{(3)} = 4.34919956$	$\xi_{2,0}^{(3)} = 0.0876217192$
$Z_2^{(4)} = 4.12613196$	$\xi_{2,0}^{(4)} = 0.0901084790$
$Z_2^{(5)} = 3.98297356$	$\xi_{2,0}^{(5)} = 0.0914498539$
$Z_2^{(6)} = 3.89074534$	$\xi_{2,0}^{(6)} = 0.0921303558$
$Z_2^{(7)} = 3.83119829$	$\xi_{2,0}^{(7)} = 0.0924450634$
$Z_2^{(8)} = 3.79275092$	$\xi_{2,0}^{(8)} = 0.0925633794$
$Z_2^{(9)} = 3.76796224$	$\xi_{2,0}^{(9)} = 0.0925797564$
$Z_2^{(10)} = 3.7520133$	$\xi_{2,0}^{(10)} = 0.0925458676$

Таблиця 3. Залежність параметрів $\xi_{l,0}^{(m)}$ та $z_l^{(m)}$ від m ($0 \leq l \leq 2$).

У таблиці 3 наведено розраховані таким способом значення параметрів $\xi_{l,0}^{(m)}$ та $z_l^{(m)}$ для $l = 0, 1, 2, 3$. З таблиці видно, що $m = 10$ забезпечує точність порядку 10^{-4} . Уточнення порогових значень для параметра екранування також можна виконати таким самим методом, як і результатів таблиці 2. Так для $\xi_{0,0}$ отримуємо значення 1.19059, що на $2 \cdot 10^{-5}$ відрізняється від результату праці [14].

Варто зауважити, що $z_l^{(m)}$ при досить великих m близькі до значень, що одержуємо за правилом “золотого перерізу” [24, 25]. Справді, при $l = 0$ середнє значення змінної t на інтервалі $[0,1]$ можна вибрати рівним $\tau_0^* = \frac{1}{2}(3 - \sqrt{5})$. Тоді $1 - \tau_0^* = \frac{1}{2}(\sqrt{5} - 1)$, і через те $z_0^* = (1 - \tau_0^*)^{-1} = 2(\sqrt{5} - 1)^{-1} \simeq 1.6180339\dots$ Це число близьке до значень $z_0^{(m)}$, які отримуємо при самоузгодженому розрахунку при $m \geq 4$. Ураховуючи, що τ_l (а також z_l) зростають зі збільшенням l , у випадку $l = 1$ відрізок $1 - \tau_0^*$ знов розіб’ємо на два відповідно до “золотого перерізу”, а середнє значення змінної t виберемо у вигляді

$$\tau_1^* = \tau_0^* + \tau_0^*(1 - \tau_0^*), \tag{41}$$

чому відповідає

$$z_1^* = (1 - \tau_0^*)^{-2} = (z_0^*)^2 = 2.618033\dots \tag{42}$$

Відрізок $(1 - \tau_0^*)^2$ знову розіб’ємо за правилом “золотого перерізу” і т.д. Так одержуємо співвідношення

$$z_l^* = (z_0^*)^{l+1}. \tag{43}$$

Числа z_l^* близькі до отриманих значень параметра $z_l^{(m)}$ при великих m . Це дозволяє не проводити самоузгодженого розрахунку параметрів $z_l^{(m)}$, а для всіх m при заданому l використати ті самі значення параметра z_l , наприклад вираз (43), або вибрати $z_l^{(10)}$, або ж числа

$$z_l^* = z_0^* + l, \tag{44}$$

які досить близькі до розрахованих $z_l^{(m)}$, як це видно з таблиці 3. Розрахунок $\xi_{l,0}^{(m)}$ за формулою (40) показує, що в цьому варіанті маємо ще гіршу збіжність, тому можна використовувати наближення з меншим значенням m , а залежність $\xi_{l,0}$ від вибраного значення z_l є слабкою. Це ілюструє таблиця 4, у якій подано результати розрахунку порогових значень параметра екранування за формулою (40) при двох заданих значеннях параметра z_l , а саме $z_l^{(10)}$ та $z_l^* = z_0^* + l$. Для заданого m їм відповідають значення параметра екранування $\xi_{l,0}^{(m)}$ та $\xi_{l,0}^{(m)*}$. Отже, не втрачаючи точності, можна обійтися без самоузгоджених розрахунків, що приблизно удвічі скорочує об’єм обчислень.

Повернімося до розв’язування систем рівнянь (35)–(38). Якщо врахувати явний вираз для $\beta_{l,0}^{(1)}(t|z_l^{(m)}(\xi))$, а також узяти до уваги перше з рівнянь системи (35), то друге рівняння цієї системи можна зобразити у такому вигляді:

$$(y_l + \sqrt{-\varepsilon_l})^{l+1} = \int_0^1 dt_1 t_1^l (\sqrt{-\varepsilon_l} + t_1 y_l)^l \int_0^1 dt_2 \beta_{l,0}^{(2)}(t_2, t_1 | z_l^{(m)}) \quad (45)$$

$$\times \int_0^1 dt_3 \beta_{l,0}^{(3)}(t_3, t_2, t_1 | z_l^{(m)}) \int_0^1 \dots \int_0^1 dt_m \beta_{l,0}^{(m)}(t_m, \dots, t_1 | z_l^{(m)}).$$

В інтегралі за змінною t_1 фігурують лише $\sqrt{-\varepsilon_l}$ та $y_l = \frac{1}{2}\xi z_l^{(m)}$, а у функціях $\beta_{l,0}^{(2)}(\dots), \dots, \beta_{l,0}^{(m)}(\dots)$ — цей параметр екранування ξ . Однак параметри $\sqrt{-\varepsilon_l}$ та ξ не є незалежними. Перше з рівнянь (35) визначає $\sqrt{-\varepsilon_l}$ як деяку функцію параметра ξ ,

$$\sqrt{-\varepsilon_l} = f_l(\xi). \quad (46)$$

Нехай корінь цього рівняння є $\xi_* \equiv \xi_*(\sqrt{-\varepsilon_l})$. Підставляючи його замість ξ в рівняння (46), знаходимо залежність y_l від $\sqrt{-\varepsilon_l}$. Підставляючи знайдене y_l у перше з рівнянь (35), одержуємо залежність $\sqrt{-\varepsilon_l}$ від ξ , тобто співвідношення (46). Отже, систему рівнянь (35) розв'язуємо методом послідовних наближень, а в першому наближенні, замість співвідношення (46), використовуємо залежність $\sqrt{-\varepsilon_l}$ від ξ , знайдену в “однопараметричному” наближенні. Результати розрахунку $\sqrt{-\varepsilon_l}$ в наближенні $m = 5$ подано на рис. 4а, 4б (суцільні криві) для $l = 0, 1, 2, 3$. Хрестики відповідають результатам чисельного розв'язування рівняння Шредингера праці [14]. Як впливає із цих рисунків, “ m -параметричне” наближення дає ліпші результати в околі порогових значень $\xi_{l,0}^{(m)}$, які своєю чергою уточнюють відповідні значення $\xi_{l,0}^{(1)}$. Ми апроксимували цю залежність виразами типу (34), де

коєфіцієнти розкладів підбрано за методом найменших квадратів:

$$\sqrt{-\varepsilon_{0,0}} = 1 + \sum_{i=1}^6 (-1)^i \alpha_i (\xi/\xi_{0,0})^i, \quad (47)$$

$$\sqrt{-\varepsilon_{l,0}} = \frac{1}{l+1} - \beta_l^{(1)} \xi/\xi_{l,0} - \sum_{i=2}^6 (-1)^i \beta_l^{(i)} (\xi/\xi_{l,0})^i,$$

$$l \geq 1,$$

де

$$\alpha_1 = 1.19034, \alpha_2 = 0.32006, \alpha_3 = 0.241148, \alpha_4 = 0.184197, \alpha_5 = 0.0956536, \alpha_6 = 0.0226682;$$

$$\beta_1^{(1)} = 0.393561, \beta_1^{(2)} = 0.678865, \beta_1^{(3)} = 3.64717, \beta_1^{(4)} = 8.32644, \beta_1^{(5)} = 8.58641, \beta_1^{(6)} = 3.32348;$$

$$\beta_2^{(1)} = 0.236428, \beta_2^{(2)} = 0.56216, \beta_2^{(3)} = 2.94187, \beta_2^{(4)} = 6.70712, \beta_2^{(5)} = 6.92138, \beta_2^{(6)} = 2.68219;$$

$$\beta_3^{(1)} = 0.172931, \beta_3^{(2)} = 0.4484, \beta_3^{(3)} = 2.37061, \beta_3^{(4)} = 5.41852, \beta_3^{(5)} = 5.59849, \beta_3^{(6)} = 2.17244.$$

$$\beta_3^{(1)} = 2.33951, \beta_3^{(2)} = 291.695, \beta_3^{(3)} = 28896.3, \beta_3^{(4)} = 1.30014 \cdot 10^6, \beta_3^{(5)} = 2.65486 \cdot 10^7, \beta_3^{(6)} = 2.03116 \cdot 10^8.$$

За знайденими $\xi_{l,0}$ та $\sqrt{-\varepsilon_{l,0}}$ легко розрахувати хвильові функції відповідних станів. У наближенні (35)

$$\omega_{l,0}^{(m)}(\rho) = \int_0^1 dt_1 \dots \int_0^1 dt_m \Gamma_l^{(m)}(t_1, t_2, \dots, t_m | z_l^{(m)}) \quad (48)$$

$$\times \exp \left\{ -\rho \xi t_m [1 + t_{m-1} + t_{m-1} t_{m-2} + \dots + t_{m-1} \dots t_1 z_l^{(m)}] \right\},$$

а нормовані радіальні функції мають таке зображення:

$$R_{l,0}^{(m)}(\rho) = N_{l,0}^{(m)}(\xi) \rho^l \omega_{l,0}^{(m)}(\rho) \exp(-\sqrt{-\varepsilon_{l,0}} \rho). \quad (49)$$

Стала нормування залежить від значення параметра екранування i в “ m -параметричному” наближенні дорівнює

$$N_{l,0}^{(m)}(\xi) = [(2l+2)!]^{-1/2} \left\{ \int_0^1 dt_1 \dots \int_0^1 dt_m \Gamma_{l,0}^{(m)}(t_1, \dots, t_m | z_l^{(m)}) \quad (50)$$

$$\times \int_0^1 dt'_1 \dots \int_0^1 dt'_m \Gamma_{l,0}^{(m)}(t'_1, \dots, t'_m | z_l^{(m)}) [2\sqrt{-\varepsilon_l} + \xi t_m (1 + t_{m-1} + \dots + t_{m-1} \dots t_1 z_l^{(m)})$$

$$+ \xi t'_m (1 + t'_{m-1} + \dots + t'_{m-1} \dots t'_1 z_l^{(m)})]^{-2l-3} \right\}^{-1/2}.$$

m	$z_l^{(10)}$ z_l^*	$\xi_l^{(m)}$ $\xi_l^{(m)*}$	m	$z_l^{(10)}$ z_l^*	$\xi_l^{(m)}$ $\xi_l^{(m)*}$
$l = 0$			$l = 1$		
1	1.61592073 1.61803398	1.16395341 1.18962105	1	2.69524882 2.61803398	0.19742241 0.23349487
2	1.61592073 1.61803398	1.18426964 1.18873302	2	2.69524882 2.61803398	0.21161624 0.22921809
3	1.61592073 1.61803398	1.18830566 1.18898467	3	2.69524882 2.61803398	0.21777756 0.22671432
4	1.61592073 1.61803398	1.18931048 1.18930403	4	2.69524882 2.61803398	0.22024421 0.22518467
5	1.61592073 1.61803398	1.18966430 1.18954590	5	2.69524882 2.61803398	0.22115123 0.22419998
7	1.61592073 1.61803398	1.18995749 1.18984572	7	2.69524882 2.61803398	0.22145041 0.22305118
10	1.61592073 1.61803398	1.19015506 1.19007543	10	2.69524882 2.61803398	0.22121120 0.22219397
$l = 2$			$l = 3$		
1	3.7520133 3.61803398	0.0764809 0.10164622	1	4.8624016 4.61803398	0.0398997 0.05738261
2	3.7520133 3.61803398	0.0832985 0.09917603	2	4.8624016 4.61803398	0.0433297 0.05593891
3	3.7520133 3.61803398	0.0876217 0.09745834	3	4.8624016 4.61803398	0.0459688 0.05484248
4	3.7520133 3.61803398	0.0901084 0.09624792	4	4.8624016 4.61803398	0.0478310 0.05400421
5	3.7520133 3.61803398	0.0914498 0.09538044	5	4.8624016 4.61803398	0.0490656 0.05335868
7	3.7520133 3.61803398	0.0924450 0.09427066	7	4.8624016 4.61803398	0.0503197 0.05246362
10	3.7520133 3.61803398	0.0925458 0.09339050	10	4.8624016 4.61803398	0.0508007 0.05169403

Таблиця 4. Залежність параметрів $\xi_{l,0}^{(m)}$ та $\xi_{l,0}^{(m)*}$ від m ($0 \leq l \leq 3$).

Щоб одержати якісну оцінку $\omega_{l,0}^{(m)}(\rho)$, досить скористатися “однопараметричним” наближенням, у якому

$$\omega_l(\rho) = \int_0^1 dt t^l (\sqrt{-\varepsilon_l} + ty_l)^l (\sqrt{-\varepsilon_l} + y_l)^{-l-1} \times \exp(-2t\rho y_l). \quad (51)$$

У границі $\xi \rightarrow 0$, коли $y_l \rightarrow 0$, маємо кулонівську асимптотику, $\omega_{l,0}(\rho) \rightarrow 1$.

У випадку $\xi \rightarrow \xi_{l,0}$, коли $\sqrt{-\varepsilon_l} \rightarrow 0$, а $y_l \rightarrow y_l(0) = (2l+1)^{-1}$,

$$\omega_{l,0}(\rho) = y_l^{-1}(0) \left\{ (2l)! (2\rho y_l(0))^{-2l-1} - e^{-2\rho y_l(0)} \times \sum_{i=0}^l (2l)! [(2l-i)!]^{-1} (2\rho y_l(0))^{-i-1} \right\}. \quad (52)$$

Звичайно, при $\rho \rightarrow 0$ і в цьому разі $\omega_{l,0}(\rho) \rightarrow 1$, але при $\rho \gg l$

$$\omega_{l,0}(\rho) \rightarrow (2l)! (2\rho)^{-2l-1} (2l+1)^{2l+2}. \quad (53)$$

Звідси випливає, що в околі порогового значення параметра екранування функція $R_{l,0}(\rho)$ на великих відстанях від початку координат має асимптотику $\rho^{-l-1} \exp(-\sqrt{-\varepsilon_{l,0}}\rho)$. Як видно з формули (51), при $\xi = \xi_{l,0}$ інтеграл нормування розбігається, а відповідний дискретний рівень переходить у неперервний спектр.

Залежність форми радіальних функцій від параметра екранування ілюструє рисунок 5. Тут подано радіальну густину ймовірності для основного стану ($l = 0$), розраховану за формулами (49)–(51). Збільшення параметра ξ приводить до розмивання хвильових функцій, а також до зміни положення й висоти максимуму розподілу.

VI. СТАНИ З ВУЗЛОВИМИ РАДІАЛЬНИМИ ФУНКЦІЯМИ

Одержані вище результати легко узагальнити на k -вузлові радіальні функції. Заданому орбітальному квантовому числу l відповідає сім'я розв'язків $\omega_{l,k}(\rho)$,

які визначають ортогональний набір вузлових радіальних функцій. Як нульове наближення розв'язку рівняння (7) виберімо поліном k -го порядку з невизначеними коефіцієнтами, нормований на одиницю при $\rho = 0$:

$$\omega_{l,k}^{(0)}(\rho) = 1 + \alpha_{l,k}^{(1)}\rho + \alpha_{l,k}^{(2)}\rho^2 + \dots + \alpha_{l,k}^{(k)}\rho^k. \quad (54)$$

Уведемо диференціальний оператор

$$\hat{P}_{l,k}(\xi) = 1 + \sum_{i=1}^k (-1)^i \alpha_{l,k}^{(i)} \frac{d^i}{d\xi^i}, \quad k \geq 1, \quad (55)$$

пов'язаний із $\omega_{l,k}^{(0)}(\rho)$ співвідношенням

$$\omega_{l,k}^{(0)}(\rho) = e^{\xi\rho} \hat{P}_{l,k}(\xi) e^{-\xi\rho}. \quad (56)$$

Підставляючи праву частину рівності (57) у рівняння (7) і виносячи оператор $\hat{P}_{l,k}(\xi)$ з-під знака інтеграла, одержимо таке перше наближення:

$$\omega_{l,k}^{(1)}(\rho) = \hat{P}_{l,k}(\xi) \int_0^1 dt F_{l,k}(t|\xi) e^{-\xi\rho t}, \quad (57)$$

де функцію $F_{l,k}(t|\xi)$ отримуємо з формули (15) при заміні $\varepsilon_l \rightarrow \varepsilon_{l,k}$. У другому наближенні

$$\omega_{l,k}^{(2)}(\rho) = \left\{ \hat{P}_{l,k}(\xi) \int_0^1 dt_1 F_{l,k}(t_1|\xi) \int_0^1 dt_2 F_{l,k}(t_2|\eta + t_1\xi) \times \exp[-\rho t_2(\eta + \xi t_1)] \right\} \Big|_{\eta=\xi} \quad (58)$$

тощо. Розв'язок рівняння (7) у цьому випадку зображається у вигляді такої границі:

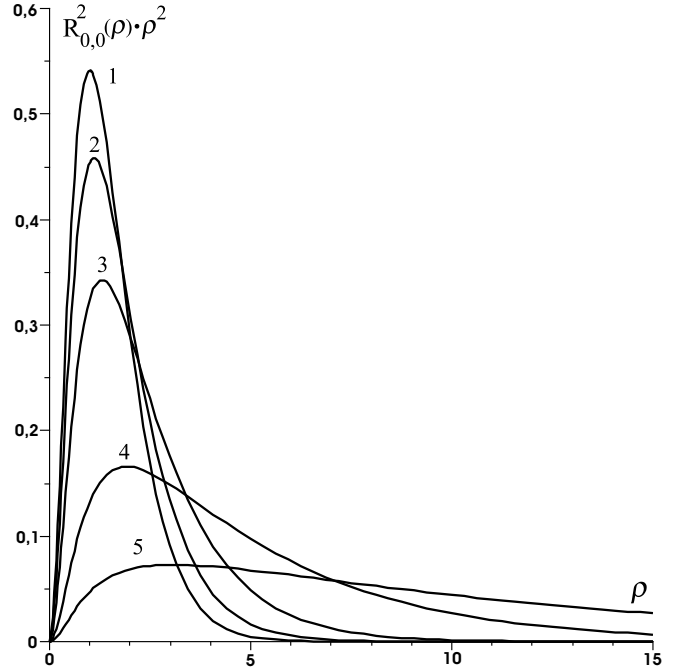


Рис. 5. Радіальна густина розподілу ймовірності для основного стану, розрахована за формулами (50)–(52). Крива 1 відповідає кулонівському потенціалові, крива 2 — параметрові екранування $\xi = 0.5$, крива 3 — $\xi = 0.75$, крива 4 — $\xi = 1.0$, крива 5 — $\xi = 1.1$.

$$\omega_{l,k}(\rho) = \lim_{s \rightarrow \infty} \left\{ \hat{P}_{l,k}(\xi) \int_0^1 dt_1 F_{l,k}(t_1|\xi) \int_0^1 dt_2 F_{l,k}(t_2|\eta + \xi t_1) \dots \times \int_0^1 dt_s F_{l,k}(t_s|\eta + \eta t_{s-1} + \eta t_{s-1} t_{s-2} + \dots + \eta t_{s-1} \dots t_2 + \xi t_{s-1} \dots t_1) \times \exp[-t_s \rho \eta (1 + t_{s-1} + t_{s-1} t_{s-2} + \dots + t_{s-1} \dots t_2) - \rho \xi t_s \dots t_1] \right\} \Big|_{\eta=\xi}. \quad (59)$$

Коефіцієнти полінома (55) знайдемо з умов ортогональності функції $R_{l,k}(\rho)$ до всіх функцій із меншим числом вузлів:

$$(R_{l,k}, R_{l,j}) = 0, \quad 0 \leq j \leq k-1. \quad (60)$$

З умови $\omega_{l,k}(0) = 1$ знаходимо рівняння, що визначає енергію стану:

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \left\{ \hat{P}_{l,k}(\xi) \int_0^1 dt_1 F_{l,k}(t_1|\xi) \int_0^1 dt_2 F_{l,k}(t_2|\eta + \xi t_1) \int_0^1 dt_3 \dots \dots \times \int_0^1 dt_s F_{l,k}(t_s|\eta + \eta t_{s-1} + \eta t_{s-1} t_{s-2} + \dots + \eta t_{s-1} \dots t_2 + \xi t_{s-1} \dots t_1) \right\} \Big|_{\eta=\xi} = 1. \quad (61)$$

Покладаючи в останньому рівнянні $\sqrt{-\varepsilon_{l,k}} = 0$, одержуємо аналог рівняння (19), з якого визначаємо порогове значення параметра екранування для стану з квантовими числами l, k :

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \left\{ 2^s \xi^{1-s} \hat{P}_{l,k} \xi^{-1} \int_0^1 \frac{dt_1 t_1^{2l}}{1 + \frac{\xi}{\eta} t_1} \int_0^1 \frac{dt_2 t_2^{2l}}{1 + t_2 + \frac{\xi}{\eta} t_2 t_1} \right. \\ \left. \times \int_0^1 \dots \int_0^1 \frac{dt_{s-1} t_{s-1}^{2l}}{1 + t_{s-1} + \dots + \frac{\xi}{\eta} t_{s-1} \dots t_1} \int_0^1 dt_s t_s^{2l} \right\}_{|\eta=\xi=\xi_{l,k}} = 1. \quad (62)$$

Для прикладу наведемо тут явний запис умови ортогональності для функцій $R_{l,1}(\rho)$ та $R_{l,0}(\rho)$, що визначає єдиний коефіцієнт $\alpha_{l,1}^{(1)} \equiv \alpha_{l,1}$, використовуючи зображення (49) для $\omega_{l,0}(\rho)$:

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \left\{ \int_0^1 \dots \int_0^1 dt_1 \dots dt_m \Gamma_l^{(m)}(t_1, \dots, t_m | z_l^{(m)}) \left[1 - \alpha_{l,1} \frac{d}{d\xi} \right] \right. \\ \times \int_0^1 \dots \int_0^1 dt'_1 \dots dt'_s F_{l,1}(t'_1 | \xi) F_{l,1}(t'_2 | \eta + \xi t'_1) \\ \dots \times F_{l,1}(t'_s | \eta + \eta t'_{s-1} + \dots + \eta t'_{s-1} \dots t'_2 + \xi t'_{s-1} \dots t'_1) \\ \times \left[\sqrt{-\varepsilon_{l,0}} + \sqrt{-\varepsilon_{l,1}} + \eta t_m [1 + t_{m-1} + \dots + t_{m-1} \dots t_1 z_l^{(m)}] \right. \\ \left. \left. + \eta t'_s [1 + t'_{s-1} + \dots + t'_{s-1} \dots t'_2] + \xi t'_s \dots t'_1 \right]^{-2l-3} \right\}_{|\eta=\xi} = 0. \quad (63)$$

Беручи до уваги рівняння (35) та (62) і замінюючи в останньому множнику підінтегральної функції t_1, \dots, t_2 , а також t'_1, \dots, t'_s середнім значенням π_l , отримуємо таку оцінку:

$$\alpha_{l,1} \approx -(2l+3)^{-1} \times \left\{ \sqrt{-\varepsilon_{l,0}} + \sqrt{-\varepsilon_{l,1}} + 2\xi(z_l^m - 1) \right\}. \quad (64)$$

При $\xi \rightarrow 0$ звідси одержуємо кулонівську границю $\alpha_{l,1}^0 = -(l+1)^{-1}(l+2)^{-1}$. Використовуючи вираз (65), з рівняння (63) знаходимо оцінку порогового значення параметра екранування для станів з одновузловими функціями

$$\xi_{l,1} \approx (l+1)^{-1}(2l+3)^{-1}. \quad (65)$$

Як показують числові розрахунки, при роз'язуванні рівнянь (62), (63) досить обмежитися інтегралами невисокої кратності, на відміну від станів з безвузловими функціями. Таблиця 5 ілюструє збіжність результатів розрахунку $\xi_{0,1}$, $\xi_{1,1}$ залежно від кратності інтегралів s у формулі (63) в наближенні (65). Для порівняння подано також результати праці [14], отримані шляхом чисельного інтегрування рівняння Шредингера.

s	1	2	3	4	5	7	10	[14]
$\xi_{0,1}$	0.252988	0.303641	0.317866	0.321925	0.323048	0.323431	0.323459	0.3233
$\xi_{1,1}$	0.072172	0.091724	0.100494	0.105016	0.107453	0.109491	0.110179	0.1127

Таблиця 5. Залежність параметрів $\xi_{0,1}$ та $\xi_{1,1}$ від s .

$k \backslash l$	0	1	2	3
0	1.1902	0.2212	0.0925	0.0508
1	0.3235	0.1101	0.0581	0.0354
2	0.1394	0.0679	0.0400	
3	0.0788	0.0452		

Таблиця 6. Порогові значення параметра екранування для нижніх енергетичних рівнів.

У таблиці 6 наведено розраховані порогові значення параметра екранування $\xi_{l,k}$ для нижніх енергетичних рівнів. Одержані $\xi_{l,k}$ незначно відрізняються від результатів праці [14].

VII. ВИСНОВКИ

Методом послідовних наближень ми одержали точні розв'язки радіального рівняння Шредингера з екранованим потенціалом у вигляді безмежнократних інтегралів за параметром від елементарних функцій як для станів із безвузловими функціями, що відповідають найнижчим значенням енергії при заданому орбітальному числу l , так і для станів, що описуються радіальними функціями з довільним числом вузлів. Ми розробили методику використання отриманих розв'язків для наближених розрахунків спектра енергетичних рівнів, порогових значень безрозмірного параметра екранування, які визначають ділянки існування відповідних станів, а також для компактного представлення хвильових функцій. Ця методика ґрунтується на обчисленні інтегралів невисокої кратності й дає змогу досягати високої точності при розрахунках, що ілюструють таблиці 3–6, а також рисунки 4а, 4б. Так розрахована нами в “5-параметричному”

наближенні залежність енергії рівнів від параметра екранування добре узгоджується з результатами чисельного розв'язування рівняння Шредингера з праці [14], а також з результатами інших робіт, у яких використано варіаційний метод, зокрема з результатами роботи [19] та ін.

Як відомо, варіаційний метод дає змогу розраховувати з високою точністю енергетичний спектр, але при цьому, як правило, використовують пробні хвильові функції, які є не чим іншим, як відповідно модифікованими розв'язками рівняння Шредингера з кулонівським потенціалом (див., напр. [19]). Такі функції мають некоректну асимптотику на великих відстанях від початку координат. Через це розв'язки радіального рівняння Шредингера з екранованим потенціалом досліджені значно менше, ніж енергетичний спектр цієї задачі. Наша схема має переваги перед наявними методами, оскільки вона дає змогу в межах єдиного підходу з однаковою точністю розраховувати всі характеристики локалізованих станів, а можливість уточнення результатів не викликає сумніву. Результати докладного дослідження особливостей радіальних функцій будуть опубліковані в окремій праці.

Цю схему можна застосувати також для інших потенціалів, споріднених з екранованим.

-
- [1] В. Д. Крефт, Д. Кремп, В. Эбелинг, Г. Рёпке, *Квантовая статистика систем заряженных частиц* (Мир, Москва, 1988).
 - [2] Г. Месси, *Отрицательные ионы* (Мир, Москва, 1979).
 - [3] *Достижения электронной теории металлов*, под ред. П. Цише, Г. Леманна (Мир, Москва, 1984).
 - [4] О. Г. Ситенко, В. К. Тартаковский, *Теория ядра* (Либідь, Київ, 2000).
 - [5] І. О. Вакарчук, *Квантова механіка* (ЛНУ імені Івана Франка, Львів, 2007).
 - [6] L. Hulthen, K. V. Laurikainen, *Rev. Mod. Phys.* **23**, 1 (1951)
 - [7] G. M. Harris, *Phys. Rev.* **125**, 1131 (1962).
 - [8] C. R. Smith, *Phys. Rev. A* **134**, 1235 (1964).
 - [9] H. M. Schey, J. L. Schwartz, *Phys. Rev. B* **139**, 1428 (1965).
 - [10] K. M. Roussel, R. F. O'Connell, *Phys. Rev. A* **9**, 52 (1974).
 - [11] F. J. Rogers, *Phys. Rev. A* **4**, 1145 (1971).
 - [12] J. McEnnan, L. Kissel, R. H. Pratt, *Phys. Rev. A* **13**, 532 (1976).
 - [13] Carl A. Rouse, *Phys. Rev.* **159**, 41 (1967).
 - [14] F. J. Rogers, H. C. Graboske, P. J. Harwood, *Phys. Rev. A* **1**, 1577 (1962).
 - [15] H. Sameer Ikhdaire, Sever Ramazan, *J. Math. Chem.* **41**, 343 (2007).
 - [16] R. Dutt *et al.*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **18**, 1379 (1985).
 - [17] Y. P. Varshni, *Phys. Rev. A* **41**, 4682 (1990).
 - [18] О. С. Павлова, А. Р. Френкин, *Теор. мат. физ.* **125**, 242 (2000).
 - [19] Elso Drigo Filho, Regina Maria Ricotta, arXiv: hep-th/0002015 V1 (2000).
 - [20] М. В. Ваврух, *Укр. физ. журн.* **18**, 2012 (1973).
 - [21] М. Ваврух, препринт ИТФ-78-129Р (Киев, 1978).
 - [22] И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов* (Наука, Москва, 1971).
 - [23] Б. А. Трубников, Ю. Н. Явлинский, *Журн. эксп. теор. физ.* **48**, 1618 (1965).
 - [24] Н. Н. Воробьев, *Числа Фибоначчи* (Наука, Москва, 1974).
 - [25] А. П. Стахов, *Введение в алгоритмическую теорию измерения* (Сов. радио, Москва, 1977).

LOCALIZED STATES OF THE ELECTRON IN THE SCREENED FIELD: EXACT SOLUTIONS AND APPROXIMATE CALCULATION ENERGY SPECTRUM

M. V. Vavrukh, N. L. Tyshko, O. M. Stelmakh, R. I. Korytko
*Ivan Franko National University of Lviv, Department for Astrophysics,
 8 Kyryla i Mefodija St., Lviv, UA-79005, Ukraine*

The radial functions of the electron bound states in the field of the screened charge are represented in the form of the parameter integrals of infinite multiplicity. The algebraic equations which determine the energy levels considered have the analogous form. These exact relations are applied for the approximate calculations of energy spectrum and critical levels of the screening parameter.