

ЛОКАЛІЗОВАНІ СТАНИ ЕЛЕКТРОНА В ЕКРАНОВАНОМУ ПОЛІ: ВИКОРИСТАННЯ АСИМПТОТИЧНИХ РЯДІВ

М. В. Ваврух, О. М. Стельмах, Н. Л. Тишко

*Львівський національний університет імені Івана Франка, кафедра астрофізики
вул. Кирила і Мефодія, 8, Львів, 79005, Україна*

(Отримано 12 лютого 2009 р.)

На основі точного розв'язку рівняння Шредингера для електрона в полі екранованого заряду одержано рівняння, що визначають критичні значення безрозмірного параметра екранування, при яких дискретні рівні для заданого орбітального квантового числа l переходять у неперервний спектр. Із високою точністю розраховано корені отриманих рівнянь, що відповідають нижнім енергетичним рівням. Досліджено асимптотику енергетичного спектра електрона в околі порогових значень параметра екранування. Наведено залежність енергій локалізованих станів від параметра екранування у вигляді напівзбіжних (асимптотичних) рядів.

Ключові слова: потенціал Дебая-Юкави, зв'язані стани, радіальні хвильові функції, критичні значення параметра екранування, апроксимаційні формули для енергетичних рівнів.

PACS number(s): 05.30.Fk

I. ВСТУП

При квантовомеханічному описі систем із складним характером потенціальної функції найчастіше використовують теорію збурень, варіаційний метод, чисельне інтегрування та фредгольмівські методи [1,2]. Наша робота присвячена дослідженню квантових станів електрона в полі екранованого заряду. Ця задача має 70-річну історію. Завдяки застосуванню наближених методів та чисельного інтегрування рівняння Шредингера загальні властивості спектра в основному відомі. Властивості хвильових функцій вивчені значно менше. Постійне зацікавлення цією задачею зумовлене необхідністю врахувати ефекти екранування в частково йонізованих системах багатьох частинок — плазмі, напівпровідниках, металах, астрофізичних середовищах. Ця задача актуальна також у теорії багатоелектронних атомів, ядерних систем, у теорії розсіяння (див. [3–6]). Задача про розрахунок квантових станів мікрочастинки в екранованому полі має також самостійне значення для квантової механіки, де відомо не так багато реалістичних потенціалів, що допускають точні або майже точні розв'язки [7,8].

У праці [9] вперше наближено розраховано енергію основного стану електрона в полі екранованого заряду. Автори робіт, виконаних на початку другої половини минулого століття, обмежувалися наближеним розрахунком спектра нижніх енергетичних рівнів мікрочастинки в екранованому полі, використовуючи стандартні методи квантової механіки — теорію збурень та варіаційний метод [10–17]. Із розвитком обчислювальної техніки виникла можливість чисельного інтегрування рівняння Шредингера. Вперше цей підхід застосовано у праці [18], де знайдено спектр для $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d$ -станів для потенціалів, подібних до екранованого. У статті [19] таким способом розраховано спектр енергетичних рівнів та критичні значення радіуса екранування для великої кіль-

кості станів, а також виявлено кросовер — перетин енергетичних рівнів для високозбуджених станів, що, мабуть, є характерним явищем для потенціалів, які на великих відстанях від силового центра прямують до нуля набагато швидше, ніж потенціал Кулона. Результати цієї роботи відіграють роль тесту для попередніх та теперішніх аналітичних розрахунків. На жаль, із результатів праць, що використовують чиселове інтегрування рівняння Шредингера, майже нічого не відомо про особливості хвильових функцій.

Відомі наближені розв'язки рівняння Шредингера з потенціалами, спорідненими до екранованого: з частково екранованим потенціалом $V(r) = -\frac{\alpha}{2}\{1 + e^{-\beta r}(1 + br)\}$ [20], з потенціалом Гюльгена $V(r) = -\alpha e^{-\beta r}(1 - e^{-\gamma r})^{-1}$ [21, 22], з комбінацією потенціалу Юкави із лінійно зростаючим потенціалом [23] та іншими.

Автори цієї статті одержали точні аналітичні розв'язки рівняння Шредингера з екранованим потенціалом для станів, що описуються безвузловими радіальними функціями [24]. Вони представлені у вигляді безмежнократних інтегралів за числовим параметром $0 \leq t \leq 1$ від елементарних функцій. У такому ж вигляді отримано рівняння, що визначають енергетичний спектр та критичні значення безрозмірного параметра екранування. Розроблено процедуру використання цих точних співвідношень для наближеного розрахунку спектра та хвильових функцій. Цей підхід поширено також на вузлові функції, однак у цьому випадку він стає менш привабливим щодо практичного використання через свою громіздкість.

Один із авторів цієї роботи одержав аналітичні розв'язки рівняння Шредингера з потенціалом загального типу $V(r) = -\frac{\alpha}{r}f(r)$, де $f(r)$ є цілою функцією змінної r ($f(r) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\beta_n r^n}{n!}$) і має асимптотику $f(r) \rightarrow 1$ при $r \rightarrow 0$, $f(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$ [25]. Радіальна функція представлена у вигляді розкладів за

степенями r з наступним підсумовуванням безмежних рядів за допомогою перетворення Лапласа. Однак через відсутність на ту пору відповідної вчислальної бази автор не зміг повною мірою скористатися цим способом для розрахунку спектра і хвильових функцій електрона в полі екранованого заряду. Такий підхід застосовано в цій статті для визначення з високою точністю критичних (порогових) значень параметра екранування, при яких відповідні рівні переходять у неперервний спектр, для вивчення особливостей асимптотики енергетичних рівнів в околі порогових значень параметра екранування, а також для знаходження апроксимаційних виразів для енергетичних рівнів при довільних значеннях квантових чисел.

II. ОСНОВНІ СПІВВІДНОШЕННЯ

Розгляньмо рух електрона в полі екранованого заряду з потенціальною енергією

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

Уводячи безрозмірні величини $\rho = za_0^{-1}r$, $\xi = z^{-1}\alpha a_0$ (безрозмірний параметр екранування), $\varepsilon = 2ma_0^2\hbar^{-2}z^{-2}E$ ($a_0 = \hbar^2m^{-1}e^{-2}$ — радіус Бора, E — енергія електрона), запишімо рівняння для радіальної функції $R_l(\rho)$, що описує стан електрона із заданим орбітальним моментом,

$$\frac{d^2}{d\rho^2}R_l(\rho) + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho}R_l(\rho) + \left\{ \frac{2}{\rho} e^{-\xi\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \varepsilon \right\} R_l(\rho) = 0. \quad (1)$$

За допомогою стандартної підстановки [7, 8]

$$R_l(\rho) = \rho^l \omega_l(\rho) e^{-\sqrt{-\varepsilon}\rho} \quad (2)$$

перетворимо рівняння (1) у рівняння для функції $\omega_l(\rho)$,

$$\frac{1}{2\rho} \frac{d^2}{d\rho^2} \omega_l(\rho) + [1 + l - \rho\sqrt{-\varepsilon}] \frac{d}{d\rho} \omega_l(\rho) - [e^{-\xi\rho} + (1+l)\sqrt{-\varepsilon}] \omega_l(\rho) = 0. \quad (3)$$

Як і в роботі [25], запишімо розв'язок рівняння (3) у вигляді нескінченного ряду

$$\omega_l(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n^l(\varepsilon|\xi) \rho^n \quad (4)$$

з невизначеними коефіцієнтами $a_n^l(\varepsilon|\xi)$. Оскільки рівняння (3) — лінійне, то для зручності приймімо $a_0^l = 1$. Підставляючи ряд (4) у рівняння (3), розкладаючи $e^{-\xi\rho}$ у степеневий ряд і прирівнюючи коефіцієнти при однакових степенях змінної ρ , одержуємо систему багаточленних рекурентних співвідношень для коефіцієнтів $a_n^l(\varepsilon|\xi)$:

$$a_n^l(\varepsilon|\xi) = 2[n(1+n+2l)]^{-1} \left\{ \sqrt{-\varepsilon}(n+l)a_{n-1}^l(\varepsilon|\xi) - \sum_{s=0}^{n-1} (s!)^{-1} (-\xi)^s a_{n-1-s}^l(\varepsilon|\xi) \right\}. \quad (5)$$

Асимптотика ряду (4) при $\rho \rightarrow 0$ збігається з кулонівською. Щоб забезпечити нульову асимптотику радіальної функції при $\rho \rightarrow \infty$, виконаймо часткове підсумовування ряду (4), використовуючи співвідношення (5) безмежну кількість разів. Це дає змогу зобразити $\omega_l(\rho)$ у такому компактному вигляді:

$$\omega_l(\rho) = C(\sqrt{-\varepsilon}) F(1+l, 2+2l, 2\rho\sqrt{-\varepsilon}) - 2 \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n a_n^l(\varepsilon|\xi) \times \left\{ \frac{\partial^n}{\partial x^n} \frac{\partial^l}{\partial \rho^l} \frac{\partial^l}{\partial y^l} \left[(e^{-\xi\rho xy} - \sum_{m=0}^l (-\xi\rho xy)^m (m!)^{-1} \sum_{s=0}^{\infty} (-2\sqrt{-\varepsilon})^s \rho^{-(1+l)} y^{-(1+s)} x^{-(2+s+2l)} \xi^{-(2+s+2l+n)} \right] \right\}_{x=y=1}, \quad (6)$$

де $F(\alpha, \beta, z)$ — вироджена гіпергеометрична функція [26], а коефіцієнт $C(\sqrt{-\varepsilon})$ визначений співвідношенням

$$C(\sqrt{-\varepsilon}) = 1 - 2 \frac{l!}{(1+2l)!} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n a_n^l(\varepsilon|\xi) \xi^{-(1+n)} \left\{ \frac{\partial^l}{\partial y^l} \frac{\partial^n}{\partial x^n} \left[y^{1+2l} \sum_{s=0}^{\infty} (-2\sqrt{-\varepsilon})^s (xy\xi)^{-(1+s)} \right] \right\}_{x=y=1}. \quad (7)$$

Оскільки [26]

$$F(1+l, 2+2l, 2\sqrt{-\varepsilon}\rho) \rightarrow \Gamma(2+2l) [\Gamma(1+l)]^{-1} (2\sqrt{-\varepsilon}\rho)^{-1-l} e^{2\sqrt{-\varepsilon}\rho} \quad (8)$$

при $\rho \rightarrow \infty$, то перший доданок у правій частині рівності (6) приводить до експоненційної розбіжності радіальної функції, що вимагає накладти умову $C(\sqrt{-\varepsilon}) = 0$, яка визначає дискретний енергетичний спектр задачі. Виконавши підсумовування за індексом s та розрахувавши похідні за параметрами x, y , запишімо цю умову в явному вигляді:

$$2 \frac{(l!)^2}{(1+2l)!} \sum_{n=0}^{\infty} a_n^l(\varepsilon|\xi) (1+n+2l)! \sum_{k=0}^l \frac{(n+l-k)! (-\xi)^{l-k}}{k!(l-k)!(1+2l+n-k)!(2\sqrt{-\varepsilon} + \xi)^{1+l+n-k}} = 1. \quad (9)$$

При умові (9) функція $\omega_l(\rho)$ зображається рядом

$$\omega_l(\rho) = -2 \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n a_n^l(\varepsilon|\xi) \xi^{-(1+n+2l)} \times \left\{ \frac{\partial^n}{\partial x^n} \frac{\partial^l}{\partial \rho^l} \frac{\partial^l}{\partial y^l} \left[e^{-\xi \rho x y} - \sum_{m=0}^l (-\xi \rho x y)^m (m!)^{-1} \rho^{-(1+l)} x^{-(1+2l)} (2\sqrt{-\varepsilon} + \xi x y)^{-1} \right] \right\}_{x=y=1}. \quad (10)$$

При $\rho \rightarrow \infty$ у цьому виразі фігурують $e^{-\xi \rho}$ та від'ємні степені змінної ρ , тому він має нульову асимптотику в цій границі.

ІІІ. РОЗРАХУНОК ПОРОГОВИХ ЗНАЧЕНЬ ПАРАМЕТРА ЕКРАНУВАННЯ

Покладаючи в рівнянні (9) $\sqrt{-\varepsilon} = 0$, одержуємо алгебраїчне рівняння, корені якого визначають сім'ю $\xi_{l,k}$ порогових значень параметра екранування, при яких енергетичні рівні $\varepsilon_{l,k}$ переходять у неперервний спектр. При цьому $k \geq 0$ збігається з радіальним квантовим числом, яке визначає кількість вузлів радіальної функції при $\rho \neq 0$.

Як легко переконатися за допомогою прямого числового підрахунку,

$$(-1)^l (1+n+2l)! \sum_{k=0}^l \frac{(-1)^k (n+l-k)!}{k!(1+n+2l-k)!(l-k)!} = \frac{n!(2l)!}{(l!)^2}, \quad (11)$$

тому рівняння (9) при $\sqrt{-\varepsilon} = 0$ набуває вигляду

$$1 = \frac{2}{1+2l} \sum_{n=0}^{\infty} a_n^l(0|\xi) n! \xi^{-1-n}. \quad (12)$$

При цьому рекурентні співвідношення також спрощуються,

$$a_n^l(0|\xi) = -2[n(1+n+2l)]^{-1} \times \sum_{s=0}^{n-1} (-\xi)^s (s!)^{-1} a_{n-s-1}^l(0|\xi), \quad (13)$$

а коефіцієнти $a_n^l(0|\xi)$ є функціями параметра екранування ($a_0^l = 1$). Як видно з формули (13), коефіцієнти $a_n^l(0|\xi)$ є знакозмінними ($a_{2m}^l(0|\xi) > 0$, $a_{2m+1}^l(0|\xi) < 0$, де $m = 0, 1, 2 \dots$), але через наявність факторіальних множників ряди (12) є асимптотичними, що не дозволяє обмежуватися скінченим числом доданків, а рекурентні співвідношення (13) не дають змоги використати стандартні методи підсумовування асимптотичних рядів.

Ми запропонували багатоступеневу процедуру обчислення сум, що фігурують у рівнянні (12), яка ґрунтується на використанні рекурентних співвідношень і дозволяє зобразити праву частину рівняння (12) у вигляді збіжного ряду за оберненими степенями параметра із знакозмінними числовими коефіцієнтами.

Якщо коефіцієнти $a_n^l(0|\xi)$ при $n \geq 1$ виразити через коефіцієнти нижчого порядку згідно із співвідношенням (13), то рівняння (12) трансформується до такого вигляду:

$$1 + 2l = \frac{2}{\xi} + \left(\frac{2}{\xi}\right)^2 \sum_{n \geq 1} \frac{(-1)^n}{1+n+2l} + \left(\frac{2}{\xi}\right)^2 \sum_{n \geq 1} \frac{(-1)^n a_n^l(0|\xi)}{\xi^n} {}_l f_n^{(1)}; \quad (14)$$

$${}_l f_n^{(1)} = \sum_{s \geq n+1} \frac{(-1)^s (s-1)!}{(1+s+2l)[s-(n+1)]!}.$$

На другому етапі знову виразимо $a_n^l(0|\xi)$ через коефіцієнти нижчого порядку, зводячи рівняння (14) до такого:

$$1 + 2l = \frac{2}{\xi} + \left(\frac{2}{\xi}\right)^2 \sum_{n \geq 1} \frac{(-1)^n}{1+n+2l} + \left(\frac{2}{\xi}\right)^3 \sum_{n \geq 1} \frac{{}_l f_n^{(1)}}{n!(1+n+2l)} + \left(\frac{2}{\xi}\right)^3 \sum_{n \geq 1} \frac{(-1)^n a_n^l(0|\xi)}{\xi^n} {}_l f_n^{(2)}; \quad (15)$$

$${}_l f_n^{(2)} = \sum_{m \geq n+1} \frac{{}_l f_m^{(1)}}{m(1+m+2l)[m-(n+1)]!}.$$

Застосовуючи описану процедуру безмежну кількість разів, одержуємо рівняння:

$$1 + 2l = \sum_{n=1}^{\infty} R_n^l \left(\frac{2}{\xi}\right)^n. \quad (16)$$

При цьому

$$\begin{aligned} R_1^l &= 1; \\ R_2^l &= \sum_{m \geq 1} \frac{(-1)^m}{1+m+2l} = \ln 2 - \sum_{m=0}^{2l} \frac{(-1)^m}{1+m}; \\ R_n^l &= \sum_{m \geq 1} \frac{l f_m^{(n-2)}}{m!(1+m+2l)} \text{ при } n \geq 3, \end{aligned} \quad (17)$$

а величини $l f_n^{(r)}$ пов'язані між собою такими рекурентними співвідношеннями:

$$l f_n^{(r+1)} = \sum_{m \geq n+1} \frac{l f_m^{(r)}}{m(1+m+2l)[m-(n+1)]!} \quad (18)$$

при $r \geq 1$.

Як видно з формул (17),(18), коефіцієнти R_n^l є $(n-1)$ -кратними числовими рядами. Їх розрахунок легко звести до обчислення $(n-1)$ -кратних інтегралів за числовим параметром. Використовуючи елементарні зображення

$$s! = \int_0^{\infty} dt e^{-t} t^s, \quad (n+1)^{-1} = \int_0^1 dt_1 t_1^n, \quad (19)$$

вдається виконати підсумовування безмежних числових знакозмінних рядів аналітично. Після наступного інтегрування результату за змінною t одержуємо таке зображення при $n \geq 3$:

$$\begin{aligned} R_n^l &= (-1)^{n+1} (n-3)! (1+2l)^{3-n} \int_0^1 dt_1 t_1^{2l+(n-2)} \int_0^1 dt_2 t_2^{n-4} (1-t_2^{2l+1}) \\ &\times \int_0^1 dt_3 t_3^{n-5} (1-t_3^{2l+1}) \times \dots \times \int_0^1 dt_{n-2} (1-t_{n-2}^{2l+1}) \\ &\times \int_0^1 dt_{n-1} t_{n-1}^{2l} \{ [1+t_1+t_1 t_2 + \dots + t_1 \dots t_{n-2}]^{2-n} - [1+t_1+t_1 t_2 + \dots + t_1 \dots t_{n-1}]^{2-n} \}. \end{aligned} \quad (20)$$

Звичайно, при досить великих значеннях n розрахунок R_n^l виконується чисельними методами, хоч частину інтегралів можна обчислити аналітично.

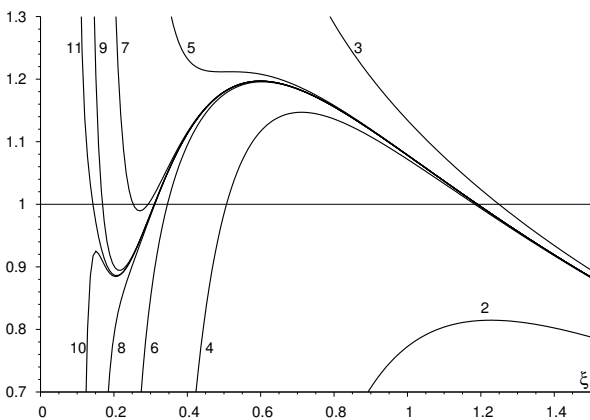


Рис. 1. Залежність функції $\sum_{n=1}^{n_0} R_n^0 \left(\frac{2}{\xi}\right)^n$ від змінної ξ ($2 \leq n_0 \leq 11$).

Таблиця 1, у якій наведено результати комп'ютерного розрахунку коефіцієнтів R_n^l для області $0 \leq l \leq 7$, $2 \leq n \leq 8$, ілюструє добру збіжність цих величин як функцій числа n при фіксованому значен-

ні орбітального квантового числа l . Як видно з таблиці 1, коефіцієнти R_n^l є знакозмінними величинами ($R_{2m+1}^l > 0$, $R_{2m}^l < 0$), їхня абсолютна величина швидко зменшується зі збільшенням n . Для випадку $l = 0$ при $n \geq 2$ їх можна апроксимувати таким виразом:

$$\begin{aligned} R_n^0 &\approx (-1)^{n+1} C_n 10^{3-\frac{3n}{2}}; \quad C_n = c e^{-\alpha(n-b)^2}, \\ c &= 8.7088; \quad \alpha = 0.11439; \quad b = 4.97117. \end{aligned}$$

На рис. 1 наведено залежність функцій $\sum_{n=1}^{n_0} R_n^0 \left(\frac{2}{\xi}\right)^n$ від змінної ξ при зміні числа членів суми ($2 \leq n_0 \leq 11$). Цей рисунок ілюструє залежність точності розрахунку коренів рівняння (16) від числа використаних коефіцієнтів R_n^l . Розраховані як корені рівняння (16) при $n_0 = 20$, порогові значення параметра екранування наведено в таблиці 2.

Порогові значення $\xi_{l,n}$ що відповідають нижчим енергетичним рівням (при заданому l), ми одержали з високою точністю: для стану $1s$ $\xi_{0,0} = 1.190612404\dots$, для стану $2s$ $0.31021033\dots < \xi_{0,1} < 0.31021040\dots$ і т. д. Для порівняння точності розрахунку наведемо значення $\xi_{0,0}$, які отримали інші автори: $\xi_{0,0} = 1.1883$ [9]; 1.190604 [10]; 1.2010 [15]; 1.15 [11]; 1.19047 [13]; 1.190606 [19].

$n \backslash l$	0	1	2	3
2	-0.30685281944	$-1.40186152773 \cdot 10^{-1}$	$-9.01861527733 \cdot 10^{-2}$	$-6.63766289638 \cdot 10^{-2}$
3	0.04522874756	$1.12639413305 \cdot 10^{-2}$	$4.92686546660 \cdot 10^{-3}$	$2.73938566057 \cdot 10^{-3}$
4	$-3.905938145 \cdot 10^{-3}$	$-5.93954069718 \cdot 10^{-4}$	$-1.84662645257 \cdot 10^{-4}$	$-7.93513672203 \cdot 10^{-5}$
5	$2.21359156 \cdot 10^{-4}$	$2.22393166285 \cdot 10^{-5}$	$5.09600255660 \cdot 10^{-6}$	$1.72641671652 \cdot 10^{-6}$
6	$-8.860572789 \cdot 10^{-6}$	$-6.23184751966 \cdot 10^{-7}$	$-1.08445847127 \cdot 10^{-7}$	$-2.94755701182 \cdot 10^{-8}$
7	$2.637732156 \cdot 10^{-7}$	$1.35740550963 \cdot 10^{-8}$	$1.83941187087 \cdot 10^{-9}$	$4.07338849054 \cdot 10^{-10}$
8	$-6.067521897 \cdot 10^{-9}$	$-2.36549700885 \cdot 10^{-10}$	$-2.54964963895 \cdot 10^{-11}$	$-4.66351294097 \cdot 10^{-12}$
9	$1.110724333 \cdot 10^{-10}$	$3.37391114246 \cdot 10^{-12}$	$2.94552966521 \cdot 10^{-13}$	$4.50427939475 \cdot 10^{-14}$
10	$-1.6564872352 \cdot 10^{-12}$	$-4.01193312521 \cdot 10^{-14}$	$-2.88178464518 \cdot 10^{-15}$	$-3.72446799340 \cdot 10^{-16}$
$n \backslash l$	4	5	6	7
2	$-5.24877400749 \cdot 10^{-2}$	$-4.3396830984 \cdot 10^{-2}$	$-3.6986574573 \cdot 10^{-2}$	$-3.22246698119 \cdot 10^{-2}$
3	$1.73887794837 \cdot 10^{-3}$	$1.2003284724 \cdot 10^{-3}$	$8.7787141761 \cdot 10^{-4}$	$6.69734853459 \cdot 10^{-4}$
4	$-4.09893597377 \cdot 10^{-5}$	$-2.3837523931 \cdot 10^{-5}$	$-1.5056485772 \cdot 10^{-5}$	$-1.01064895443 \cdot 10^{-5}$
5	$7.34756358804 \cdot 10^{-7}$	$3.6302533270 \cdot 10^{-7}$	$1.9922970982 \cdot 10^{-7}$	$1.18197957150 \cdot 10^{-7}$
6	$-1.04526892407 \cdot 10^{-8}$	$-4.4218704539 \cdot 10^{-9}$	$-2.1205345125 \cdot 10^{-9}$	$-1.11675038791 \cdot 10^{-9}$
7	$1.21600326530 \cdot 10^{-10}$	$4.4364332985 \cdot 10^{-11}$	$1.8690292234 \cdot 10^{-11}$	$8.77330194023 \cdot 10^{-12}$
8	$-1.18291845339 \cdot 10^{-12}$	$-3.7470308834 \cdot 10^{-13}$	$-1.3937819662 \cdot 10^{-13}$	$-5.85422438074 \cdot 10^{-14}$
9	$9.79098063328 \cdot 10^{-15}$	$2.7095507633 \cdot 10^{-15}$	$8.9409481504 \cdot 10^{-16}$	$3.37280665876 \cdot 10^{-16}$
10	$-6.99206771357 \cdot 10^{-17}$	$-1.7003220109 \cdot 10^{-17}$	$-4.9995225012 \cdot 10^{-18}$	$-1.69978699897 \cdot 10^{-18}$
$n \backslash l$	8	9	10	11
2	$-2.85481992236 \cdot 10^{-2}$	$-2.56242226154 \cdot 10^{-2}$	$-2.32432702345 \cdot 10^{-2}$	$-2.12669856496 \cdot 10^{-2}$
3	$5.27666966649 \cdot 10^{-4}$	$4.26413854005 \cdot 10^{-4}$	$3.51723397125 \cdot 10^{-4}$	$2.95059570659 \cdot 10^{-4}$
4	$-7.10772472155 \cdot 10^{-6}$	$-5.18657113003 \cdot 10^{-6}$	$-3.89956029551 \cdot 10^{-6}$	$-3.00530713989 \cdot 10^{-6}$
5	$7.44649199051 \cdot 10^{-8}$	$4.92052159932 \cdot 10^{-8}$	$3.38002017045 \cdot 10^{-8}$	$2.39770992846 \cdot 10^{-8}$
6	$-6.32384697149 \cdot 10^{-10}$	$-3.79433194318 \cdot 10^{-10}$	$-2.38665716985 \cdot 10^{-10}$	$-1.56129717275 \cdot 10^{-10}$
7	$4.48001861832 \cdot 10^{-12}$	$2.44719189286 \cdot 10^{-12}$	$1.41257006888 \cdot 10^{-12}$	$8.53715062358 \cdot 10^{-13}$
8	$-2.70410806517 \cdot 10^{-14}$	$-1.34816281608 \cdot 10^{-14}$	$-7.15616025802 \cdot 10^{-15}$	$-4.00272102492 \cdot 10^{-15}$
9	$1.41342051235 \cdot 10^{-16}$	$6.44723150686 \cdot 10^{-17}$	$3.15343492471 \cdot 10^{-17}$	$1.63520652358 \cdot 10^{-17}$
10	$-6.48082726217 \cdot 10^{-19}$	$-2.71099357644 \cdot 10^{-19}$	$-1.22421795789 \cdot 10^{-19}$	$-5.89493397209 \cdot 10^{-20}$

Таблиця 1. Числові значення коефіцієнтів R_n^l у рівнянні (16).

$n \backslash l$	0	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1.1906124								
2	0.310210	0.220216							
3	0.139451	0.112714	0.091349						
4	0.07882	0.067884	0.058106	0.049831					
5	0.050577	0.045187	0.040024	0.035389	0.031344				
6	0.035183	0.032176	0.029167	0.02635	0.023799	0.021525			
7	0.02588	0.024049	0.022162	0.020342	0.018646	0.017094	0.015691		
8	0.019826	0.018642	0.017391	0.016157	0.014981	0.013883	0.012872	0.011945	
9	0.015672	0.014868	0.014001	0.01313	0.012286	0.011486	0.010736	0.01004	0.009396

Таблиця 2. Порогові значення параметра екранування $\zeta_{n,l}$ ($\zeta_{n,l} = \xi_{l,k}$ при $n = 1 + l + k$) для станів із квантовими числами $0 \leq l \leq 7, 1 \leq n \leq 8$, де n – головне квантове число.

IV. РІВНЯННЯ ДЛЯ СПЕКТРА В ОКОЛІ ПОРОГОВИХ ЗНАЧЕНЬ ПАРАМЕТРА ЕКРАНУВАННЯ

В околі порогових значень параметра екранування рівняння (9) при $\sqrt{-\varepsilon_l} \neq 0$ також можна трансформувати до такої форми, у якій не будуть фігурувати коефіцієнти $a_n^l(\varepsilon|\xi)$. Враховуючи рівність (11), перевишімо рівняння (9) так:

$$\frac{2}{1+2l} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n^l(\varepsilon|\xi) A_n^l(x_l) n!}{(2\sqrt{-\varepsilon_l} + \xi)^{n+1}} = 1. \quad (21)$$

Тут уведено коефіцієнти $A_n^l(x_l)$ згідно з таким співвідношенням:

$$A_n^l(x_l) = \frac{(l!)^2 (1+n+2l)!}{(2l)! n!} \times \sum_{k=0}^l (-1)^{l+k} \frac{(n+l-k)! x_l^{l-k}}{k!(l-k)!(1+n+2l-k)!}, \quad (22)$$

$$x_l = \frac{\xi}{2\sqrt{-\varepsilon_l} + \xi}.$$

Коефіцієнт $A_n^l(x_l)$ при $l = 0$ дорівнює одиниці, а при $l \neq 0$ він є функцією параметра екранування та енергії. В околі $\xi = \xi_l$ він близький до одиниці, як і параметр x_l ($x_l = 1$, $A_n^l(x_l) = 1$ при $\sqrt{-\varepsilon_l} = 0$). Щоб позбутися коефіцієнтів $a_n^l(\varepsilon|\xi)$ у рівнянні (21), використаємо рекурентні співвідношення у формі (5). Покажімо це на прикладі енергетичних рівнів для випадку $l = 0$, коли рівняння (21) набуває такого вигляду:

$$1 = \sum_{n \geq 1} y^n R_n^0(x) + \sqrt{-\varepsilon_0} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n+1)!}{n+2} a_n^0(\varepsilon_0|\xi) y^{n+2} 2^{-n} - \sqrt{-\varepsilon_0} \sum_{n \geq 1} \sum_{m \geq 0} y^{n+2+m} (-1)^m 2^{-m} \times \frac{a_m^0(\varepsilon_0|\xi)}{m+2} f_{m+1}^{(n)}(x). \quad (23)$$

У цьому рівнянні використано такі позначення:

$$y = 2(\xi + 2\sqrt{-\varepsilon_0})^{-1} = \frac{2}{\xi} x, \quad x = \xi(\xi + 2\sqrt{-\varepsilon_0})^{-1}; \quad (24)$$

коефіцієнти $R_n^0(x)$ є аналогами R_n^0 з рівняння (16) і збігаються з ними у границі $\sqrt{-\varepsilon_0} = 0$ ($x = 1$):

$$R_1^0(x) = 1; \quad (25)$$

$$R_2^0(x) = \sum_{s \geq 1} (-1)^s \frac{x^{s-1}}{s+1} = x^{-2} \{\ln(1+x) - x\};$$

$$R_n^0(x) = \sum_{m \geq 1} \frac{x^{m-1}}{(m+1)!} f_m^{(n-2)}(x) \quad \text{при } n \geq 3;$$

тут $f_m^{(r)}(x)$ — функціональні ряди — аналоги числових рядів, що фігурують у формулах (14)–(18):

$$f_m^{(1)}(x) = \sum_{s \geq m+1} \frac{(-1)^s s! x^{s-(m+1)}}{s(s+1)[s-(m+1)]!} \quad \text{при } m \geq 1; \quad (26)$$

$$f_m^{(i+1)}(x) = \sum_{s \geq m+1} \frac{x^{s-(m+1)} f_s^{(i)}(x)}{s(s+1)[s-(m+1)]!} \quad \text{при } i \geq 1.$$

Рівняння (23) є точним, і його можна використати для розрахунку залежності ε_0 від ξ в усій області $0 \leq \xi \leq \xi_0$. При $x = 1$ воно збігається з рівнянням (16) при $l = 0$.

Однак для дослідження енергетичного спектра в околі порогових значень параметра екранування зручно використати розклади за степенями $\sqrt{-\varepsilon_l}$ безпосередньо в рівнянні (21):

$$1 + 2l - 2 \sum_{n \geq 0} n! \frac{a_n^l(0|\xi)}{\xi^{1+n}} = \sqrt{-\varepsilon_l} C_1^l(\xi) + (\sqrt{-\varepsilon_l})^2 C_2^l(\xi) + \dots, \quad (27)$$

де

$$C_1^l(\xi) = \frac{\partial}{\partial \sqrt{-\varepsilon_l}} \left\{ 2 \sum_{n=0}^{\infty} n! \frac{a_n^l(\varepsilon_l|\xi) A_n^l(x_l)}{(\xi + 2\sqrt{-\varepsilon_l})^{1+n}} \right\} \quad \text{при } \sqrt{-\varepsilon_l} = 0,$$

$$C_2^l(\xi) = \frac{\partial^2}{\partial (\sqrt{-\varepsilon_l})^2} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} n! \frac{a_n^l(\varepsilon_l|\xi) A_n^l(x_l)}{(\xi + 2\sqrt{-\varepsilon_l})^{1+n}} \right\} \quad \text{при } \sqrt{-\varepsilon_l} = 0, \dots \quad (28)$$

Розгляньмо коефіцієнт $C_1^l(\xi)$. Виконуючи диференціювання у явному вигляді, одержуємо:

$$C_1^l(\xi) = 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n!}{\xi^{n+2}} \times \{ b_n^l(\xi) \xi - (1+n) a_n^l(0|\xi) - 2B_n^l a_n^l(0|\xi) \}, \quad (29)$$

де

$$b_n^l(\xi) = \frac{\partial}{\partial \sqrt{-\varepsilon_l}} a_n^l(\varepsilon_l|\xi) \quad \text{при } \sqrt{-\varepsilon_l} = 0, \quad (30)$$

$$B_n^l = \frac{\partial}{\partial x_l} A_n^l(x_l)|_{x_l=1} = \begin{cases} 0 & \text{при } l = 0; \\ -\frac{1}{2}(n+1) & \text{при } l \neq 0. \end{cases}$$

Оскільки

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{n!}{\xi^{n+1}} b_n^l(\xi) = \left\{ \frac{\partial}{\partial \sqrt{-\varepsilon_l}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n! a_n^l(\varepsilon|\xi)}{\xi^{1+n}} \right\}_{\sqrt{-\varepsilon_l}=0} = 0 \quad (31)$$

як при $l = 0$, так і при $l \neq 0$, то

$$C_1^0(\xi) = -2 \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)! \frac{a_n^0(0|\xi)}{\xi^{n+2}},$$

$$C_1^l(\xi) = 0 \quad \text{при } l \neq 0. \quad (32)$$

Враховуючи рівняння (12), (16), ліву частину рівняння (27) у границі $\xi \rightarrow \xi_l$ запишемо у вигляді

$$-(\xi_l - \xi) \sum_{n \geq 1} n R_n^l \left\{ \frac{2}{\xi_l} \right\}^{n+1}. \quad (33)$$

Звідси випливає, що асимптотика $\sqrt{-\varepsilon_0}$ є лінійною функцією змінної $(\xi_0 - \xi)$, а саме

$$\begin{aligned} \sqrt{-\varepsilon_0} &= (\xi_0 - \xi) \left\{ 2 \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)! \frac{a_n^0(0|\xi_0)}{\xi_0^{n+2}} \right\}^{-1} \\ &\times \sum_{n \geq 1} n R_n^0 \left\{ \frac{2}{\xi_0} \right\}^{n+1}. \end{aligned} \quad (34)$$

У випадку $l \neq 0$ маємо параболічну залежність

$$\begin{aligned} \sqrt{-\varepsilon_l} &= (\xi_l - \xi)^{1/2} \left\{ -C_2^l(\xi_l) \right\}^{-1/2} \\ &\times \left\{ \sum_{n \geq 1} n R_n^l \left\{ \frac{2}{\xi_l} \right\}^{n+1} \right\}^{1/2}. \end{aligned} \quad (35)$$

При цьому $\xi_0 = \xi_{0,k}$, $\xi_l = \xi_{l,k}$, де $\{\xi_{0,k}\}$, $\{\xi_{l,k}\}$ — сукупність коренів рівняння (16) при $l = 0$ та $l \neq 0$ відповідно. Особливості асимптотики енергетичних рівнів в околі порогових значень параметра екранування, що визначаються формулами (33), (34), були виявлені в роботі авторів [24] на прикладі станів, які описуються безвузловими функціями $(1s, 2p, 3d, 4f, \dots)$, за допомогою іншого способу наближеного розрахунку спектра.

V. ЗАЛЕЖНІСТЬ ЕНЕРГЕТИЧНИХ РІВНІВ ВІД ПАРАМЕТРА ЕКРАНУВАННЯ

Рекурентні співвідношення (5) є системою однорідних лінійних алгебраїчних рівнянь, а умова існування розв'язків цієї системи дає рівняння для знаходження см'ї енергетичних рівнів при заданому l

$$\begin{vmatrix} d_1^l & -1 & 0 & 0 & \dots \\ \frac{\xi}{1!} c_2^l & d_2^l & -1 & 0 & \dots \\ -\frac{\xi^2}{2!} c_3^l & \frac{\xi}{1!} c_3^l & d_3^l & -1 & \dots \\ \frac{\xi^3}{3!} c_4^l & -\frac{\xi^2}{2!} c_4^l & \frac{\xi}{1!} c_4^l & d_4^l & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = 0, \quad (36)$$

де $c_n^l = 2[n(n+1+2l)]^{-1}$, $d_n^l = c_n^l[(n+l)\sqrt{\varepsilon_l} - 1]$. Використовуючи це рівняння, знайдемо залежність від ξ енергетичних рівнів збуджених станів (залежність енергії основного рівня від параметра ξ наведена у праці авторів [24]). Оскільки параметр ξ для цих станів є малим ($0 \leq \xi \leq 2(\varepsilon l)^{-1}(l+1)^{-1}$), то розв'язки можна зобразити у вигляді розкладів за степенями ξ , обмежуючись детермінантом скінченного порядку в рівнянні (36). Таке наближення цілком еквівалентне умові $a_{n_0}^l(\varepsilon|\xi) = 0$ і відповідає теорії збурень. Якщо n_0 досить велике число, то коефіцієнти $a_n(\varepsilon|\xi)$ при $n \geq n_0 + 1$ є малими:

$$\begin{aligned} a_{n_0+1}^l(\varepsilon|\xi) &= c_{n_0+1}^l \xi \sum_{s=0}^{n_0-1} \frac{(-\xi)^s}{(s+1)!} a_{n_0-1-s}^l(\varepsilon|\xi), \\ a_{n_0+2}^l(\varepsilon|\xi) &= c_{n_0+2}^l \left\{ [\sqrt{-\varepsilon}(n_0+2+l)] a_{n_0+1}^l(\varepsilon|\xi) \right. \\ &\quad \left. - \xi^2 \sum_{s=0}^{n_0-1} \frac{(-\xi)^s}{(s+2)!} a_{n_0-1-s}^l(\varepsilon|\xi) \right\}, \dots \end{aligned} \quad (37)$$

Тому наближено ряд (4) можна зобразити поліномом степеня $n_0 - 1$.

Корені рівняння (36) або рівняння $a_{n_0}^l(\varepsilon|\xi) = 0$ запишемо у вигляді рядів:

$$[-\varepsilon_{l,k}(\xi)]^{1/2} = \sum_{s=0}^{s_0} (-\xi)^s b_{l,k}^{(s)}, \quad (38)$$

де $k = 0, 1, 2, \dots$ — радіальне квантове число. У формулі (38) всі коефіцієнти $b_{l,k}^{(s)}$ — додатні, так що цей ряд — знакозмінний. Наведемо тут явні вирази для коефіцієнтів $b_{l,k}^{(s)}$, які одержали з умови $a_{12}^l(\varepsilon|\xi) = 0$:

$$\begin{aligned} b_{l,k}^{(0)} &= (1+l+k)^{-1}; \quad b_{l,k}^{(1)} = 1+l+k; \\ b_{l,k}^{(2)} &= \frac{1}{4} (1+l+k) \{ (1+l+k)(1+k) + kl \}; \\ b_{l,k}^{(3)} &= \frac{1}{6} (1+l+k)^3 \left\{ \frac{1}{2} + (1+l+k)^2 \right\}, \dots \end{aligned} \quad (39)$$

Ряди (38) є напівзбіжними (асимптотичними): сума $\sum_{s=0}^{s_0} (-\xi)^s b_{l,k}^{(s)}$ є збіжною послідовністю, яка прямує до функції $\sqrt{-\varepsilon_{l,k}(\xi)}$, коли s_0 не перевищує деякого значення, а при дальшому збільшенні s_0 така сума все більше відхиляється від згаданої функції. Оптимальне значення s_0 для заданих квантових чисел (l, k) виберемо з умови, щоб порогове значення параметра екранування для рівня $\xi_{l,k}$, визначене як корінь рівняння

$$\{-\varepsilon_{l,k}(\xi)\}^{1/2} = 0, \quad (40)$$

було близьким до значення, отриманого з рівняння (16), або ж до значення, одержаного при чисельному інтегруванні рівняння Шредингера (див. [19]). Таким способом знаходимо значення $s_0 = 3$. У цьому наближенні одержані значення енергії близькі до результатів роботи [19], а $\xi_{l,k}$ — до значень, наведених у таблиці 2. Формула (38) тим точніше описує залежність енергетичних рівнів від параметра ξ , чим більші значення радіального квантового числа k . Відхилення величин $\xi_{l,k}$, знайдених за рівнянням (40), від аналогічних величин, одержаних у роботі [19], є тим меншими, чим більші значення квантового числа k , що ілюструє таблиця 3. Щоб отримати достатньо точні апроксимаційні формули, що визначають залежність енергетичних рівнів від параметра ξ також для малих значень квантового числа k , ми ввели у формулі (38) коригуючий множник до коефіцієнта $b_{l,k}^{(3)}$ згідно з правилом:

$$b_{l,k}^{(3)} \rightarrow \tilde{b}_{l,k}^{(3)} = \alpha(l,k)b_{l,k}^{(3)}. \quad (41)$$

Множник $\alpha(l,k)$ вибрано з умови, щоби дійсний додатний корінь рівняння

$$(-\varepsilon_{l,k}(\xi))^{1/2} = \sum_{s=0}^2 (-1)^s \xi^s b_{l,k}^{(s)} - \xi^3 \tilde{b}_{l,k}^{(3)} = 0 \quad (42)$$

був близьким до значення $\xi_{l,k}$ з таблиці 2:

$$\begin{aligned} \alpha(0,k) &= \frac{2}{5}; \quad k \geq 0; \\ \alpha(l,k) &= \frac{2+l-k}{1+1/3(1+l-k)} \quad \text{при } k \leq l, \quad l \geq 1; \\ \alpha(l,k) &= 1 \quad \text{при } k > l, \quad l \geq 1. \end{aligned} \quad (43)$$

Рівняння (42) має єдиний додатний дійсний корінь

$$\xi_{l,k} = \frac{D_{l,k}^2 - 4(3b_{l,k}^{(1)}\tilde{b}_{l,k}^{(3)} - (b_{l,k}^{(2)})^2) + 2D_{l,k}b_{l,k}^{(2)}}{6\tilde{b}_{l,k}^{(3)}D_{l,k}}, \quad (44)$$

де

$$\begin{aligned} A_{l,k} &= 4b_{l,k}^{(0)}(b_{l,k}^{(2)})^3 + 27(b_{l,k}^{(0)}\tilde{b}_{l,k}^{(3)})^2 - 18b_{l,k}^{(0)}b_{l,k}^{(1)}b_{l,k}^{(2)}\tilde{b}_{l,k}^{(3)}; \\ B_{l,k} &= 4(b_{l,k}^{(1)})^3\tilde{b}_{l,k}^{(3)} - (b_{l,k}^{(1)}b_{l,k}^{(2)})^2; \\ D_{l,k} &= \left\{ 2A_{l,k} + 12\tilde{b}_{l,k}^{(3)}\sqrt{3(B_{l,k} + A_{l,k})} \right\}^{\frac{1}{3}}. \end{aligned}$$

Асимптотичні формули (38)–(44) зручні для використання у практичних розрахунках у всій області зміни параметра екранування.

Як видно з таблиці 3, порогові значення параметра екранування при фіксованому $l = l_0$ утворюють монотонно спадну послідовність $\zeta_{l_0,k}$ ($k \geq 0$), а при фіксованому $k = k_0$ – таку ж послідовність ζ_{l,k_0} ($l \geq 0$). Таку ж залежність від квантових чисел n, l мають і величини $\zeta_{n,l}$ (див. таблицю 2). Тому для них виконуються нерівності $\zeta_{n_2,l_2} > \zeta_{n_1,l_1}$ при $n_2 > n_1, l_2 < l_1$, що відповідає перетинів збуджених енергетичних рівнів поблизу порогових значень параметра екранування. Максимальне число перетинів виникає при $l_2 = 0$, наприклад:

$$\zeta_{6,0} > \zeta_{5,4}, \quad \zeta_{7,0} > \zeta_{6,l} \quad (l = 4, 5),$$

$$\zeta_{8,5} > \zeta_{7,l} \quad (l = 4, 5, 6), \quad \zeta_{9,0} > \zeta_{8,l} \quad (l = 4, 5, 6, 7),$$

$$\zeta_{10,0} > \zeta_{9,l} \quad (l = 4, 5, 6, 7, 8), \quad \zeta_{10,1} > \zeta_{9,l} \quad (l = 6, 7, 8),$$

$$\zeta_{10,0} > \zeta_{8,7} \quad \text{і т. д.}$$

Чим більше значення n_2 , тим з більшою кількістю енергетичних рівнів перетинається рівень з квантовими числами n_2, l_2 , що ілюструє рисунок 2.

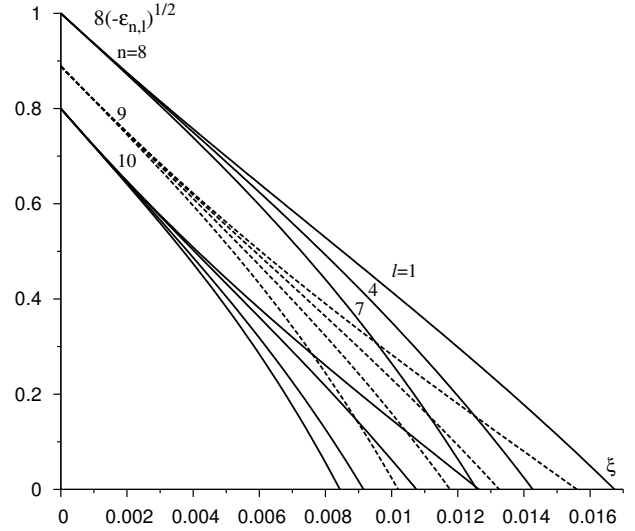


Рис. 2. Перетин енергетичних рівнів для квантових чисел $n = 8$ ($l = 1, 4, 7$), $n = 9$ ($l = 0, 1, 4, 7$), $n = 10$ ($l = 0, 1, 5, 7$).

VI. ВИСНОВКИ

Шляхом точного багатократного підсумовування асимптотичних рядів ми отримали рівняння, корені якого визначають сукупність порогових значень безрозмірного параметра екранування $\xi_{l,k}$ ($k \geq 0$) для стану із заданим значенням орбітального квантового числа l з точністю, яка набагато перевищує точність розрахунку аналогічних величин за допомогою чисельного інтегрування рівняння Шредінгера (див., наприклад, роботу [19], яка дотепер вважається еталоном). Точність наших розрахунків обмежена лише необхідністю комп'ютерного обчислення багатократних інтегралів R_n^l (ф.(20)) – безрозмірних числових коефіцієнтів згаданого рівняння. Підсумовування асимптотичних рядів дало змогу дослідити також особливості асимптотики енергетичних рівнів в околі точок $\xi = \xi_{l,k}$: $\sqrt{-\varepsilon_{0,k}} \sim (\xi_{0,k} - \xi)$, $\sqrt{-\varepsilon_{l,k}} \sim (\xi_{0,k} - \xi)^{1/2}$ при $l \neq 0$. За допомогою асимптотичних рядів ми зобразили залежність енергетичних рівнів від параметра ξ . Відхилення значень енергії відповідних рівнів від результатів роботи [19] є невеликим, про що свідчать розрахунки значень $\xi_{l,k}$ в цьому наближенні (таблиця 2). Ми запропонували також апроксимаційну формулу, яка відображає залежність енергетичних рівнів від ξ , що видно з розрахунків $\xi_{l,k}$ (див. таблицю 3). Формула (34) дає змогу визначити порогові значення параметра екранування для довільних значень квантових чисел l, k (або n, l) і підтверджує явище перетину енергетичних рівнів для збуджених станів електрона в полі екранованого заряду. Можливість аналітичного зображення радіальної хвильової функції в аналітичному вигляді є також однією з переваг нашого підходу, який можна узагальнити на довільні потенціали типу $V(r) = -\frac{q}{r}f(r)$, де $f(r)$ – є цілою функцією змінної r , де $f(r) \rightarrow 1$ при $r \rightarrow 0$ і має будь-яку асимптотику при $r \rightarrow \infty$.

$\begin{matrix} k \\ \backslash \\ l \end{matrix}$	0	1	2	3	4	5	6	7
0	1184.584	310.4832	139.3906	78.69391	50.45041	35.06782	25.77871	19.74410
1	217.8819	112.9092	65.18484	42.25079	29.54917	21.80386	16.74105	13.25344
2	94.04116	56.29368	40.70442	28.77046	21.37209	16.48342	13.09061	10.64262
3	51.96788	34.91643	25.25492	20.77567	16.12105	12.85863	10.48761	8.712486
4	32.86438	23.74828	18.02752	14.26748	12.57002	10.29240	8.576054	7.252098
5	22.62643	17.19096	13.52967	10.97334	9.153806	8.415329	7.135576	6.123907
6	16.51518	13.01650	10.53393	8.721701	7.373631	6.366969	6.025459	5.236095
7	12.57971	10.19629	8.436261	7.106510	6.084784	5.292788	4.682990	4.525923
8	9.898454	8.202219	6.909483	5.905570	5.114412	4.484794	3.982730	3.588361
9	7.990433	6.740561	5.763312	4.987129	4.362721	3.855621	3.441741	3.104997
10	6.584788	5.637388	4.880780	4.268447	3.767334	3.353611	3.010022	2.724280
11	5.519587	4.784396	4.186706	3.695222	3.287114	2.945505	2.657835	2.414806
12	4.693218	4.111290	3.630953	3.230529	2.893842	2.608680	2.365751	2.157986
13	4.039313	3.570832	3.179031	2.848509	2.567550	2.327143	2.120306	1.941615
14	3.513044	3.130330	2.806577	2.530599	2.293743	2.089246	1.911786	1.757154
15	3.083247	2.766576	2.495981	2.263184	2.061679	1.886313	1.732973	1.598361
16	2.727717	2.462723	2.234259	2.036087	1.863245	1.711749	1.578382	1.460533
17	2.430287	2.206309	2.011663	1.841580	1.692219	1.560463	1.443766	1.340041
18	2.178959	1.987949	1.820763	1.673703	1.543760	1.428466	1.325787	1.234038
19	1.964677	1.800470	1.655812	1.527802	1.414054	1.312596	1.221785	1.140251
20	1.780506	1.638311	1.512309	1.400197	1.300064	1.210317	1.129620	1.056849
$\begin{matrix} k \\ \backslash \\ l \end{matrix}$	8	9	10	11	12	13	14	15
0	15.60423	12.64172	10.44910	8.781045	7.482669	6.452300	5.620957	4.940500
1	10.75041	8.893929	7.479329	6.376880	5.501148	4.794023	4.214874	3.734603
2	8.819819	7.426736	6.338546	5.472558	4.772273	4.198037	3.721368	3.321386
3	7.350152	6.282484	5.430604	4.740266	4.173205	3.701813	3.305779	2.969898
4	6.210294	5.376329	4.698705	4.140859	3.676273	3.285353	2.953371	2.669091
5	5.311014	4.648457	4.101601	3.645177	3.260414	2.933145	2.652521	2.410124
6	4.590510	4.056125	3.609018	3.231321	2.909486	2.633092	2.394026	2.185897
7	4.005182	3.568339	3.198473	2.882689	2.611026	2.375700	2.170557	1.990684
8	3.523712	3.162292	2.853071	2.586564	2.355331	2.153466	1.976244	1.819843
9	2.837036	2.820961	2.559958	2.333112	2.134778	1.960419	1.806358	1.669593
10	2.488374	2.299146	2.309245	2.114648	1.943333	1.791768	1.657064	1.536834
11	2.209787	2.038711	1.900889	1.925113	1.776175	1.643647	1.525231	1.419015
12	1.980093	1.828357	1.700758	1.597809	1.629425	1.512908	1.408289	1.314019
13	1.786884	1.652979	1.537776	1.440362	1.361830	1.396976	1.304113	1.220084
14	1.622034	1.503847	1.400684	1.311330	1.235488	1.174512	1.210938	1.135736
15	1.479833	1.375283	1.283074	1.202021	1.131447	1.071406	1.023342	1.059732
16	1.356078	1.263296	1.180812	1.107561	1.042803	0.986187	0.937963	0.899584
17	1.247570	1.164942	1.091005	1.024836	0.965734	0.913240	0.867202	0.827981
18	1.151819	1.077967	1.011518	0.951682	0.897831	0.849497	0.806401	0.768518
19	1.066845	1.000601	0.940712	0.886504	0.837427	0.793044	0.753045	0.717267
20	0.991052	0.931428	0.877295	0.828078	0.783301	0.742570	0.705582	0.672130

Таблиця 3. Порогові значення параметра екранування $\xi_{l,k} \cdot 10^3$, розраховані за формулами (38)–(41), для станів з квантовими числами $0 \leq l \leq 20$, $0 \leq k \leq 15$.

-
- [1] А. Г. Ситенко, *Лекции по теории рассеяния* (Вища школа, Киев, 1971).
- [2] Ф. Калоджеро, *Метод фазовых функций в теории потенциального рассеяния* (Мир, Москва, 1972).
- [3] В. Д. Крефт, Д. Кремп, В. Эбелинг, Г. Рёпке, *Квантовая статистика систем заряженных частиц* (Мир, Москва, 1988).
- [4] Г. Месси, *Отрицательные ионы* (Мир, Москва, 1979).
- [5] О. Г. Ситенко, В. К. Тартаковский, *Теория ядра* (Либідь, Київ, 2000).
- [6] І. О. Вакарчук, *Теорія зоряних спектрів* (Львів, 2002).
- [7] І. О. Вакарчук, *Квантова механіка* (Львів, 2007).
- [8] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика* (Наука, Москва, 1989).
- [9] R. G. Sach, M. Goerpert-Mayer, Phys. Rev. **53**, 991 (1938).
- [10] L. Hulthen, K. V. Laurikainen, Rev. Mod. Phys. **23**, 1 (1951).
- [11] G. M. Harris, Phys. Rev. **125**, 1131 (1962).
- [12] C. R. Smith, Phys. Rev. **134**, A1235 (1964).
- [13] H. M. Schey, J. L. Schwartz, Phys. Rev. **139**, B1428 (1965).
- [14] Б. А. Трубников, Ю. Н. Явлинский, Журн. эксп. теор. физ. **48**, 1618 (1965).
- [15] C. Lovelace, D. Masson, Nuovo Cimento **26**, 472 (1962).
- [16] K. M. Roussel, R. F. O'Connell, Phys. Rev. A **9**, 52 (1974).
- [17] J. McEnnan, L. Kissel, R. H. Pratt, Phys. Rev. A **13**, 532 (1976).
- [18] C. A. Rouse, Phys. Rev. **159**, 41 (1967).
- [19] F. J. Rogers, H. C. Graboske, P. J. Harwood, Phys. Rev. A **1**, 1577 (1970).
- [20] S. H. Ikhdair, R. Sever, J. Math. Chem. **41**, 343 (2007).
- [21] R. Dutt *et al.*, J. Phys. A **18**, 1379 (1985).
- [22] Y. P. Varshni, Phys. Rev. A **41**, 4682 (1990).
- [23] О. С. Павлова, А. Р. Френкин, Теор. мат. физ. **125**, 242 (2000).
- [24] М. В. Ваврух, Н. Л. Тишко, О. М. Стельмах, Р. І. Коритко, Журн. фіз. досл. **12**, 3002 (2008).
- [25] М. В. Ваврух, Укр. фіз. журн. **18**, 2007 (1973).
- [26] И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений* (Наука, Москва, 1971).

**LOCALIZED STATES OF THE ELECTRON IN THE SCREENED FIELD:
THE APPLICATION OF ASYMPTOTIC SERIES**

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

The analytical relations which determine a dependence of energy levels and radial wave functions on the screening parameter were obtained using the asymptotic series. The critical values of the screening parameter which determines the transitions of discrete levels of the energy spectrum to continuum were calculated. The phenomena of the crossover of energy levels was also studied.