

© 1992 г. В. С. Попов, А. В. Сергеев*, А. В. Щерблюкин

О СТРУКТУРЕ ВЫСШИХ ПОРЯДКОВ $1/n$ -РАЗЛОЖЕНИЯ

Найден вид асимптотики высших порядков $1/n$ -разложения в задачах квантовой механики. Показано, что коэффициенты $1/n$ -разложения $\epsilon^{(k)}$ факториально возрастают пропорционально $k!a^k$ при $k \rightarrow \infty$, и исследована зависимость параметра a от константы связи. Полученные аналитические формулы согласуются с численными расчетами. В качестве примеров рассмотрены потенциалы Юкавы, Хюльгена и воронки, а также эффект Штарка в атоме водорода и молекулярный ион H_2^+ .

1. Среди новых методов квантовой механики особое место занимает $1/n$ -разложение (см., например, [1–14]), которое весьма эффективно для высоковозбужденных (ридберговских) состояний атомов и молекул, в том числе при рассмотрении эффектов в сильных внешних полях [3, 5–7]. Далее рассматривается вариант этого метода, предложенный в [4], характерной особенностью которого является возможность его применения не только в случае дискретного спектра, но и для квазистационарных состояний (резонансов). Значения энергии, комплексные в последнем случае ($E_{nl} = E_r - i\Gamma/2$), представляются в виде рядов по степеням «малого параметра» $1/n$:

$$\epsilon \equiv \epsilon' - i\epsilon'' = \epsilon^{(0)} + \frac{\epsilon^{(1)}}{n} + \dots + \frac{\epsilon^{(k)}}{n^k} + \dots, \quad (1)$$

где $n = n_r + l + 1$ — главное квантовое число, l — орбитальный момент, $\epsilon = 2n^2 E_{nl}$ — приведенная энергия уровня, $\epsilon'' = n^2 \Gamma_{nl}$, k — порядок $1/n$ -разложения.

Поведение коэффициентов $\epsilon^{(k)}$ при $k \gg 1$ имеет помимо теоретического интереса существенное значение при вычислении энергии с высокой точностью на основе разложения (1). Как известно, расходимость рядов обычной теории возмущений (ТВ) связана с нестабильностью вакуумного состояния при изменении знака константы связи g (так называемый феномен Дайсона, впервые рассмотренный [15] в квантовой электродинамике и позднее установленный также для ангармонического осциллятора [16–18], эффектов Штарка [19–21] и Зеемана [22] и других квантовомеханических задач [23–25]). При этом оказалось, что асимптотика высших порядков ТВ, как правило, имеет вид

$$E_k \approx (k\alpha)! a^k k^\beta \left(c_0 + \frac{c_1}{k} + \frac{c_2}{k^2} + \dots \right), \quad k \rightarrow \infty, \quad (2)$$

$$E(g) = \sum_{k=0}^{\infty} E_k g^k, \quad (2a)$$

где $\alpha > 0$, β , a и т. д. — вычисляемые константы.

* Государственный оптический институт им. С. И. Вавилова.

При переходе от ТВ к $1/n$ -разложению (1) параметром разложения вместо g становится $1/n$, не входящий в гамильтониан в явном виде; при этом коэффициенты $\epsilon^{(k)}$ в отличие от высших порядков ТВ являются сложными функциями g . Поэтому требуется некоторое изменение аргументов Дайсона, которое и будет дано ниже.

2. Асимптотика высших порядков $1/n$ -разложения (численные расчеты). Используя рекуррентные соотношения (см. [8, 14]), мы вычисляли 30–50 коэффициентов $\epsilon^{(k)}$, проверяли их выход на асимптотику (2) и определили ее параметры. Такие вычисления были проведены для следующих задач: потенциал воронки

$$V(r) = -r^{-1} + gr, \quad g > 0, \quad (3)$$

и его обобщение

$$V(r) = -r^{-1} + (g/N)r^N, \quad (3a)$$

экранированный кулоновский потенциал

$$V(r) = -r^{-1}f(x), \quad x = \mu r \quad (4)$$

(μ^{-1} – характерный радиус экранировки, $\hbar = m = e = 1$), эффект Штарка в атоме водорода и его сферическая модель (что отвечает замене $g \rightarrow -g$ в формуле (3)). Эти примеры охватывают широкий класс потенциалов, встречающихся в физике, в том числе короткодействующие потенциалы Юкавы и Хюльтена, потенциал с удержанием (3), часто используемый в квантовой хромодинамике, и потенциалы, обладающие барьером.

Во всех случаях оказалось, что $\alpha = 1$, т. е. асимптотика факториальная. Представляет интерес зависимость числа a , входящего в формулу (2), от параметров задачи. Для потенциалов (4) подходящим параметром является [4] $\nu = n^2\mu$, причем $\mu = g^{1/2}$ в случае (3), $\mu = g^{1/(N+1)}$ и $f(x) = 1 - N^{-1}x^{N+1}$ для (3a). Наконец, для эффекта Штарка $\nu = n^2\mathcal{E}^2 \equiv F^2$, где \mathcal{E} – напряженность постоянного электрического поля, F – «приведенное» поле [5, 6] (используются атомные единицы).

$1/n$ -разложение строится вокруг классической точки равновесия $x_0(\nu)$ в эффективном потенциале, включающем центробежную энергию. При достаточно малых ν эта точка и все коэффициенты $\epsilon^{(k)}(\nu)$ вещественные. С ростом параметра ν достигается такое значение $\nu = \nu_*$, при котором происходит столкновение двух классических решений – устойчивой (x_*) и неустойчивой точек равновесия, причем частота малых колебаний ω вокруг точки x_* обращается в нуль (что указывает на потерю устойчивости):

$$\omega = C(1 - \nu/\nu_*)^2 + \dots \quad \nu \rightarrow \nu_*, \quad (5)$$

$$C = [6(1 + xf''/3f')]_{x=x_*}^{-2}. \quad (6)$$

Значения ν_* и $x_* = x_0(\nu_*)$ определяются из уравнений

$$\nu = xj - x^2j' \quad j - xf' - x^2j'' = 0. \quad (7)$$

В вычислительном отношении полезно заметить, что

$$C = (-2x^2v''/v|_{x=x_*})^2 = [\varphi'(x_*)]^{-2}, \quad (8a)$$

где функция $v(x)$ задается первым из уравнений (7), $\varphi(x) = -2x^2v'/v$ и все величины берутся при $x = x_*$.

При $\nu > \nu_*$ точка равновесия выходит в комплексную плоскость и коэффициенты $\epsilon^{(k)}(\nu)$ также становятся комплексными. Такое решение, очевидно, не имеет физического смысла в классической механике, однако при переходе к квантовой механике именно оно позволяет вычислить (в рамках $1/n$ -разложения) не только положение E_* , но и пирамку Γ брейт-виннеровских резонансов с энергией $E = E_* - i\Gamma/2$.

Обсудим результаты расчетов. В табл. 1 приведены коэффициенты $1/n$ -разложения (взяты с обратным знаком) для задачи об эффекте Штарка в атоме водорода¹. Для определенности мы выбрали состояния с $n_1 = n_2 = 0$ и $m = n - 1$, где n_1, n_2, m — параболические квантовые числа. Эта таблица иллюстрирует поведение коэффициентов $1/n$ -разложения, которое типично и для других квантовомеханических задач. При $F < F_* = = 2^{12} \cdot 3^{-8} = 0,2081$ все коэффициенты $\epsilon^{(k)}$ вещественные; при $F > F_*$, т. е. после столкновения классических решений у них возникает мнимая часть. С ростом k эти коэффициенты сначала убывают (до $k = k_0 \sim 3 \div 5$), а при $k > k_0$ начинается их рост. Такое поведение $\epsilon^{(k)}$ определяет преимущество $1/n$ -разложения (при численном счете) по сравнению, например, с рядами ТВ (2а), когда факториальный рост высших порядков E_n начинается, как правило, сразу с $k = 1$.

На рис. 1 показана зависимость $|a|$ от отношения v/v_* для эффекта Штарка в водороде, его сферической модели и потенциала воронки. При $v \approx v_*$ параметр асимптотики $a \rightarrow \infty$, вследствие чего коэффициенты $\epsilon^{(k)}$ резко возрастают, а само разложение (1) теряет применимость (это было замечено уже в первых попытках суммирования $1/n$ -разложения [4, 5]; из рис. 1 становится ясной причина этого явления). Потенциал воронки (3) обладает только дискретным спектром (при $0 < g < \infty$), поэтому столкновения классических решений здесь не происходит. В соответствии с этим параметр a остается ограниченным при всех v , см. кривую 3.

Аналогичные вычисления были проведены для потенциалов Юкавы ($f(x) = e^{-x}$ в (4)) и Хюльтена, $f(x) = x/(e^x - 1)$, см. рис. 2. Следует отметить, что в этих двух случаях асимптотика $\epsilon^{(k)}(v)$ содержит наряду с (2) также и осциллирующие члены, соответствующие особенностям в комплексной плоскости борелевской переменной z (см. А.3). Эти члены весьма существенны при умеренно больших $k = 20 - 30$, что значительно усложняет численный расчет параметра a (детали вычислений обсуждаются в Приложении А).

3. Поведение параметра асимптотики $a = a(v)$ при малых v и при $v \rightarrow \infty$ можно установить аналитически. В первом случае²

$$\epsilon^{(k)} = (-1)^k \cdot \frac{f_{k+1}}{2^{k-1}(k+1)} v^{k-1} + \dots, \quad (8)$$

где $k \geq 1$, а f_n — коэффициенты разложения функции экранировки

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} f_k x^k. \quad (4a)$$

Асимптотика коэффициентов $1/n$ -разложения определяется здесь ближайшей особенностью функции $f(x)$ на комплексной плоскости. Если эта особенность расположена на конечном расстоянии от нуля, равном b , то

$$|\epsilon^{(k)}| \approx k! (v/2b)^k, \quad k \rightarrow \infty. \quad (9)$$

Таким образом, даже при малых $v \ll v_*$ (когда потенциал (4) близок к кулоновскому, для которого ряд (1) обрывается на первом члене)

¹ Даны лишь первые знаки коэффициентов $1/n$ -разложения, достаточные для того, чтобы судить об их поведении с ростом k . Вычисление $\epsilon^{(k)}$ проводилось с «четверной» точностью, что необходимо для суммирования ряда (1) — см. ниже п. 5.

² Вывод этой формулы [26] использует разложение приведенной энергии в по степеням v . Для коэффициентов этого разложения были получены рекуррентные соотношения [24], которые в случае $v \rightarrow 0$ могут быть решены в явном виде. Отметим, что формула (8) относится к безузельным ($n = l + 1$) состояниям.

Высшие порядки $1/n$ -разложения для эффекта Штарка

k	$-e^{(k)}$				$e^{(k)}$	
	$F=0,07$	0,10	0,15	0,18	0,25	0,50
0	1,0050	1,0103	1,0244	1,0368	$1,0858 + i \cdot 1,3918(-2)$	$1,2036 + i \cdot 0,1896$
1	$1,148(-2)$	$2,454(-2)$	$6,384(-2)$	$1,099(-1)$	$0,1567 + i \cdot 0,1935$	$7,110(-2) + i \cdot 0,3943$
2	$7,194(-3)$	$1,775(-2)$	$7,396(-2)$	$2,433(-1)$	$-0,1860 - i \cdot 0,2188$	$-2,249(-2) - i \cdot 5,259(-2)$
3	$1,266(-3)$	$7,762(-3)$	$1,387(-1)$	1,567	$-0,6532 + i \cdot 1,853$	$-5,665(-2) + i \cdot 4,565(-2)$
4	$9,072(-4)$	$9,647(-3)$	$5,707(-1)$	2,061(1)	$2,455(-1) - i \cdot 5,074$	$0,1437 + i \cdot 6,741(-2)$
5	$6,711(-4)$	$1,547(-2)$	3,3422	3,893(2)	$-3,133(2) - i \cdot 3,329(2)$	$3,387(-2) - i \cdot 0,4657$
6	$7,066(-4)$	$3,249(-2)$	2,515(1)	9,430(3)	$-2,710(3) + i \cdot 1,036(4)$	$-1,7374 + i \cdot 0,5207$
7	$8,673(-3)$	$8,230(-2)$	2,294(2)	2,767(5)	$2,897(5) - i \cdot 9,295(4)$	$5,2684 + i \cdot 6,7720$
8	$1,260(-3)$	$2,443(-1)$	2,452(3)	9,503(6)	$-7,832(6) - i \cdot 6,448(6)$	$2,448(1) - i \cdot 4,106(1)$
9	$2,085(-3)$	$8,301(-1)$	3,001(4)	3,737(8)	$-4,390(7) + i \cdot 3,856(8)$	$-3,023(2) - i \cdot 4,990(1)$
10	$3,887(-3)$	3,1761	4,138(5)	1,655(10)	$1,497(10) - i \cdot 7,504(9)$	$4,655(2) + i \cdot 2,170(3)$
15	0,3597	1,078(4)	8,572(11)	1,170(19)	$2,435(18) + i \cdot 1,027(19)$	$-9,420(7) - i \cdot 1,639(8)$
20	1,982(2)	2,193(8)	1,068(19)	4,975(28)	$-4,034(28) + i \cdot 4,669(26)$	$7,299(13) + i \cdot 6,618(13)$
25	2,165(3)	1,669(12)	4,987(26)	7,934(38)	$1,196(38) - i \cdot 5,680(38)$	$-1,765(20) - i \cdot 7,961(19)$
40	1,376(52)	8,719(71)	$-3,069(71) - i \cdot 3,571(71)$	$3,497(41) - i \cdot 1,975(41)$

Примечание. Таблица содержит коэффициенты $-e^{(k)}$ для состояний $(0, 0, n-1)$ в атоме водорода, k — порядок $1/n$ -разложения, $F = n^2 \mathcal{E}$, $n = m = e = 1$ (единицей электрического поля является $\mathcal{E}_{\text{ат}} = 5,142 \cdot 10^9$ В см). В скобках указан порядок числа: $(m) \equiv 10^m$, например, $1,148(-2) = 0,01148$.

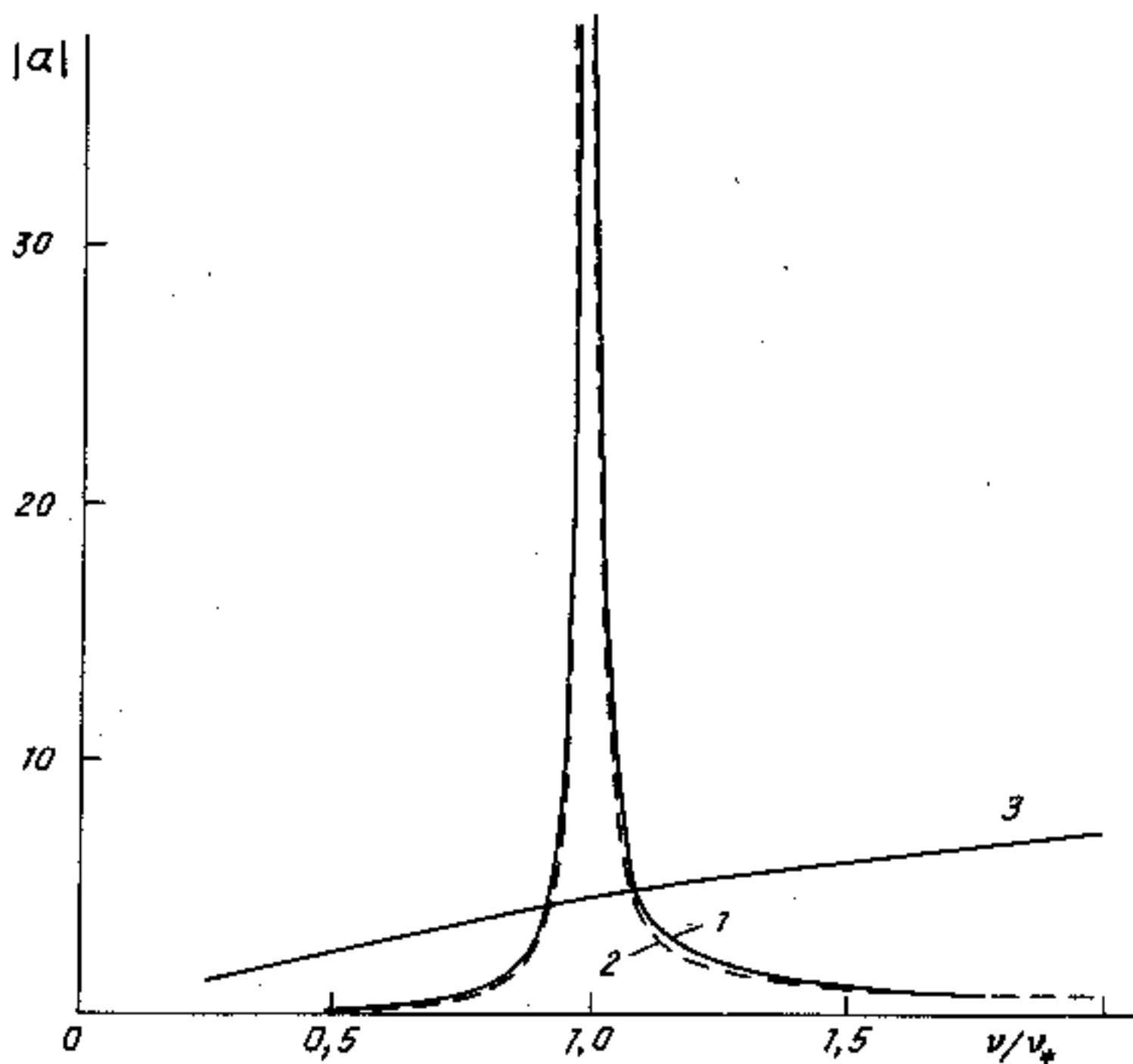


Рис. 1. Параметр асимптотики $a(\nu)$ в зависимости от ν/ν_* . Кривые 1, 2 и 3 относятся соответственно к эффекту Штарка, его сферической модели и потенциалу воронки (3). В последнем случае взято $\nu_* = 2 \cdot 3^{-1/2}$ и значения a умножены на 100

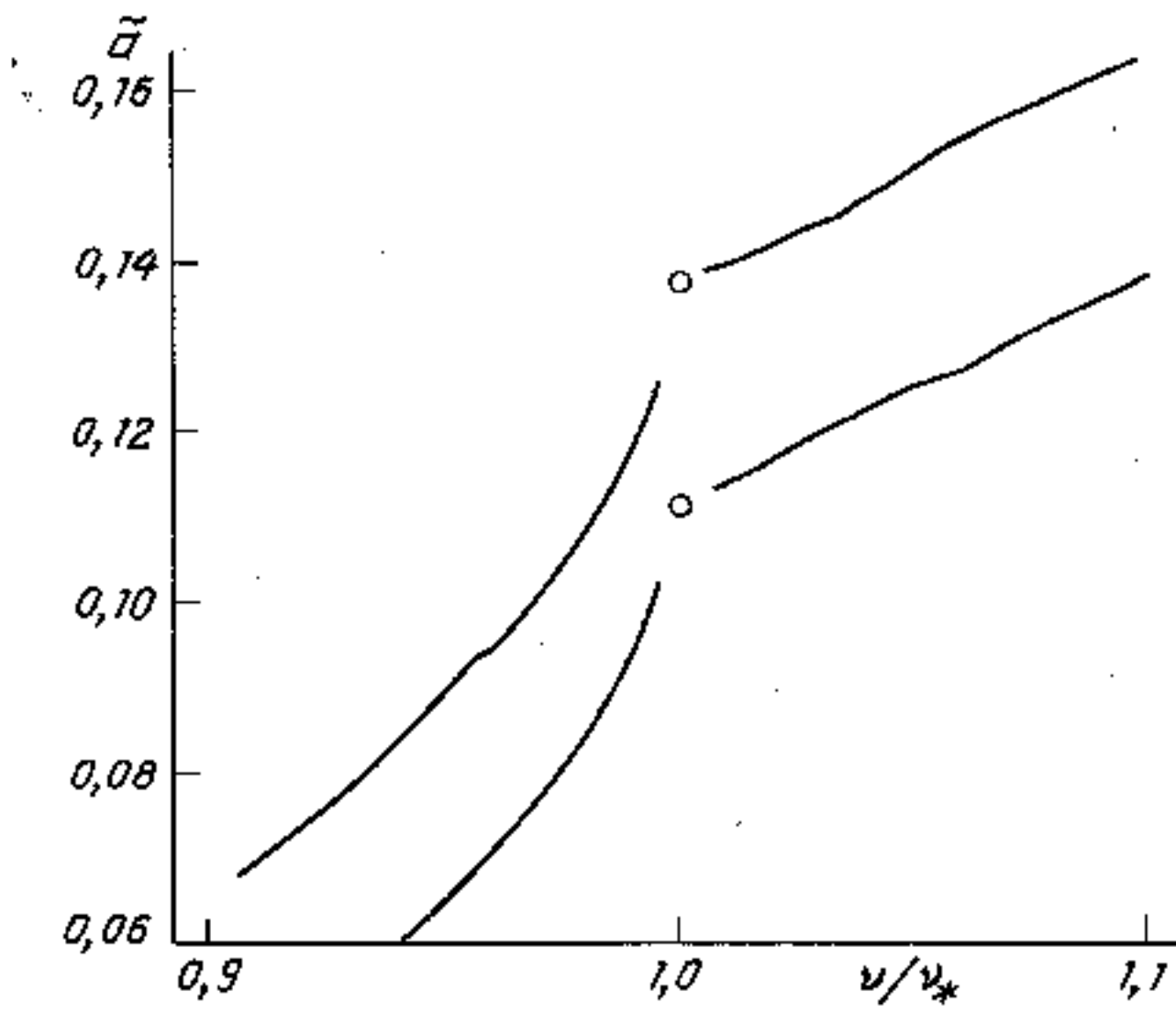


Рис. 2. Проверка соотношения (12) при ν , близких к ν_* . Верхняя кривая — для потенциала Хюльтена, нижняя — для потенциала Юкавы. По оси ординат отложены значения $\tilde{a} = |(1 - \nu/\nu_*)^{1/4} a(\nu)|$, причем параметр $a(\nu)$ определялся численно по высшим порядкам $1/n$ -разложения. Теоретические значения $\tilde{a}(\nu_*) = A$ отмечены точками

коэффициенты $1/n$ -разложения возрастают факториально. Например, для потенциала Хюльгена имеем

$$f(x) = x^i (e^x - 1),$$

$$f_0 = 1, \quad f_1 = 1/2, \quad f_k = B_k \quad (k \geq 2),$$

где B_k — числа Бернулли. Поэтому

$$\varepsilon^{(k)} = (-1)^{(k+1)/2} k! \left(\frac{\nu}{4\pi} \right)^k \left[\frac{2\nu}{\pi} + O\left(\frac{1}{k} \right) \right] \quad (10)$$

(k — нечетное), что согласуется с формулой (9).

Во втором ($\nu \rightarrow \nu_*$) случае, переходя от $x = \mu r$ к ξ : $x = x_0 (1 + n^{-1} \xi)$, и разлагая все величины в уравнении Шредингера по степеням ξ , приходим ³⁾ к уравнению для ангармонического осциллятора, в котором нелинейность $\propto \xi^s$ входит с множителем $\propto n^{-(s-2)/2}$ ($s \geq 3$). Таким образом, при $n \rightarrow \infty$ возникает режим слабой связи. Используя известные результаты по асимптотике высших порядков ТВ для ангармонического осциллятора [16, 18], нетрудно убедиться, что соответствующий вклад в коэффициент $\varepsilon^{(k)}$ порядка $(k-1)! \omega^{-(k+2)/(s-2)}$. При конечных $\omega > 0$ все эти вклады одного порядка. Однако если частота $\omega \rightarrow 0$ (т. е. $\nu \rightarrow \nu_*$, см. (5)), то доминирует вклад от наименьшего значения $s=3$. Учитывая результаты работы [18] для кубического осциллятора, получаем, что

$$\varepsilon^{(k)}(\nu) \approx \text{const} \cdot k! a^k k^{-3/2}, \quad k \rightarrow \infty, \quad (11)$$

причем $a(\nu)$ имеет степенную особенность при $\nu = \nu_*$:

$$a \approx A (1 - \nu/\nu_*)^{-5/2}, \quad (12)$$

$$A = \frac{5}{96} C^2 = 0.1997 [1 + (x f''' / 3 f'')_{x=x_0}]^{3/2},$$

где C — тот же коэффициент, что и в (5). В табл. 2 приведены значения коэффициентов A и C , а также ν_{cr} и ν_* для некоторых короткодействующих потенциалов (включая потенциалы Юкавы и Хюльгена, часто используемые в ядерной физике, и потенциал Гайтца, являющийся хорошей аппроксимацией для модели Томаса — Ферми в нейтральных атомах [27, 28]), а также для эффекта Штарка и его сферической модели (3). Величины ν_* , A и C определены выше. Что касается ν_{cr} , то это значение параметра $\nu = n^2 \mu$ отвечает $\varepsilon^{(0)} = 0$, т. е. моменту выхода уровней с $n \gg 1$, $l \sim 1$ в непрерывный спектр [4].

4. Параметры асимптотики $\varepsilon^{(k)}$. Получим теперь формулы для произвольного потенциала, ограничиваясь для простоты безузельными состояниями с $l = n - 1 \gg 1$. Квазиклассический импульс равен ⁴⁾

$$p(r) = \frac{1}{n} [-\Phi(y, \nu)]^{1/2}, \quad \Phi = y^{-2} - 2y^{-1} f(\nu y) - \varepsilon^{(0)}, \quad (13)$$

где $y = n^{-2} r$, $\varepsilon^{(0)}(\nu)$ — классическая энергия, соответствующая частице, покоящейся в точке $x_0 = \nu y_0$. Ширина уровня равна (с экспоненциальной точностью)

$$\Gamma_n \approx \exp\left(-2 \int_{r_1}^{r_2} |p| dr\right) = \exp(-2nQ).$$

³⁾ Переменная ξ в отличие от r и x остается порядка единицы при $n \rightarrow \infty$.

⁴⁾ Здесь мы считаем, что потенциал имеет вид (4). В такой форме можно записать произвольный сферически-симметричный потенциал, если не вкладывать ограничений на поведение функции экранировки $f(x)$ в виде n на бесконечности.

№	$f(x)$	v_{cr}	v_*	C	A	Примечания
1	e^{-x}	0,73576	0,83996	1,289	0,1116	Потенциал Юкавы
2	$x(e^x - 1)^{-1}$	1,29522	1,52344	1,381	0,1371	Потенциал Хюльгена
3	$\exp(-x^2/2)$	1,21306	1,58650	1,682	0,2478	-
4	$(1+x)^{-2}$	0,5	0,52815	1,033	0,0574	Потенциал Тайтца
5	xe^{-x}	1,08268	1,34425	1,565	0,1997	-
6	$x \exp(-x^2)$	0,73576	1,08268	2,000	0,4167	Гауссиан
7	$1+x^2$	-	0,38490	1,565	0,1997	Сферическая модель
8	-	-	0,45618	0,8660	0,2406	Эффект Штарка

Примечание: A и C — коэффициенты в формулах (12) и (5).

Это задает поведение скачка энергии при $\lambda = 1/n \rightarrow 0$, соответствующее функции $\varepsilon = \sum_k \varepsilon^{(k)} \lambda^k$ с факториально растущими коэффициентами. Асимптотика $\varepsilon^{(k)}$ при $k \rightarrow \infty$ определяется из дисперсионного соотношения по переменной λ :

$$\varepsilon^{(k)}(v) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{d\lambda}{\lambda^{k+1}} \varepsilon''(\lambda, v) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{d\lambda}{\lambda^{k+3}} \Gamma_n(v). \quad (14)$$

Здесь мы рассматриваем λ как непрерывную переменную (что естественно при $n \gg 1$) и предполагаем аналитичность энергии по λ , после чего дисперсионное соотношение выводится стандартным образом (см., например, работу [17], посвященную асимптотике высших порядков теории возмущений для ангармонического $(gx^4/4)$ осциллятора).

Из (14) вытекает связь между асимптотикой коэффициентов $1/n$ -разложения и шириной высоковозбужденных уровней:

$$\varepsilon^{(k)} \approx k! a^k k^{\sigma+1} (c_0 + c_1/k + \dots), \quad k \rightarrow \infty, \quad (15)$$

$$\Gamma_n \approx \pi c_0 a^{-(\sigma+2)} n^\sigma \exp(-n/a), \quad n \rightarrow \infty,$$

причем

$$a^{-1} = 2^{1/2} \int_{r_0}^{r_2} [U(r) - U(r_0)]^{1/2} dr = 2Q(v), \quad (16)$$

$$Q(v) = \int_{y_0}^{y_2} |\varphi(y, v)|^{1/2} dy, \quad (16a)$$

где y_0, y_2 — точки поворота (см. рис. 3). Эта формула определяет параметр $a(v)$ при $v < v_*$ и может быть аналитически продолжена на область $v > v_*$. Остальные параметры асимптотики (σ, c_0, \dots) легко находятся с помощью (14), если известна предэкспонента в формуле для Γ_n . В случае эффекта Штарка и сферической модели (3) функция $Q(v)$ вычисляется аналитически — см. Приложение В.

Рассмотрим теперь v , близкие к v_* . Учитывая, что при $y \rightarrow y_0$ функция $\varphi = \omega^2 y_0^{-2} (y - y_0)^2 + \dots$ (ω — безразмерная частота колебаний), получаем

$$\varphi(y, v) \approx \frac{\omega^2}{y_0^4 (y_2 - y_0)} (y - y_0)^2 (y_2 - y), \quad y_0 < y < y_2, \quad (17)$$

причем

$$\begin{aligned} y_{0,1} &= y_0 [1 \mp h (1 - v/v_*)^k + \dots], \\ y_2 &= y_0 [1 + 2h (1 - v/v_*)^k + \dots], \\ h &= \frac{1}{2} (1 - x f'' / 3 f''')_{y_0}^{-1} \Gamma^{-\sigma} \end{aligned} \quad (18)$$

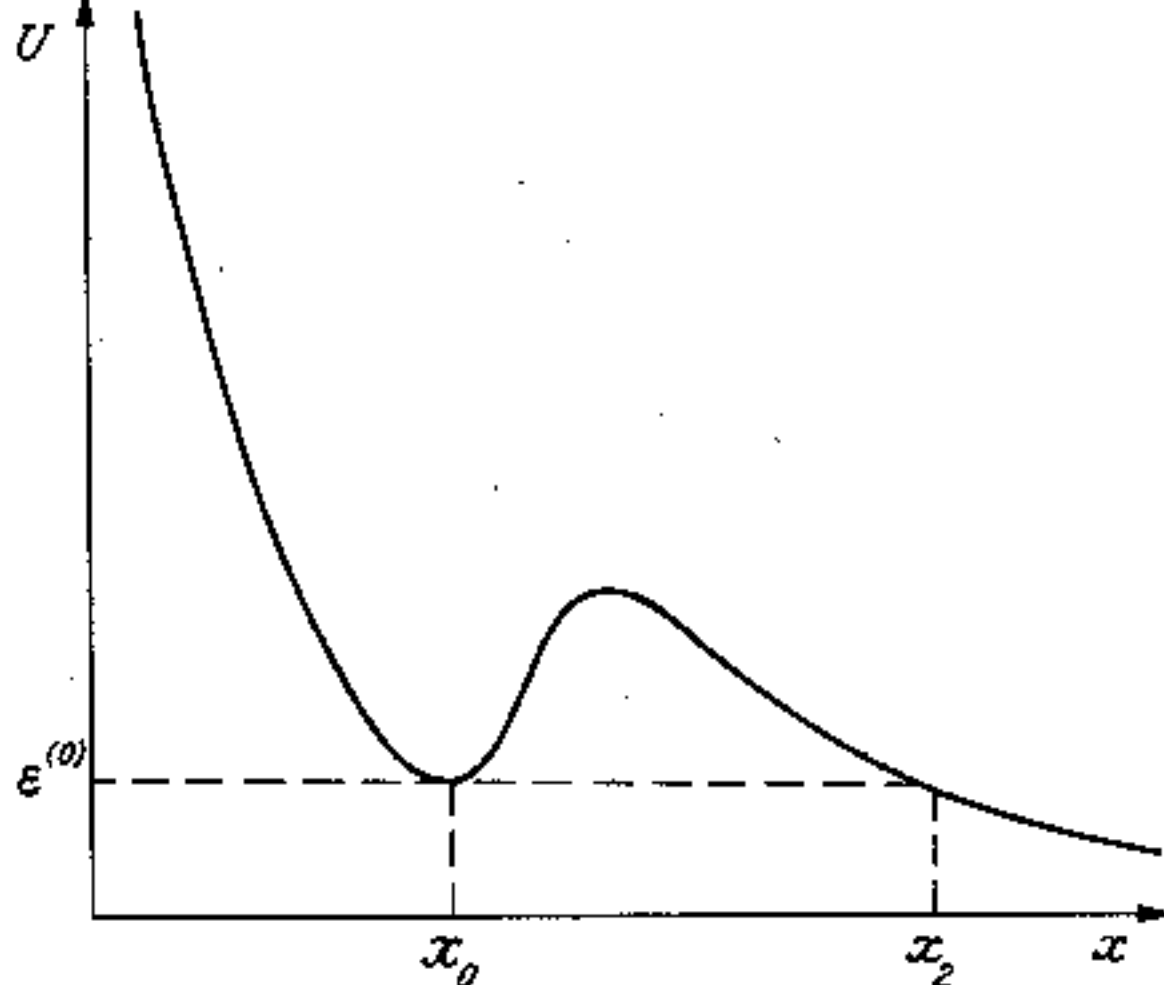


Рис. 3. Эффективный потенциал U (качественный вид)

($x = \mu r = \nu y$). Подставляя (17) в (16) и вычисляя интеграл, находим

$$Q(\nu) = \frac{4}{15} \omega (y_2/y_0 - 1)^2, \quad (19)$$

откуда с учетом (18) и (5) следует формула (12).

Таким образом, в точке столкновения классических решений параметр $a(\nu)$ имеет степенную особенность, показатель которой не зависит от формы потенциала $V(r)$. Как показывают численные расчеты (см. Приложение С), он сохраняет то же значение $-5/4$ и для двумерной (переменные $\xi = r+z$ и $\eta = r-z$ — параболические координаты) задачи об эффекте Штарка в атоме водорода.

5. О суммировании $1/n$ -разложения. Итак, для задач квантовой механики асимптотика высших порядков $1/n$ -разложения, является, как правило, факториальной⁵⁾. Это объясняет, почему в некоторых случаях (например, эффект Штарка [5, 6]) для получения энергии с точностью, нужной для эксперимента, необходимо вычислять несколько десятков коэффициентов $\varepsilon^{(k)}$ и суммировать ряд (1). В настоящее время эта процедура разработана достаточно хорошо и не встречает принципиальных затруднений.

В заключение остановимся на вопросе о суммировании $1/n$ -разложения в интервале $\nu_{cr} < \nu < \nu_*$. Нетривиальность этой задачи видна из того, что все коэффициенты $\varepsilon^{(k)}(\nu)$ здесь вещественные, в то время как сумма ряда (1) является уже комплексной (поскольку уровень вышел в непрерывный спектр, превратившись в брейт-вигнеровский резонанс). Для суммирования ряда (1) использовался метод аппроксимант Паде — Эрмита (АПЭ), краткое описание которого содержится в [6, 8]. Мы ограничились квадратичными АПЭ $[L, M, N](\lambda) \equiv F(\lambda)$, где $\lambda = 1/n$ — параметр разложения, $F(\lambda)$ определяется из уравнения $P_L - Q_M F + R_N F^2 = 0$,

$$F(\lambda) = \frac{1}{2R_N} [Q_M \pm (Q_M^2 - 4P_L R_N)^{1/2}], \quad (20)$$

⁵⁾ В силу этого ряды (1) расходятся, и для вычисления энергии ε с высокой точностью необходимо использовать методы суммирования расходящихся рядов, такие как метод аппроксимант Паде (АП) и т. д. Практически важно, что во многих случаях (например, для потенциала воронки [4, 12]) уже два-три члена $1/n$ -разложения дают энергии и волновые функции с вполне приемлемой для физики точностью.

где $P_L(\lambda)$, $Q_M(\lambda)$ и $R_N(\lambda)$ — полиномы степени L , M и N соответственно, коэффициенты которых находятся из соотношения

$$P_L(\lambda) - Q_M(\lambda)\varepsilon + R_N(\lambda)\varepsilon^2 = O(\lambda^{L+M+N+2}), \lambda \rightarrow 0 \quad (21)$$

а $\varepsilon(\lambda)$ — формальный степенной ряд (1). При подставке его в (21) получаем систему линейных уравнений для коэффициентов указанных выше полиномов, численное решение которой на ЭВМ не представляет трудностей.

Легко понять, что из вещественности коэффициентов $\varepsilon^{(k)}$ при всех $k=0, 1, 2, \dots$ вытекает то, что и полиномы P_L , Q_M и R_N также имеют только вещественные коэффициенты. Из (20) видно, что АПЭ (в отличие, например, от обычных АП $[L/M](\lambda)$) могут иметь мнимую часть также и в этом случае, поэтому суммирование $1/n$ -разложения с помощью АПЭ является адекватным вычислительным методом для квазистационарных состояний.

Данный метод был применен к двум задачам: потенциалу Юкавы и эффекту Штарка. В первом случае вычисленные значения E_r и Γ сравнивались с работой [25], во втором — с результатами суммирования рядов теории возмущений по степеням электрического поля \mathcal{E} [6]. При этом наблюдается хорошее согласие между результатами, полученными независимыми методами расчета энергии квазистационарных состояний.

Рассмотрим в качестве иллюстрации эффект Штарка в атоме водорода для состояний $(0, 0, n-1)$. В табл. 1 приведены коэффициенты $1/n$ -разложения в интересующей нас области $F < F_* = 0,2081$, т. е. до столкновения классических точек равновесия ($F = n^2 \mathcal{E}$). Из таблицы виден быстрый рост $\varepsilon^{(k)}$ при $k \geq 10$, который становится особенно заметным, когда $F \rightarrow F_*$. Результаты суммирования ряда (1) при $n=3, 10$ и 20 даны в табл. 3, где приведены значения штарковского сдвига $\Delta\varepsilon_n$ и ширины уровня:

$$E^{(0,0,n-1)} = -\frac{1}{2n^2} (1 + \Delta\varepsilon_n + i\varepsilon_n'') \quad (22)$$

(эти значения обозначены в табл. 3 как $1/n$). Как правило, мы использовали диагональные АПЭ (т. е. $L=M=N$ в уравнениях (21)), причем $N \sim 15$. Таким образом, в расчет вводилось $30 \div 40$ порядков $1/n$ -разложения, что обеспечивает точность расчета энергии порядка $10^{-4} - 10^{-5}$ (в табл. 3 приведены только установившиеся цифры последовательности АПЭ). Точность $1/n$ -разложения уменьшается при $F \approx F_*$, что понятно в свете результатов, полученных выше. Как видно из табл. 3, значения E_r и Γ , полученные при суммировании $1/n$ -разложения, полностью согласуются с результатами независимых расчетов [6]. Аналогичные результаты были получены и для других состояний.

При $v > v_*$ коэффициенты $1/n$ -разложения становятся комплексными и вычисление ширины уровня Γ упрощается. Для этого вместо (20) достаточно использовать, например, частичные суммы ряда (1):

$$s_k = \sum_{j=0}^k \varepsilon^{(j)} n^{-j}, \quad (23)$$

причем можно ограничиться меньшим числом коэффициентов $\varepsilon^{(j)}$. Так были получены значения $\Delta\varepsilon_n$ и ε_n'' из табл. 3, относящиеся к области $F > F_*$. Ранее [3-5, 7] частичные суммы (23) применялись и в других задачах квантовой механики.

Точность $1/n$ -разложения возрастает при увеличении главного квантового числа n , поэтому данный метод является наиболее подходящим для ридберговских ($n \gg 1$) состояний.

Штарковский сдвиг и ширина состояний $(0,0, n-1)$ в сильном электрическом поле

F	$\Delta \epsilon_n$	ϵ_n^*	Метод расчета	F	$\Delta \epsilon_n$	ϵ_n^*	Метод расчета
$n=3$				$n=3$			
0,07	9,663(-3)	1,2(-7)	1/n	0,20	9,2(-2)	-	1/n
	9,6627(-3)	1,186(-7)	ТВ		9,157(-2)	3,469(-2)	ТВ
0,10	2,1020(-2)	1,231(-4)	1/n, ТВ	0,25	0,1244	7,283(-2)	1/n, ТВ
0,15	5,394(-2)	8,145(-3)	*	0,30	0,1519	0,1170	*
0,18	7,691(-2)	2,223(-2)	*	0,40	0,1941	0,2143	1/n
0,19	8,437(-2)	2,817(-2)	1/n		0,1942	0,2144	ТВ
	8,434(-2)	2,820(-2)	ТВ	0,50	0,2239	0,3169	1/n
					0,224	0,317	ТВ
$n=10$				$n=20$			
0,10	1,2966(-2)	-	1/n, ТВ		1,15982(-2)	-	1/n, ТВ
0,15	3,1755(-2)	7,379(-5)	*		2,77719(-2)	1,1(-7)	*
0,18	5,0356(-2)	2,5162(-3)	*		4,32324(-2)	2,969(-4)	*
0,20	6,4866(-2)	7,877(-3)	1/n		5,7258(-2)	2,971(-3)	1/n
	6,4881(-2)	7,870(-3)	ТВ		5,7258(-2)	2,970(-3)	ТВ
0,25	9,9766(-2)	3,2154(-2)	1/n, ТВ		9,3186(-2)	2,3222(-2)	1/n, ТВ
0,30	0,12967	6,5272(-2)	*		0,12399	5,3783(-2)	*
0,40	0,17637	0,14340	*		0,17199	0,12775	*
0,50	0,21044	0,22859	*		0,20709	0,20923	*

Примечание. Величины $\Delta \epsilon_n$ и ϵ_n^* определены в (22); используются атомные единицы.

6. $1/n$ -разложение и задача двух центров. Нерелятивистская задача двух кулоновских центров.

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2}, \quad r_{1,2} = \left[\rho^2 + \left(z \pm \frac{R}{2} \right)^2 \right]^{1/2}, \quad (24)$$

встречается в различных областях физики [29]; применению к ней $1/n$ -разложения посвящены работы [12, 30, 31]. В этом случае коэффициенты $\epsilon^{(k)}$ ряда (1) зависят от межъядерного расстояния R . Первый член ряда $\epsilon^{(0)}(R)$ соответствует энергии частицы на классической орбите, которая определяется из условия равновесия сил, действующих на электрон в его системе покоя. Мы ограничимся симметричным случаем: $Z_1 = Z_2 = 1$, что отвечает молекулярному иону водорода H_2^+ . Для состояний с $m = n - 1$, $n \rightarrow \infty$ уравнения можно записать в параметрической форме:

$$\begin{aligned} \epsilon^{(0)} &= -2(1-\tau)^2(1+\tau), \\ \epsilon^{(1)} &= 2(1-\tau)^3[(1+3\tau)^{1/2} + (1-3\tau)^{1/2} - 2], \\ \omega_{1,2} &= 4(1-\tau)^3(1 \pm 3\tau)^{1/2}, \quad \tilde{R} = \tau^{1/2}(1-\tau)^{-2}, \end{aligned} \quad (25)$$

где $0 < \tau < 1/3$, $\epsilon = n^2 E$, $\tilde{R} = n^{-2} R$ и $E(R)$ — энергия терма. Эти уравнения задают зависимость коэффициентов $1/n$ -разложения от R и легко следуют из формул работы [30]. При этом $\omega_{1,2}$ — частоты нормальных колебаний электрона вокруг точки равновесия в эффективном потенциале $U(\rho, z)$, $\rho = (x^2 + y^2)^{1/2}$, а переменная τ имеет простой геометрический смысл: $\tau = \cos^2 \alpha$, где α — угол при вершине Z в треугольнике (Z, Z, e) .

Для первых трех порядков $1/n$ -разложения получены явные формулы [30]; последующие коэффициенты удобнее находить с помощью рекуррентных соотношений. Соответствующий алгоритм, реализованный на ЭВМ, позволил эффективно вычислить десятки коэффициентов $\epsilon^{(k)}(R)$

в задаче двух центров. Численный анализ показывает, что они обладают факториальным ростом при $k \rightarrow \infty$, причем параметр асимптотики $a(\tilde{R})$ резко возрастает при $\tilde{R} \rightarrow R_* \approx 1,3$ (см. рис. 8 в [30]). Далее мы приведем некоторые аналитические результаты

С помощью вычислений, аналогичных изложенным выше (см. п. 4), находим

$$a(R) = -1/2 (\operatorname{arth} \zeta - \zeta)^{-1}, \quad (26)$$

$$\zeta = (1 + 1/2 \tilde{R}^2 \varepsilon^{(0)})^{1/2} = (1 - 3\tau)^{-1/2} (1 - \tau)^{-1/2}.$$

Частота $\omega_2 \propto f^2 \rightarrow 0$ при $\tau \rightarrow 1/3$, и соответствующая классическая орбита теряет устойчивость. Это происходит при $\tilde{R} = R_* = 3^{1/2} \cdot 2^{-2} = 1,299$. Приведем разложения при $\tilde{R} \rightarrow R_*$:

$$\tau = 1/3 - 2/9 f + 1/9 f^2 + \dots, \quad \zeta = (3/2 f)^{1/2} (1 - 1/12 f + \dots),$$

$$\varepsilon^{(0)} = \varepsilon_* (1 + 1/2 f + 1/4 f^2 + \dots),$$

$$\varepsilon^{(1)} = \varepsilon_* (1 - 2^{-1} - (f/6)^{1/2} + \dots),$$

где $\varepsilon_* = -3^2/27$, $f = 1 - \tilde{R}/R_* \rightarrow 0$, а при $R \rightarrow 0$:

$$\tau = t - 4t^2 + \dots, \quad \zeta = 1 - 1/2 t + 3/8 t^2 + \dots$$

$$\varepsilon^{(0)} = 2(-1 + t - 3t^2 + 13t^3 + \dots),$$

$$\varepsilon^{(1)} = 9/2(-t^2 + 11t^3 + \dots), \quad t = \tilde{R}^2 = R^2/n^2,$$

откуда имеем

$$a(R) = \begin{cases} -1/2 [\ln(n^2/R) - (1 - \ln 2)]^{-1}, & R \rightarrow 0, \\ -(2/3)^{1/2} f^{-3/2} (1 - 13/20 f + \dots), & R \rightarrow n^2 R_*. \end{cases} \quad (27)$$

Таким образом, $a(R) < 0$ при $0 < R < n^2 R_*$. Это находится в соответствии с численными расчетами [30], которые показывают, что в этой области значений R ряд (1) является знакопеременным и может быть просуммирован с помощью АП. Сходимость АП ухудшается, когда R приближается к $n^2 R_*$, поскольку при этом $a(R) \rightarrow \infty$ и коэффициенты $\varepsilon^{(k)}(R)$ резко возрастают.

Более подробный анализ показывает [30], что при $\tilde{R} = R_*$ происходит слияние трех классических траекторий, одна из которых (S_0 , к которой и относятся приведенные выше уравнения) устойчива, а две другие (S_1 , S_2) являются комплексными. При $\tilde{R} > R_*$ орбита S_0 теряет устойчивость ($\omega_2^2 < 0$), а S_1 и S_2 становятся вещественными и определяют коэффициенты $1/n$ -разложения (при $R \gg 1$ каждая из них соответствует локализации электрона вблизи одного из ядер, Z_1 или Z_2). Для $\varepsilon^{(0)}(R)$, $a(R)$ и т. д. в этом случае можно получить формулы, аналогичные (25), (26). В частности,

$$a(R) = -\frac{1}{4} [\zeta (1 - \zeta^2)^{-1} - \operatorname{arth} \zeta] \quad (28)$$

причем переменная ζ связана теперь с R с помощью уравнений

$$\zeta = \left(\frac{3\tau - 1}{3\tau - \tau^3} \right)^{1/2}, \quad R = \frac{n}{n^2} = \frac{8\tau^3}{(1 - \tau)(\tau + 1)^2}, \quad (29)$$

где $1/3 \leq \tau < 1$ (заметим, что $\tilde{R} = R_*$ при $\tau = 1/3$, а $\tau \rightarrow 1$ отвечает $R \rightarrow \infty$). Вывод формул (26), (28) проводится на основе уравнения (16), с учетом разделения переменных в эллиптических координатах $\xi = (r_1 + r_2)/R$, $\eta = (r_1 - r_2)/R$ для задачи двух центров.

Из (28) видно, что $a(R) > 0$, если $R > R_*$. Это полностью согласуется с численным расчетом [30] высших порядков $1/n$ -разложения, согласно которому при $R > R_*$ коэффициенты $\varepsilon^{(k)} < 0$ и ряд (1) становится знакостоянным.

7. В заключение кратко сформулируем основные результаты настоящей работы. Ими можно считать формулы (11) и (16) для асимптотики высших порядков $1/n$ -разложения, а также определение характера степенной особенности (12) вблизи точки столкновения классических решений, $v = v_*$. Эти результаты справедливы для произвольного потенциала $V(r)$ и согласуются с численными расчетами коэффициентов $\varepsilon^{(k)}$.

Были также рассмотрены задачи без сферической симметрии: эффект Штарка в водороде и задача двух кулоновских центров. При некотором значении параметра ($F = n^2 \mathcal{E} = F_*$, или $R = n^2 R_*$) происходит столкновение (слияние) классических орбит — устойчивой и неустойчивой; при этом в первом случае сливаются две орбиты, во втором — три. Соответственно различаются и показатели степенной особенности у параметра $a(-5/4$ и $-3/2$, см. формулы (12) и (27), а также Приложение С). Для параметра асимптотики a получены явные аналитические формулы как в случае потенциала воронки (3а) с $N=1$ и 2, так и в задаче двух центров.

Авторы хотели бы выразить искреннюю благодарность В. Д. Муру за детальное обсуждение полученных результатов и ряд полезных замечаний.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Для потенциалов Юкавы и Хюльтена асимптотика высших порядков $1/n$ -разложения имеет более сложный вид, чем (2):

$$\begin{aligned} \varepsilon^{(k)}(v) \approx k! \{ a^k k^\beta c_0 [1 + O(1/k)] + \\ + \operatorname{Re}(A^k k^\beta C) [1 + O(1/k)] \} = k! \{ a^k k^\beta c_0 + \\ + a_1^k k^\beta c_1 \cos(k\theta + \varphi) + \dots \}, \quad k \rightarrow \infty, \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

где $a(v) > 0$ при $v_{cr} < v < v_*$, а параметры A и C — комплексные:

$$A = a_1 e^{i\theta}, \quad C = c_1 e^{i\varphi}.$$

Численный расчет этих параметров по известным коэффициентам $\varepsilon^{(k)}$ можно провести с помощью преобразования Бореля:

$$B(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\varepsilon^{(k)}}{k!} z^k. \quad (\text{A.2})$$

Трансформанта Бореля $B(z)$ имеет ближайшую к нулю особенность при $z = z_0 = a^{-1}$, характер которой определяется параметром β в (A.1):

$$B(z) \sim (z - z_0)^{-(\beta+1)} \quad (\text{A.3})$$

(второму члену асимптотики (A.1) соответствуют комплексно-сопряженные особенности трансформанты Бореля, расположенные в точках $z = 1/A$ и $1/A^*$). Для определения параметров a и β использовались интегральные аппроксиманты [32], определяемые из уравнения (ср. с (20))

$$P_L(z) + Q_L(z)f(z) + R_L(z) \frac{df}{dz} = 0, \quad (\text{A.4})$$

откуда

$$f(z) = \exp\left(-\int_0^z \frac{Q_L(t)}{R_L(t)} dt\right) \left\{ f(0) - \int_0^z dt \frac{P_L(t)}{R_L(t)} \exp\left(\int_0^t \frac{Q_L(t')}{R_L(t')} dt'\right) \right\} \quad (\text{A.5})$$

где P_L , Q_L и R_L — полиномы степени L . Из (A.5) следует, что если $Q_L(z)/R_L(z) = \rho(z-z_0)^{-1} + \dots$ при $z \rightarrow z_0$, то $f(z)$ имеет степенную особенность: $f(z) \propto (z^0 - z_0)^{-\rho}$. В соответствии с этим $z_0 = 1/a$ определяется как наименьший по абсолютной величине нуль полинома $R_L(z)$, а показатель $\beta = \rho - 1$, где $\rho = \text{Res } Q_L(z)/R_L(z) |_{z=z_0}$. Этим методом для потенциала Юкавы было получено $\beta = -1,50 \pm 0,01$ (при $v > v_{cr}$), что согласуется с формулой (11).

Из-за отсутствия второго слагаемого в асимптотике (A.1) у коэффициентов $\epsilon^{(k)}$ могут возникать осцилляции с ростом k , т. е. ряд (1) не является знакопостоянным⁶⁾. При $v > v_{cr}$ в (A.1) начинает доминировать первый член и коэффициенты $\epsilon^{(k)}(v)$ с $k \gg 1$ становятся положительными. Функция с такими коэффициентами имеет отличную от нуля мнимую часть, что легко понять на простейшем примере (ряд Эйлера [33]):

$$F(z) = \sum_{k=0}^{\infty} k! z^k = -z^{-1} e^{-1/z} \Gamma(0, -1/z), \quad (\text{A.6})$$

$$\text{Im } F(x) = \pi x^{-1} e^{-1/x}, \quad 0 < x < \infty, \quad (\text{A.7})$$

где $\Gamma(0, t)$ — неполная гамма-функция.

Как показано в п. 5, суммирование $1/n$ -разложения позволяет восстановить мнимую часть энергии уровня Γ , начиная уже с $v = v_{cr}$ (хотя в интервале $v_{cr} < v < v_*$ все коэффициенты разложения (1) являются вещественными). С другой стороны, при $v > v_*$ коэффициенты $\epsilon^{(k)}(v)$ становятся комплексными; в этом случае для вычисления ширины Γ достаточно использовать простейший метод суммирования, например частичные суммы $1/n$ -разложения (23).

ПРИЛОЖЕНИЕ В

Рассмотрим потенциал (3а) при $g < 0$, когда в нем имеется барьер ($N > 0$). В этом случае $\mu = (-g)^{1/(N+1)}$, $f(x) = 1 + N^{-1}x^{N+1}$,

$$v = x_0 - x_0^{N+2}, \quad (\text{B.1})$$

$$\epsilon^{(0)} = -(1 - \xi) \left(1 + \frac{N+2}{N} \xi \right), \quad \omega = \left[\frac{1 - (N+2)\xi}{1 - \xi} \right]^{-1/2}, \quad (\text{B.2})$$

где $\xi = x_0^{N+1}$. Отсюда

$$x_* = (N+2)^{-1/(N+1)}, \quad v_* = (N+1)(N+2)^{-(N+2)/(N+1)},$$

$$C = [2(N+2)]^{1/2}, \quad A = 5/3 \cdot 2^{-1/2} (N+2)^{1/2}. \quad (\text{B.3})$$

Энергия $\epsilon^{(0)}(v)$ монотонно понижается с ростом $v = n^2 \mu$ и в точке столкновения решений ($v = v_*$) достигает значения $\epsilon_* = -[1 + (N^2 + 2N)^{-1}]$. Из (B.2) находим

$$\epsilon^{(0)} = \epsilon_* \left(1 - \frac{2}{N+2} \omega^2 \right) \left(1 - \frac{\omega^2}{N+2} \right)^{-2}. \quad (\text{B.4})$$

Случай $N=1$ соответствует «сферической модели» для эффекта Штарка в водороде. Отметим, что константы C и A в этом случае имеют те же значения, что и для экспоненциального потенциала (но значения v_* для них различаются — см. табл. 2).

⁶⁾ Так, при $v \approx 0,532 < v_{cr}$ (потенциал Юкавы) имеем $\theta = \pi/2$ и $|a| \ll a_1$, поэтому период чередования знаков в последовательности $\epsilon^{(k)}$ равен двум (что подтверждается при численном счете этих коэффициентов).

Функция φ в (16) равна

$$\varphi(y, \nu) = y^{-2} - 2y^{-1} - 2N^{-1}\nu^{N+1}y^N - \epsilon^{(0)}(\nu). \quad (\text{B.5})$$

Поскольку классическая энергия $\epsilon^{(0)}$ отвечает минимуму эффективного потенциала, то $\varphi(y, \nu)$ имеет кратный корень $y=y_0$ ($y_0 < y < y_2$ — подбарьерная область, в которой $\varphi > 0$, см. рис. 3). В силу этого интеграл в (16), являющийся при $N=1$ и 2, вообще говоря, эллиптическим интегралом, может быть выражен через элементарные функции. Опуская детали вычислений, приведем окончательные формулы.

а) $N=1$ (сферическая модель):

$$a^{-1} = 4 \left[z + \frac{z^3}{3(1-z^2)} - \operatorname{arth} z \right] = \begin{cases} 5/15 z^5 (1 + 10/3 z^2 + \dots), & z \rightarrow 0, \\ \frac{2}{3(1-z)} + 2 \ln(1-z) + \left(\frac{7}{3} - 2 \ln 2 \right) + \dots, & z \rightarrow 1, \end{cases} \quad (\text{B.6})$$

где $z = \left[(1-3x_0^2)/(1-x_0^2) \right]^{1/2} = \omega$. При выводе этой формулы использовалось соотношение

$$\epsilon^{(0)} = -1/3 (1-2/3 z^2) (1-1/3 z^2)^{-2}$$

(см. (B.4) при $N=1$). Зависимость z от ν может быть найдена также непосредственно из уравнения

$$(1-z^2) (1-1/3 z^2)^{-3} = (\nu/\nu_c)^2, \quad (\text{B.7})$$

из которого имеем

$$z(\nu) = \begin{cases} 1 - \nu^2 - 7/2 \nu^4 + \dots, & \nu \rightarrow 0, \\ 16(1-\nu/\nu_c)^2, & \nu \rightarrow \nu_c = 2 \cdot 3^{-1/2}. \end{cases}$$

Отсюда следует, что

$$a = 3/2 \nu^2 [1 - 3\nu^2 \ln(\nu^2/2) + O(\nu^4 \ln \nu)], \quad \nu \rightarrow 0, \quad (\text{B.8})$$

а при $\nu \rightarrow \nu_c$ приходим к формуле (12) с коэффициентом $A = 5 \cdot 3^{-5/2} \cdot 2^{-1/2} = 0,19967$.

б) В случае $N=2$ получаем

$$a^{-1} = 2 \left[3^2 (1-1/2 z^2) (1-z^2)^{-3} \operatorname{arctg} \frac{3^2 z}{2(1-z^2)^2} - \operatorname{arth} \frac{3z}{z^2+2} \right]. \quad (\text{B.9})$$

где $z = \left[(1-4x_0^3)/(1-x_0^3) \right]^{1/2}$, а $x_0(\nu)$ определяется из уравнения (B.1). Заметим, что переменная z снова совпадает с частотой классических колебаний ω . При этом

$$a(\nu) = \frac{2}{\pi} \left(\nu^{3/2} - \frac{6}{\pi} \nu^3 \ln \nu + \dots \right), \quad \nu \rightarrow 0 \quad (\text{B.10})$$

и $|a(\infty)| = 1/2\pi$, а при $\nu \rightarrow \nu_c = 0,4725$ справедлива формула (12) с константой $A = 0,2476$.

в) Формулы для потенциала воронки (3) получаются из предыдущих при замене $g \rightarrow -g$. При этом

$$\nu = x_0 + x_0^3, \quad \omega = \left[(1+3x_0^2)/(1+x_0^2) \right]^{1/2}. \quad (\text{B.11})$$

Поэтому $z > 1$ и $\operatorname{arth} z = \operatorname{arth}(1/z) \pm i\pi/2$, в силу чего параметр асимптотики a становится комплексным (как уже говорилось выше, это отвечает осцилляциям коэффициентов $1/n$ -разложения). В частности, при $g \rightarrow \infty$ име-

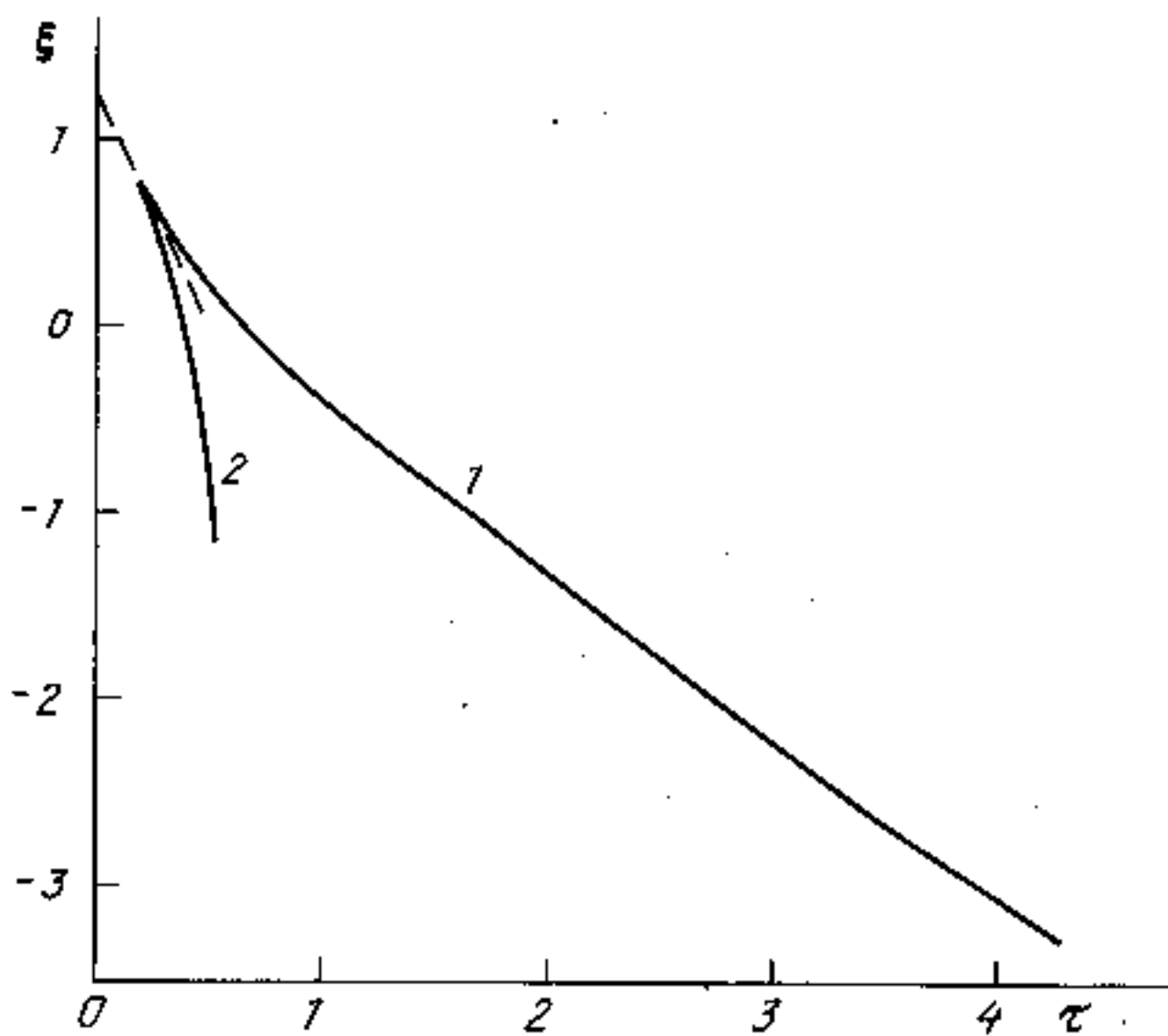


Рис. 4. Численное определение показателя особенности β в случае эффекта Штарка: 1 - $F < F_*$; 2 - $F > F_*$; штриховая прямая - экстраполяция к $\tau=0$

ем $z \rightarrow 3^{1/2}$ и

$$a = 1/2 [3^{1/2} - \ln(2 + 3^{1/2}) \pm i\pi]^{-1}, \quad (B.12)$$

$$|a(\infty)| = 0,1578.$$

То же предельное значение $a(\infty)$ получается и для сферической модели, в чем нетрудно убедиться с помощью формулы (B.6).

ПРИЛОЖЕНИЕ С

Численная проверка формулы (12)

Этот вопрос мы изложим на примере задачи об эффекте Штарка. Представим параметр асимптотики a в виде

$$a(F) = (F_* - F)^{-\beta} [b_0 + b_1 (F_* - F)^{\beta'} + \dots] \quad (C.1)$$

($\beta, \beta' > 0$). Удобно ввести переменные ξ, τ :

$$\xi = -\frac{\ln |a(F)|}{\ln |F - F_*|}, \quad \tau = \frac{1}{\ln |F - F_*|}, \quad (C.2)$$

тогда при $F \rightarrow F_*$ имеем

$$\xi(\tau) = \beta + (\ln |b_0|) \tau + O(\tau \exp(-\beta'/\tau)). \quad (C.3)$$

Следовательно, показатель β определяется экстраполяцией $\xi(\tau)$ к точке $\tau=0$. На рис. 4 изображено поведение $\xi(\tau)$ вплоть до $\tau=0,2$ (или $|F - F_*| \approx \approx 0,01$); видно, что оно согласуется со значением $\beta=1,25$, следующим из (12). Тем самым численно показано, что характер особенности $a(F)$ для задачи об эффекте Штарка тот же, что и в случае потенциалов со сферической симметрией.

Список литературы

1. Yaffe L. G. // Phys. Today. 1983. V. 36(8). P. 50.
2. Chatterjee A. // Phys. Rep. 1990. V. 186. P. 249.
3. Bender C. M., Mlodinow L. D., Papanicolaou N. // Phys. Rev. A. 1982. V. 25. P. 1305.

4. Попов В. С., Вайнберг В. М., Мур В. Д. // Письма в ЖЭТФ. 1985. Т. 41. С. 439. Препринт ИТЭФ-178. М., 1985. ЯФ. 1986. Т. 44. С. 1103.
5. Popov V. S., Mur V. D., Shcheblykin A. V. et al. // Phys. Lett. A. 1987. V. 124. P. 77.
6. Popov V. S., Mur V. D., Sergeev A. V. et al. // Phys. Lett. A. 1990. V. 149. P. 418, 425.
7. Вайнберг В. М., Попов В. С., Сергеев А. В. // ЖЭТФ. 1990. Т. 98. С. 847.
8. Вайнберг В. М. и др. // ТМФ. 1988. Т. 74. С. 399.
9. Imbo T., Sukhatme U. // Phys. Rev. D. 1983. V. 28. P. 418. 1985. V. 31. P. 2655.
10. Imbo T., Pagnamenta A., Sukhatme U. // Phys. Rev. D. 1984. V. 29. P. 1669.
11. Mlodinow L., Shatz M. // J. Math. Phys. 1984. V. 25. P. 943.
12. Мур В. Д., Попов В. С., Сергеев А. В. // ЖЭТФ. 1990. Т. 97. С. 32.
13. Степанов С. С., Тутух Р. С. // ЖЭТФ. 1991. Т. 100. С. 415.
14. Попов В. С., Щерблякин А. В. // ЯФ. 1991. Т. 54. С. 1582.
15. Dyson F. J. // Phys. Rev. 1952. V. 85. P. 631.
16. Bender C. M., Wu T. T. // Phys. Rev. Lett. 1968. V. 21. P. 406. 1971. V. 27. P. 461.
17. Bender C. M., Wu T. T. // Phys. Rev. D. 1973. V. 7. P. 1620.
18. Alvarez G. // Phys. Rev. A. 1988. V. 37. P. 4079.
19. Benassi L., Grecchi V., Harrell E. et al. // Phys. Rev. Lett. 1979. V. 42. P. 704, 1430.
20. Silverstone H. J., Adams B. G., Cizek J. et al. // Phys. Rev. Lett. 1979. V. 43. P. 1498.
21. Alliluev S. P., Eletsky V. L., Popov V. S. et al. // Phys. Lett. A. 1979. V. 73. P. 103. 1980. V. 78. P. 43. ЖЭТФ. 1982. Т. 82. С. 77.
22. Avron J. E., Adams B. G., Cizek J. et al. // Phys. Rev. Lett. 1979. V. 43. P. 691.
23. Popov V. S., Eletsky V. L., Turbiner A. V. // Phys. Lett. B. 1977. V. 72. P. 99. ЖЭТФ. 1978. Т. 47. С. 445.
24. Аллилуев С. П., Вайнберг В. М., Попов В. С. // ДАН СССР. 1982. Т. 265. С. 597.
25. Вайнберг В. М., Попов В. С. // ДАН СССР. 1983. Т. 272. С. 335.
26. Вайнберг В. М., Мур В. Д., Попов В. С. и др. // Препринт ИТЭФ 160-89, М., 1989.
27. Tietz T. // J. Chem. Phys. 1956. V. 25. P. 787.
28. Демков Ю. Н., Островский В. Н. // ЖЭТФ. 1972. Т. 62. С. 125.
29. Комаров И. В., Пономарев Л. И., Славянов С. Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. М.: Наука, 1976.
30. Попов В. С., Мур В. Д., Сергеев А. В. // Препринт ИТЭФ 114-89. М., 1989.
31. Lopez-Cabrera M., Goodson D. J. et al. // Phys. Rev. Lett. 1992. V. 68. P. 1992.
32. Comton A. K. // J. Phys. 1982. V. A15. P. 3665.
33. Харди Г. // Расходящиеся ряды. М.: ИИЛ, 1951.

Институт теоретической
и экспериментальной физики

Поступила в редакцию
20.04.92

Примечание при корректуре (23 сентября 1992 г.). После того, как давняя работа была закончена и направлена в печать, нам стала известна работа Лопец-Кабрера, Гудсона, Хершбаха и др. [31], посвященная высшим порядкам $1/D$ -разложения для молекулярного иона водорода. Используя нетривиальные численные методы, эти авторы показали, что асимптотика коэффициентов в области $\tilde{R} < R_c$ имеет вид (11), и определили зависимость борелевского параметра $\delta_0 = 1/2a$ от приведенного расстояния \tilde{R} . Аналитические формулы (26), (28) в [31] не приводятся. Расчет по (26) с высокой точностью (5–8 знаков) согласуется с численными значениями δ_0 , приведенными в указанной работе (определение \tilde{R} в [31] отличается от нашего множителем $3/2$).

V. S. Popov, A. V. Sergeev, A. V. Shcheblykin

ON THE STRUCTURE OF LARGE ORDERS IN $1/n$ -EXPANSION

The asymptotic behaviour of large orders in $1/n$ -expansion is found for the problems of quantum mechanics. The coefficients of $1/n$ -expansion $\varepsilon^{(k)}$ are shown to increase as a factorial $k! a^k$ at $k \rightarrow \infty$. The a -parameter vs coupling constant dependence is studied. The analytic formulas obtained agree with the numerical calculations. The structure of $1/n$ -expansion is considered in detail for the Yukawa, Hultén and funnel potentials, as well as for the Stark effect in hydrogen and for the molecular ion H_2^+ .