THE CALCULATION OF THE OSCILLATOR STRENGTHS AND CRITICAL SHIELDING PARAMETERS IN DEBYE POTENTIAL ON THE BACKGROUND OF THE PERTURBATION THEORY

A.V. Sergeev

Abstract

Oscillator strengths of electric dipole transitions between discrete spectrum levels in the Debye-Huckel potential are expressed as a perturbation series in inverse powers of the Debye radius. Recurrence relations for calculation of the perturbation theory coefficients are derived in terms of decompositions in eigenfunctions of the operator with purely discrete spectrum. The summation of the asymptotic series by the Pade approximant method allows one to calculate oscillator strengths in a broad range of screening radii.

The semiclassical perturbation theory for the screened atom is developed at the end of the paper. Critical screening parameters under which ionization occurs are expressed for states with a certain radial quantum number as a power series in $\lambda=[2/l(l+1)]^{1/2}$ where l is the azimuthal quantum number. The Pade approximants yield the values of the critical screening parameters with high precision (to the third decimal digit at least) for all $l \geqslant 1$.

ВЫЧИСЛЕНИЕ СИЛ ОСЦИЛЛЯТОРОВ И КРИТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ЭКРАНИРОВАНИЯ В ДЕБАЕВСКОМ ПОТЕНЦИАЛЕ НА ОСНОВЕ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

А.В.Сергеев

Государственный оптический институт им. С.И.Вавилова
Ленинград

I. Введение

Взаимодействие между электроном и ядром иона в плазме в рамках модели Дэбая - Хюккеля описывается экранированным кулоновским потенциалом

$$V(r) = -Z\,e^{-\alpha r}/r$$

(в атомной системе единиц). Здесь Z является зарядом ядра, α - константа экранирования, которая зависит от плотности и температуры плазмы. Аналогичного вида потенциалы используются в теории ядра и в физике твёрдого тела.

Бесконтактные методы диагностики высокотемпературной плазмы требуют детального знания различных спектроскопических характеристик экранированных ионов в широких пределах изменения параметров α, Z, что мотивирует развитие аналитических методов расчёта. Численное интегрирование уравнения Шредингера /I/ не всегда представляется удобным, так как связано с проведением громоздких вычислений для каждого набора α, Z и квантовых чисел в отдельности.

Теория возмущений (ТВ) по малому параметру α ранее использовалась /2 - II/ для нахождения энергии связанных состояний экранированных водородоподобных ионов. В настоящей работе методы ТВ применяются для вычисления сил осцилляторов и критических параметров экранирования. Значения, найденные суммированием асимптотических разложений, сравниваются с результатами, полученными ранее численными методами.

2. Вычисление сил осцилляторов при помощи разложения в ряд по параметру экранирования

Уравнение Шредингера для частицы в потенциале $U(r)$ после отделения угловых переменных и масштабного преобразования $r \to Zr$ сводится к одномерному уравнению на собственные значения:

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{2r^2} + V(r) - E_{n\ell}\right)P_{n\ell}(r) = 0, \tag{1}$$

где $V(r) = -e^{-\varepsilon r}/r$, $\varepsilon = \alpha/Z$ - параметр экранирования, $P_{n\ell}$ - умноженная на r радиальная волновая функция, n, ℓ - главное и азимутальное квантовые числа соответственно, $E_{n\ell}$ - энергия, делённая на Z^2.

Решение уравнения (1) с кулоновским потенциалом $V^{(0)}(r) = -1/r$ удобно выбрать в качестве нулевого приближения, а $\delta V(r) = V(r) - V^{(0)}(r)$ рассматривать как возмущение. Используя разложение

$$\delta V(r) = \sum_{k=1}^{\infty} V_k\, r^{k-1} \varepsilon^k,$$

где $V_k = (-1)^{k+1}/k!$, решение (1) может быть представлено в виде асимптотического ряда по степеням параметра экранирования ε:

$$P_{n\ell}(r) = \sum_{k=0}^{\infty} P_{n\ell}^{(k)}(r)\,\varepsilon^k; \tag{2а}$$

$$E_{n\ell} = E_{n\ell}^{(0)} + \delta E_{n\ell}, \quad \delta E_{n\ell} = \sum_{k=1}^{\infty} E_{n\ell}^{(k)} \varepsilon^k. \tag{2б}$$

Для вычисления коэффициентов разложений (2) использовались: гипервириальные соотношения и теорема Гельмана - Фейнмана /2, 4/, переход от уравнения Шредингера к уравнению Риккати (логарифмическая ТВ)/3,5 - 7/, разложения по собственным функциям оператора с чисто дискретным спектром /8 - 11/. Остановимся на методе, использованном в /10, 11/ и получим рекуррентные соотношения для вычисления коэффициентов разложений (2), удобные для реализации на ЭВМ. Преимущество рассматриваемого метода перед логарифмической ТВ состоит в том, что он одинаково применим как для основного, так и для возбуждённых состояний.

Посредством замены переменной $r \to x = ar$, $a = (-8E_{nl}^{(0)})^{1/2}$ и функции $P_{nl}(r) \to y(x) = x^{-1/2} P_{nl}(x/a)$ перейдём к уравнению

$$(L - 2/a)\, y = w y, \tag{3}$$

где $$L = -\frac{d}{dx} x \frac{d}{dx} + \frac{s^2}{4x} + \frac{x}{4}, \qquad s = 2l+1,$$

$$w(x) = \frac{2x}{a^2}\left(\delta E_{nl} - \delta V(x/a)\right).$$

Существенно то, что оператор L, введённый Фоком /I2/, обладает чисто дискретным спектром собственных значений

$$n_p = p + (s+1)/2, \quad p = 0, 1, 2, \ldots,$$

а его собственные функции

$$y_p(x) = \left(\frac{p!}{(p+s)!}\right)^{1/2} x^{s/2} e^{-x/2} L_p^{(s)}(x)$$

($L_p^{(s)}(x)$ - многочлен Лагерра) образуют базис гильбертова пространства, причём

$$\langle p | q \rangle \equiv \int_0^\infty y_p(x)\, y_q(x)\, dx = \delta_{pq}.$$

Известно /I3/, что матрица оператора умножения на x в базисе $\{y_p\}$ трёхдиагональна:

$$\langle p | x | q \rangle \equiv \int_0^\infty y_p(x)\, x\, y_q(x)\, dx =$$

$$= 2 n_p \delta_{pq} - [p(p+s)]^{1/2} \delta_{p,q+1} - [q(q+s)]^{1/2} \delta_{p+1,q}. \tag{4}$$

Матричные элементы оператора умножения на x^k можно вычислить из рекуррентных соотношений, вытекающих из тождества $x^k = x \cdot x^{k-1}$:

$$\langle p|x^k|q\rangle = \sum_{\substack{r\geqslant 0\\ |r-p|\leqslant 1}} \langle p|x|r\rangle\cdot\langle r|x^{k-1}|q\rangle. \tag{5}$$

При $\varepsilon = 0$ $w = 0$ и (3) является уравнением на собственные значения оператора L. В этом случае $y = y_{p_0}$, где $p_0 = n-\ell-1$ - радиальное квантовое число, $n = 2/a$ - собственное значение оператора L, совпадающее с главным квантовым числом. Выражая $E^{(0)}_{n\ell}$ через a, получаем $E^{(0)}_{n\ell} = -1/(2n^2)$.

Будем искать решение уравнения (3) в виде разложения

$$y = \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k \sum_{p=0}^{\infty} C_p^{(k)} y_p, \quad C_p^{(0)} = \delta_{pp_0}, \quad C_{p_0}^{(k)} = \delta_{k0}, \tag{6}$$

где $C_p^{(k)}$ - коэффициенты разложения поправочной функции k-го порядка по полной системе $\{y_p\}$.

Представим возмущающий оператор w в виде степенного ряда:

$$w = \sum_{i=1}^{\infty} w^{(i)}\varepsilon^i. \tag{7}$$

Подставляя (6), (7) в уравнение (3), домножая слева на $y_p(x)$ и интегрируя по x, получаем для всех $k \geqslant 1$:

$$(p-p_0)\, C_p^{(k)} = \sum_{i=1}^{k} \sum_{q=0}^{\infty} \langle p|w^{(i)}|q\rangle\, C_q^{(k-i)}, \tag{8}$$

где $\langle p|w^{(i)}|q\rangle \equiv \int_0^{\infty} y_p(x)\, w^{(i)}(x)\, y_q(x)\, dx =$

$$= \frac{n^2}{2}\left(E^{(i)}_{n\ell}\langle p|x|q\rangle - \left(\frac{n}{2}\right)^i V_i\langle p|x^i|q\rangle\right).$$

Из уравнения (8) при $p = p_0$ вытекает

$$E^{(k)}_{n\ell} = n^{-3}\Big(-\sum_{i=1}^{k-1}\sum_{q=0}^{\infty}\langle p_0|w^{(i)}|q\rangle\, C_q^{(k-i)} +$$

$$+\, 2\,(n/2)^{k+2}\, V_k\,\langle p_0|x^k|p_0\rangle\Big). \tag{9}$$

Соотношения (4), (5), (9) и (8) позволяют последовательно для $k = 1,2,3,\ldots$ вычислять коэффициенты ТВ $E_{nl}^{(k)}$ и $C_p^{(k)}$. Важно, что суммы по состояниям дискретного спектра, входящие в формулы ТВ (6), (8), (9), содержат только конечное число ненулевых слагаемых, так как $\langle p|x^k|q\rangle = \langle p|w^{(k)}|q\rangle = 0$ при $|p-q| > k$ и $C_p^{(k)} = 0$ при $|p-p_0| > k$, что доказывается индукцией по k. Рекуррентные соотношения для коэффициентов ТВ приведены также в /14/.

Число операций, которое требуется для вычисления на ЭВМ N коэффициентов ТВ, растёт $\sim N^4$, а объём памяти растёт $\sim N^2$.

Поправку к волновой функции,

$$P_{nl}^{(k)}(r) = r^{1/2} \sum_{\substack{p>0 \\ |p-p_0| \leq k}} C_p^{(k)} y_p\left(\frac{2}{n} r\right),$$

можно представить в виде произведения $r^{l+1} \exp(-r/n)$ на многочлен степени $p_0 + k$ от r.

Ранее силы осцилляторов и связанные с ними спектроскопические величины (радиальные интегралы, вероятности переходов, интенсивности линий) определялись численными /15, 17 - 20/ или вариационными /15, 16/ методами. В настоящей работе развивается ТВ для сил осцилляторов электрических дипольных переходов, которые, как известно /19/, могут быть записаны в виде

$$f_{n'l',nl} = \frac{2\max(l,l')}{3(2l'+1)} (E_{nl} - E_{n'l'}) I_{n'l',nl}^2, \tag{10}$$

где интеграл перехода определяется по формуле

$$I_{n'l',nl} = \left(\int_0^\infty P_{n'l'} r P_{nl} dr\right)\left(\int_0^\infty P_{n'l'}^2 dr\right)^{-1/2}\left(\int_0^\infty P_{nl}^2 dr\right)^{-1/2}. \tag{11}$$

После того, как получены разложения (2), силу осциллятора можно также разложить в ряд по степеням ε :

$$f_{n'l',nl} = \sum_{k=0}^{\infty} f_{n'l',nl}^{(k)} \varepsilon^k. \tag{12}$$

Коэффициент $f_{n'l',nl}^{(k)}$ можно выразить через $E_{n'l'}^{(i)} - E_{nl}^{(i)}$ и интегралы от $P_{n'l'}^{(i)}$, $P_{nl}^{(i)}$ с $i \leq k$, если подставить (2) в (10), (11) и выполнить алгебраические операции над степенными рядами.

В таблице I приведены значения $f^{(k)}_{n'\ell-1,n\ell}$ для всех n, $n' \leqslant 3$, $k \leqslant 10$.

Силу осциллятора как функцию от ε требуется уметь вычислять при всех $0 \leqslant \varepsilon < \varepsilon^*$, где ε^* – значение параметра экранирования, при котором происходит ионизация, для верхнего уровня энергии.

Как показывают расчёты, при $\varepsilon \lesssim 0{,}3\varepsilon^*$ члены ряда (I2) убывают по модулю, когда k меняется от 2 до I0, колебания частных сумм затухают. В этом случае непосредственное суммирование ряда даёт хорошее приближение к силе осциллятора.

При $\varepsilon \gtrsim 0{,}3\varepsilon^*$ частные суммы сначала колеблются около правильного значения, затем начинают сильно осциллировать и больше не служат хорошим приближением.

Для обобщённого суммирования ряда (12) в широкой области изменения параметра ε использовалось приближение цепной дробью, так как этот метод бывает эффективен для суммирования знакопеременных рядов, например, ряда (26) /4 - 6, II/. Цепная дробь

$$R_N(\varepsilon) = f^{(0)}_{n'\ell',n\ell} + \cfrac{c_2\varepsilon^2}{1+\cfrac{c_3\varepsilon}{1+\dots+c_N\varepsilon}} \qquad (13)$$

однозначно определяется из условия

$$R_N(\varepsilon) = S_N(\varepsilon) + O(\varepsilon^{N+1}), \qquad (14)$$

где

$$S_N(\varepsilon) = \sum_{k=0}^{N} f^{(k)}_{n'\ell',n\ell}\,\varepsilon^k .$$

Известно /2I/, что (I3) совпадает с аппроксимантом Паде $[M/L]$, где M и L - целые части чисел $(N+2)/2$ и $(N-1)/2$ соответственно.

Для примера в таблице 2 приведены значения частных сумм и цепных дробей для переходов $1s \to 2p$, $1s \to 3p$, $1s \to 4p$ при $\varepsilon = 0{,}05$. Величины $\varepsilon/\varepsilon^*$, характеризующие скорость сходимости, соответственно составляют: 0,23; 0,44; 0,74: В последних строках таблицы для сравнения даны силы осцилляторов из /I7/ и /20/.

Для всех переходов $n'\ell-1 \to n\ell$ при $\ell = 1,2,3$; $n, n' \leqslant 8$; $\varepsilon = 0{,}01$ силы осцилляторов, полученные суммированием (I2) совпадают с результатами численного решения /19/ с точностью не менее трёх десятичных знаков после запятой.

Проделанные вычисления показали, что цепные дроби $R_N(\varepsilon)$ при $N = 9 \div 12$ дают значения сил осцилляторов в хорошем согласии с результатами работы /16/ для всех $\varepsilon \lesssim 0{,}8\varepsilon^*$.

3. Применение полуклассической теории возмущений для вычисления критических параметров экранирования

В радиальное уравнение Шредингера (1) входит в качестве параметра коэффициент $\ell(\ell+1)/2$, стоящий перед $1/r^2$ в центробежном потенциале. Разложения по степеням $\lambda = [\ell(\ell+1)/2]^{-1/2}$ представляют собой ещё один вариант ТВ. Результаты, близкие к нулевому порядку этой ТВ, ранее были выведены методом квантования Бора /22/. Аналогичные разложения недавно использовались для расчёта эффекта Зеемана /23/ и для решения других задач квантовой механики и теории поля /24, 25/.

После введения новой переменной $t = \lambda^2 r$ и функции $Q_{n\ell}(t) = P_{n\ell}(\lambda^{-2}t)$ (1) записывается в виде

$$\left(-\frac{\lambda^2}{2}\frac{d^2}{dt^2} + v(t) - \tilde{E}_{n\ell}\right) Q_{n\ell}(t) = 0, \qquad (15)$$

где $v(t) = 1/t^2 - \exp(-\tilde{\varepsilon}t)/t$ – эффективный потенциал; $\tilde{\varepsilon} = \lambda^{-2}\varepsilon$, $\tilde{E}_{n\ell} = \lambda^{-2}E_{n\ell}$ – перенормированные параметр экранирования и энергия соответственно.

Уравнение (15) совпадает с одномерным уравнением Шредингера, в котором λ играет роль постоянной Планка.

Если $\lambda \to 0$ при фиксированном $\tilde{\varepsilon}$ и радиальном квантовом числе $p_0 = n - \ell - 1$, то $\tilde{E}_{n\ell}$ стремится к классическому значению $\tilde{E}^{(0)}_{n\ell}$, которое даётся минимумом потенциала v:

$$\tilde{E}^{(0)}_{n\ell} = v(t_0), \quad v'(t_0) = 0, \quad v''(t_0) > 0.$$

В низшем порядке по λ $E_{n\ell} \approx \lambda^2\tilde{E}^{(0)}_{n\ell}$ совпадает с энергией классической частицы, обращающейся по круговой орбите в поле с потенциалом $V(r)$ и обладающей моментом количества движения

$[\ell(\ell+1)]^{1/2}$. Следующие члены разложения энергии по степеням λ отвечают квантовым поправкам.

Для получения асимптотики энергии и волновой функции при $\lambda\to 0$ удобнее перейти от (15) к уравнению, описывающему ангармонический осциллятор, после чего коэффициенты асимптотических разложений определяются по формулам ТВ Релея - Шредингера.

Введём переменную $x=\lambda^{-1/2}(t-t_0)$, функцию $Y(x)=Q_{n\ell}(t_0+\lambda^{1/2}x)$ и преобразуем (15) к виду

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}+v(t_0+\lambda^{1/2}x)/\lambda-\tilde{E}_{n\ell}/\lambda\right)Y(x)=0. \qquad (16)$$

Функция $Y(x)$ определена при всех $x>-\lambda^{-1/2}t_0$.

Разложим эффективный потенциал $v(t)$ в ряд Тейлора относительно его точки минимума t_0 и подставим это разложение в (16):

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}+v_2x^2+\sum_{k=3}^{\infty}v_k\lambda^{k/2-1}x^k-W\right)Y(x)=0, \qquad (17)$$

где $W=(\tilde{E}_{n\ell}-v_0)/\lambda$, $v_k=\frac{1}{k!}\frac{d^kv}{dt^k}(t_0)$.

В пределе $\lambda\to 0$ область определения функции $Y(x)$ достигает $(-\infty,\infty)$, сумма по k в (17) обращается в нуль и (17) сводится к уравнению для гармонического осциллятора с частотой $\omega=(2v_2)^{1/2}$. Для состояния, которое описывается волновой функцией с p_0 узлами, $W=W^{(0)}=(p_0+1/2)\omega$, $Y\equiv Y_{p_0}$. В этом приближении $E_{n\ell}\simeq v_0\lambda^2+(p_0+1/2)\omega\lambda^3$.

В общем случае (17) описывает ангармонический осциллятор. Считая сумму по k в (17) возмущением, будем искать решение в виде разложений по параметру возмущения $\lambda^{1/2}$:

$$W=\sum_{k=0}^{\infty}W^{(k)}\lambda^{k/2}; \qquad (18а)$$

$$Y(x)=\sum_{k=0}^{\infty}\lambda^{k/2}\sum_{p=0}^{\infty}B_p^{(k)}Y_p(x),\quad B_p^{(0)}=\delta_{pp_0},\quad B_{p_0}^{(k)}=\delta_{k0}. \qquad (18б)$$

Здесь Y_p $(p=0,1,2,\ldots)$ - собственные функции гамильтониана гармонического осциллятора $-d^2/dx^2+\omega^2x^2$, образующие полную ортонормированную систему.

Подставляя разложения (18) в (17), домножая слева на $Y_p(x)$ и интегрируя по x, получим рекуррентное соотношение для вычисления $B_p^{(k)}$, $W^{(k)}$ при $k \geqslant 1$:

$$\omega(p-p_0)B_p^{(k)}=\sum_{i=1}^{k}\Big(W^{(i)}B_p^{(k-i)}-v_i\sum_{q=0}^{\infty}B_q^{(k-i)}\int_{-\infty}^{\infty}Y_p x^i Y_q\,dx\Big).$$

Так как собственное число W инвариантно относительно замены в уравнении (17) $\lambda^{1/2}$ на $-\lambda^{1/2}$, то для всех нечётных k $W^{(k)}=0$. Поэтому энергия может быть разложена по целым степеням λ:

$$\tilde{E}_{nl}=\sum_{k=0}^{\infty}\tilde{E}_{nl}^{(k)}\lambda^k, \tag{19}$$

где $\tilde{E}_{nl}^{(0)}=v_0$, $\tilde{E}_{nl}^{(k)}=W^{(2k-2)}$ для $k \geqslant 1$.

Коэффициенты $\tilde{E}_{nl}^{(k)}$ имеют вид чётных или нечётных многочленов степени k от переменной $\mu \equiv p_0+1/2$. Например,

$$\tilde{E}_{nl}^{(2)}=(3/16)(4\mu^2+1)v_4/v_2-(1/64)(60\mu^2+7)v_3^2/v_2^2.$$

Очевидно, что при $\tilde{\varepsilon}=0$ коэффициенты $\tilde{E}_{nl}^{(k)}$ совпадают с коэффициентами разложения в ряд по степеням λ кулоновской энергии, выраженной через переменные μ и λ:

$$E_{nl}^{(0)}=-2\lambda^2\left(\sqrt{\lambda^2+8}+2\mu\lambda\right)^{-2}=$$

$$=-\frac{1}{4}\lambda^2+\frac{\sqrt{2}}{4}\mu\lambda^3+(1-12\mu^2)/32\ \lambda^4+\ldots$$

Особый интерес представляет использование ТВ для получения критического параметра ε^*, при котором энергия уровня обращается в нуль. Ранее критические параметры экранирования находились как численным /1/, так и аналитическими /26 - 29/ методами.

Будем искать ε^* в виде разложения:

$$\varepsilon^*=\lambda^2\tilde{\varepsilon}^*,\qquad \tilde{\varepsilon}^*=\sum_{k=0}^{\infty}\tilde{\varepsilon}_k^*\lambda^k. \tag{20}$$

Приравнивая энергию нулю в низшем порядке по λ, получаем

$v_0 = v(t_0) = 0$. Решая это уравнение относительно $\tilde{\varepsilon}$ совместно с $v'(t_0) = 0$, находим $\tilde{\varepsilon}_0^* = e^{-1}$. Коэффициент $\tilde{\varepsilon}_k^*$ для $k \geqslant 1$ можно выразить через $\tilde{\varepsilon}_i^*$ при $i < k$, если решить линейное относительно $\tilde{\varepsilon}_k^*$ уравнение, вытекающее из условия $\tilde{E}_{n\ell}^{(k)} = 0$.

Приведём аналитическую формулу для 6 членов разложения (20):

$$\tilde{\varepsilon}^* = e^{-1}\Big[1 - \mu\lambda + \left(\frac{35}{48}\mu^2 - \frac{47}{576}\right)\lambda^2 -$$
$$-\mu(12788\mu^2 - 3385)/(2^{10}\,3^3)\,\lambda^3 + (645792720\mu^4 - 284523960\mu^2 +$$
$$+ 17520481)/(2^{17}\,3^6\,5^2)\,\lambda^4 - \mu(342924011104\mu^4 -$$
$$- 21674608440\mu^2 + 3494487713)/(2^{22}\,3^7\,5^2)\,\lambda^5 + \ldots\Big].$$

Отметим, что, дифференцируя почленно (19) по переменной $\tilde{\varepsilon}$ при $\tilde{\varepsilon} = \tilde{\varepsilon}^*$, можно также разложить в ряд производную энергии по ε при $\varepsilon = \varepsilon^*$:

$$\frac{d}{d\varepsilon} E_{n\ell}\Big|_{\varepsilon=\varepsilon^*} = \frac{d}{d\tilde{\varepsilon}} \tilde{E}_{n\ell}\Big|_{\tilde{\varepsilon}=\tilde{\varepsilon}^*} = e^{-1}\left(1 - \frac{3}{2}\mu\lambda + \cdots\right).$$

Численные значения 10 коэффициентов разложения (20) для состояний с $p_0 = 0, 1, 2, 3$ приведены в табл. 3.

Поправки $\tilde{\varepsilon}_k^*$ принимают наименьшие по модулю значения для состояний с $\ell = n - 1$, или при $p_0 = 0$. Сумма 5 членов ряда (20) в этом случае приближает ε^* для всех $\ell > 0$ с относительной ошибкой менее 0,03%. Значения этих частных сумм с точностью порядка величины шестого члена приведены во втором столбце табл. 4.

При $p_0 > 0$ частные суммы ряда (20) осциллируют вокруг правильного значения и при $\ell \lesssim p_0$ уже не дают удовлетворительного приближения к ε^*. Однако, как свидетельствуют расчёты, при $p_0 > 0$ аппроксиманты Паде улучшают сходимость приближений. В последних четырёх столбцах табл. 4 приведены значения ε^*, полученные с использованием аппроксимантов $[5/4]$ и $[5/5]$. Указаны только их общие десятичные знаки.

В табл. 4 также даны для сравнения значения ε^*, найденные численным интегрированием /1/ и вычисленные по формуле, выведенной из условия квазиклассического квантования в пределе $n \approx \ell \gg 1$ /26/:

$$\varepsilon^* \approx \frac{2}{e(\ell+1/2)^2}\left(1 + \frac{\sqrt{2}\,\mu}{\ell + 1/2}\right)^{-1}. \qquad (21)$$

Выражение (21) правильно учитывает только 2 первых члена асимптотики ε^* при $\lambda \to 0$.

Как показал расчёт, проведённый для всех $\rho_0 \leqslant 4$, аппроксиманты Паде [5/4] и [5/5] приближают ε^* при $\ell = 1$, $\ell = 2$ и $\ell \geqslant 3$ с относительными ошибками менее $4 \cdot 10^{-3}$, $2 \cdot 10^{-4}$, $3 \cdot 10^{-5}$ соответственно.

Автор благодарен А.И.Перстюку за помощь и полезные советы.

Табл.I. Коэффициенты разложения сил осцилляторов по степеням параметра экранирования

K	$f^{(k)}_{10,21}$	$f^{(k)}_{10,31}$	$f^{(k)}_{20,21}$	$f^{(k)}_{20,31}$
0	4,I6I97(-I)	7,9I0I6(-2)	0,00000(0)	4,34865(-I)
I	0,00000(0)	0,00000(0)	0,00000(0)	0,00000(0)
2	-6,7285I(0)	-7,32678(0)	9,00000(0)	-3,62678(I)
3	2,85720(I)	7,73284(I)	-3,60000(I)	3,50055(2)
4	-2,48753(2)	-I,33733(3)	3,5I000(2)	-6,28550(3)
5	I,98816(3)	2,280I4(4)	-2,74802(3)	I,III6I(5)
6	-I,83547(4)	-4,30II7(5)	2,6166I(4)	-2,I8I63(6)
7	I,78833(5)	8,6567I(6)	-2,54237(5)	4,50596(7)
8	-I,85442(6)	-I,84375(8)	2,64308(6)	-9,76629(8)
9	2,0II34(7)	4,I0687(9)	-2,85226(7)	2,I9940(I0)
I0	-2,26985(8)	-9,49535(I0)	3,I9860(8)	-5,II977(II)

K	$f^{(k)}_{30,21}$	$f^{(k)}_{30,31}$	$f^{(k)}_{21,32}$	$f^{(k)}_{31,32}$
0	-4,07686(-2)	0,00000(0)	6,95785(-I)	0,00000(0)
I	0,00000(0)	0,00000(0)	0,00000(0)	0,00000(0)
2	I,34066(0)	5,40000(I)	-3,96583(I)	4,50000(I)
3	-2,74856(I)	-4,86000(2)	3,6956I(2)	-4,05000(2)
4	6,26969(2)	9,09189(3)	-8,27772(3)	9,55II0(3)
5	-I,20699(4)	-I,55456(5)	I,40060(5)	-I,59I67(5)
6	2,48533(5)	3,05I8I(6)	-2,82886(6)	3,273I2(6)
7	-5,22I20(6)	-6,23624(7)	5,7I2I2(7)	-6,59362(7)
8	I,I4I67(8)	I,34499(9)	-I,222I9(9)	I,4I680(9)
9	-2,58I99(9)	-3,00905(I0)	2,69257(I0)	-3,II7I8(I0)
I0	6,0279I(I0)	6,96036(II)	-6,I35I4(II)	7,09364(II)

Табл.2. Сходимость частных сумм и цепных дробей для сил осцилляторов переходов I$s \to 2p$, I$s \to 3p$ и I$s \to 4p$ при ε = 0,05

N	$1s \to 2p$		$1s \to 3p$		$1s \to 4p$	
	$S_N(\varepsilon)$	$R_N(\varepsilon)$	$S_N(\varepsilon)$	$R_N(\varepsilon)$	$S_N(\varepsilon)$	$R_N(\varepsilon)$
2	0,39938	0,3993754	0,06I	0,060785	0,005	0,005303
3	0,40295	0,4023214	0,070	0,067I12	0,03	0,0I6694
4	0,40I39	0,40I86376	0,062	0,065968	-0,003	0,0I4508
5	0,4020I	0,40I835I0	0,069	0,065938	0,04	0,0I4903
6	0,40I73	0,40I76797	0,062	0,065974	-0,03	0,0I4652
7	0,40I87	0,40I8I965	0,069	0,0658I8	0,09	0,0I45I6
8	0,40I79	0,40I8I920	0,062	0,0658I2	-0,I	0,0I4404
9	0,40I83	0,40I8I93I	0,070	0,0658I5	0,3	0,0I4493
I0	0,40I8I	0,40I8I92I	0,06I	0,0658I5	-0,5	0,0I4492
[I7]	0,402		0,0658		0,0I45	
[20]	0,40I65		0,06579		0,0I448	

Табл.3. Коэффициенты разложения ε^*_K критического параметра экранирования

$K \backslash p_0$	0	I	2	3
0	3,67879(-I)	3,67879(-I)	3,67879(-I)	3,67879(-I)
I	-I,83940(-I)	-5,5I8I9(-I)	-9,9I699(-I)	-I,28758(0)
2	3,70434(-2)	5,73534(-I)	I,64652(0)	3,25599(0)
3	I,25075(-3)	-5,067I2(-I)	-2,54607(0)	-7,I3775(0)
4	-2,04030(-3)	4,07594(-I)	3,6I375(0)	I,43902(I)
5	-I,75748(-4)	-3,08804(-I)	-4,84296(0)	-2,74220(I)
6	-I,5038I(-5)	2,23664(-I)	6,22295(0)	5,0I453(I)
7	-6,80686(-5)	-I,56989(-I)	-7,74I2I(0)	-8,88272(I)
8	9,53895(-5)	I,07976(-I)	9,38360(0)	I,53386(2)
9	4,I2965(-4)	-7,I6574(-2)	-I,II306(I)	-2,59344(2)
I0	8,63092(-4)	4,93655(-2)	I,29695(I)	4,30777(2)

Табл.4. Критические параметры экранирования ε^* [а]

ℓ \ P_0	0	I	2	3	4
I	220 220,2[в] 222,2[с]	II3 II2,7[в]	68,0 67,884[в]	45,2 45,I88[в]	32,I 32,I76[в]
2	9I,35 9I,349[в] 9I,77[с]	58,II 58,I06[в] 63,68[с]	40,03 40,024[в]	29,I7 29,I67[в]	22,I6I 22,I62[в]
3	49,83I 49,83I[в] 49,97[с]	35,3894 35,390[в] 37,40[с]	26,3507 26,350[в] 29,88[с]	20,3422 20,342[в]	I6,I565 I6,I57[в]
4	3I,3436 3I,344[в] 3I,40[с]	23,799II 23,799[в] 24,69[с]	I8,64622 I8,646[в] 20,35[с]	I4,98086 I4,98I[в] I7,30[с]	I2,286I4 I2,286[в]
5	2I,5246 2I,525[в] 2I,55[с]	I7,095I36 I7,094[в] I7,55[с]	I3,883520 I3,883[в] I4,8I[с]	II,485754 II,486[в] I2,80[с]	9,65II69 II,28[с]
6	I5,69I09	I2,87I464	I0,736I48	9,0829525	7,778558
7	II,94453	I0,039759	8,5487078	7,36II94I	6,40I07I5
8	9,39600I	8,0492855	6,9672640	6,0857726	5,35878I2
9	7,584I26	6,597033I	5,7870975	5,II49I54	4,55I3450
I0	6,250053	5,5050907	4,883I398	4,3589252	3,9I3274I
II	5,2394II4	4,6634I88	4,I754942	3,7588237	3,4003773
I2	4,4554970	4,00099I7	3,6III875	3,2745490	2,98I97I4
I3	3,8352262	3,4703025	3,I53976I	2,878I204	2,6362I89
I4	3,336024I	3,03860I0	2,7783854	2,5495I90	2,3472385
I5	2,9283I35	2,68276I	2,4660868	2,274II67	2,I032588

[а] Все значения умножены на 10^3. Значения, приведённые в первых строках для каждого ℓ, получены в настоящей работе суммированием полуклассического разложения.

[в] Значения, полученные численным интегрированием /I/.

[с] Значения, вычисленные по приближённой формуле (2I).

Литература

1. Rogers F.G., Graboske H.C., Harwood D.J. Phys. Rev., 1970, A1, 1577.
2. Grant M., Lai C.S. Phys. Rev., 1979, A20, 718.
3. Lai C.S., Suen B. Phys. Rev., 1980, A21, 1100.
4. Lai C.S. Phys. Rev., 1981, A23 455.
5. Вайнберг В.М., Елецкий В.Л., Попов В.С. ЖЭТФ, 1981, 81, 1567.
6. Аллилуев С.П., Вайнберг В.М., Попов В.С. ДАН СССР, 1982, 265, 597.
7. Privman V. Phys. Lett., 1981, A81, 326.
8. Bednar M. Ann. Phys., 1973, 75, 305.
9. Bechler A. Ann. Phys., 1977, 108, 49.
10. Шерстюк А.И., Школьник А.М. Изв. АН СССР, сер. физ., 1977, 41, 2648.
11. Сергеев А.В., Шерстюк А.И. ЖЭТФ, 1982, 82, 1070.
12. Фок А.В. Начала квантовой механики. М.:Наука, 1976, с.194-202.
13. Павинский П.П., Шерстюк А.И. Вестник ЛГУ, 1968, 22, 11.
14. Müller-Kirsten H.J.W., Sharma L.K. J. Math. Phys., 1982, 23, 367.
15. Herman L., Couland G. J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 1970, 10, 1257.
16. Roussel K.M., O'Connel R.F. Phys. Rev., 1974, A9, 52.
17. Weisheit J.C., Shore B.W. Astrophys. J., 1974, 194, 519.
18. Чижюнас А.Р., Богданович П.О., Савукинас А.Ю. Опт. и спектр., 1975, 38, 174.
19. Schlüter D. J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 1980, 23, 467.
20. Hölne F.B., Zimmermann R. J. Phys., 1982, B15, 2551.
21. Baker G.A. Essentials of Pade approximants. N.Y.: Academic press, 1975.
22. Rawls J.M., Schulz M. Amer. J. Phys., 1965, 33, 444.
23. Bender C.M. et al. Phys. Rev., 1982, A25, 1305.
24. Mlodinow L.D., Papanicolaou N. Ann. Phys., 1980, 128, 314; 1981, 131, 1.
25. Mlodinow L.D. Progr. Part. Nucl. Phys., 1981, 8, 387.
26. Totsuji H. J. Phys. Soc. Jpn., 1971, 31, 584.
27. Трубников Б.А., Явлинский Ю.Н. ЖЭТФ, 1965, 48, 1618.
28. Седов В.Л. ДАН СССР, 1969, 188, 77.
29. Kesarwani R.N., Varshni Y.P. J. Math. Phys., 1978, 19, 819.