

На правах рукописи

УДК 530.145.7

СЕРГЕЕВ Алексей Витальевич

РАЗВИТИЕ АНАЛИТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ
ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ
ДЛЯ РАСЧЕТА АТОМОВ И ИОНОВ

01.04.02 - теоретическая и математическая
физика

А в т о р е ф е р а т
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Работа выполнена в Государственном ордена Ленина и ордена Октябрьской революции оптическом институте имени С.И.Вавилова.

Научный руководитель: кандидат физико-математических наук,
старший научный сотрудник
А.И.ШЕРСТЯК.

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук
Р.Я.ДАМБУРГ,
кандидат физико-математических наук
Е.А.СОЛОВЬЕВ.

Ведущая организация: Институт теоретической и эксперимен-
тальной физики.

Защита состоится "23" октября 1986 г. в 15 час.
30 мин. на заседании специализированного Совета К 063.57.17
по присуждению учёной степени кандидата физико-математических
наук в Ленинградском государственном университете имени А.А.Жда-
нова по адресу: 199164, Ленинград, Университетская наб., 7/9.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ЛГУ.

Автореферат разослан "11" сентября 1986 г.

Учёный секретарь
специализированного совета

А.А.Андрянов

В в е д е н и е. До семидесятых годов возможности использования методов теории возмущений (ТВ) в квантовой механике были довольно ограниченными. Причина состоит в том, что ряды ТВ часто являются расходящимися. Чтобы извлечь разумную информацию из таких рядов, приходится применять специальные обобщённые методы суммирования, для чего требуется знать значительное количество коэффициентов ряда. В первые годы развития квантовой механики определение этих коэффициентов было невозможно, так как ещё не существовало вычислительных машин. Поэтому в нерелятивистской квантовой механике обычно ограничивались низшими порядками ТВ или применяли вариационные методы. В результате исследований, проводившихся в течение последних пятнадцати лет, произошёл пересмотр проблемы ТВ и было показано, что информация о коэффициентах ТВ высокого порядка полезна при суммировании соответствующего расходящегося ряда. Таким путём ТВ высокого порядка стала очень сильным методом в различных областях теоретической физики и, в частности, в квантовой механике (см. [1]).

Ц е л ь р а б о т ы. В диссертации исследуется применимость ТВ высокого порядка к задачам теории атома, в особенности к задаче об определении уровней энергии частицы в поле экранированного кулоновского потенциала Дебая - Хюккеля. Схема исследования аналогична той, которой придерживались ранее в случаях ангармонического осциллятора и атома водорода во внешнем электрическом или магнитном поле. Первый этап работы сводится к разработке метода нахождения высоких порядков ТВ (вывод рекуррентных соотношений) и к вычислению на ЭВМ достаточного числа (как правило, несколько десятков) коэффициентов ряда. На втором этапе подбирается подходящий метод обобщённого суммирования ряда, вычисляются физически важные величины и результаты сравниваются со значениями, полученными другими методами.

Н о в ы е з н а н и я.

1. С использованием разложений по собственным функциям оператора, введённого Фоком и имеющего чисто дискретный спектр, получены рекуррентные соотношения для коэффициентов ТВ по степеням параметра экранирования, удобные для реализации на ЭВМ. При изучении зависимости коэффициентов ТВ от квантовых чисел выведен

ряд точных соотношений, вытекающих из симметрии задачи.

2. Доказано непосредственным расчётом, что обобщённые методы суммирования позволяют получать с высокой точностью энергию как связанных, так и квазистационарных состояний, силы осцилляторов и критические параметры экранирования.

3. Для расчёта квазистационарных состояний применены новые аппроксимации, подобранные с учётом характерного поведения энергии как функции параметра экранирования у порога ионизации. Получена с высокой точностью энергия и ширина квазистационарных уровней вблизи порога ионизации, найдены коэффициенты асимптотического разложения энергии относительно особой точки.

4. Для многочленов, участвующих в определении обобщённых аппроксимаций Паде, выведены рекуррентные соотношения, обобщающие известные соотношения для числителей и знаменателей подходящих дробей.

5. Изучена применимость полуклассической ТВ для частицы в потенциале Дебая - Хюккеля и для трёх частиц с кулоновским взаимодействием. Приведён алгоритм вычисления высоких порядков полуклассического разложения. Продемонстрирована эффективность метода на примере определения критических параметров экранирования и энергии гелиеподобных ионов.

Н а у ч н а я и п р а к т и ч е с к а я з н а ч и м о с т ь результатов исследования. Уравнения квантовой механики, как правило, точно не интегрируются, поэтому для их решения приходится пользоваться различными приближёнными методами. Применение численных методов не всегда представляется удобным, так как связано с проведением громоздких вычислений для каждого набора параметров задачи в отдельности. Кроме того, в таком подходе возможности исследования функциональных свойств решения весьма ограничены. Метод ТВ позволяет приближать искомую функцию аналитическим выражением с высокой точностью в широком интервале параметров задачи.

Результаты, полученные в работе, могут найти практическое применение при интерпретации спектра высокотемпературной плазмы и для расчёта состояний трёхчастичных систем.

А п р о б а ц и я р а б о т ы. Результаты работы докладывались на Всесоюзных конференциях по теории атомов и атомных

спектров (Тбилиси, 1981; Минск, 1983; Ужгород, 1985), на двух всесоюзных семинарах, на семинаре в Институте физики АН Латв.ССР, на семинарах кафедры квантовой механики ЛГУ и лаборатории ГОИ.

Структура и объём диссертации. Структура исследования схематически изображена на диаграмме. Разделы I - 4 диссертации посвящены соответственно вычислению высших порядков ТВ для экранированного кулоновского потенциала, суммированию рядов для связанных состояний, расчёту квазистационарных состояний и развитию методов полуклассической ТВ. В двух приложениях представлены побочные результаты исследования. Общее количество машинописных страниц - 170, текста (без списка литературы, таблиц и рисунков) - 116 с., таблиц - 19, рисунков - 7, количество использованных источников - 155.

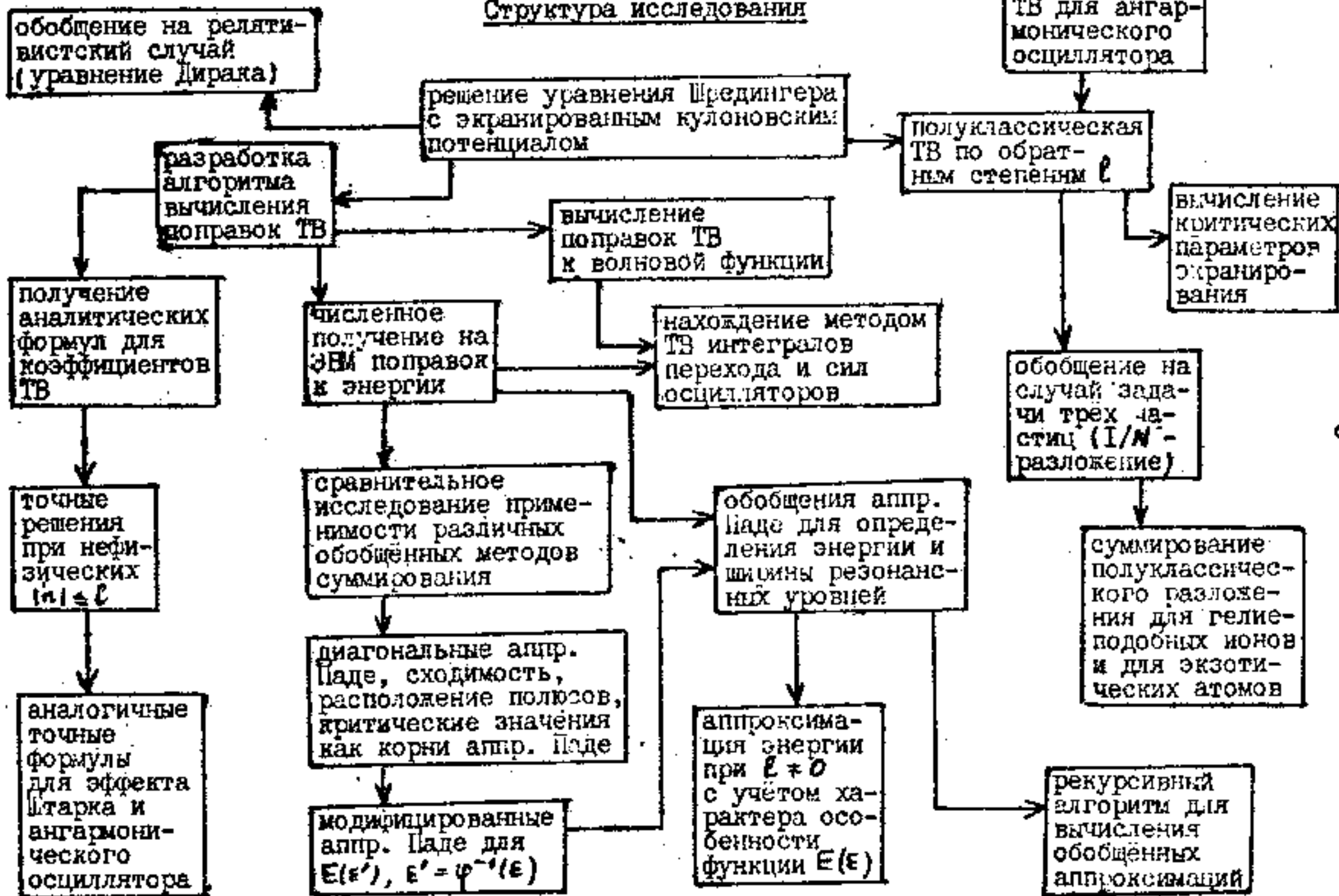
2. СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

В первом разделе строится ТВ для состояний частицы в сферически-симметричном поле с потенциалом вида $U(r) = -Zv(\lambda r)/r$ где v - некоторая функция, которая может быть разложена при $t \rightarrow 0$ в асимптотический ряд $\sum_{n=0}^{\infty} v_n t^n$, причём $v_0 = 1$. В качестве параметра возмущения используется величина $\epsilon = \lambda/Z$. В частном случае $v(t) = e^{-t}$ $U(r)$ является потенциалом Дебая - Хюккеля и аппроксимирует потенциал ядра, экранированный свободными электронами плазмы (Z - заряд ядра, λ^{-1} - дебаевский радиус экранирования). Потенциал $-Ze^{-\lambda r}/r$ имеет также приложения в теории ядра, физике твёрдого тела. Функции $U(r)$ более общего вида могут быть использованы для приближения потенциала атомного остова при расчётах атомов с одним валентным электроном.

В настоящей работе для получения рекуррентных соотношений для поправок ТВ используется предложенный ранее [2] метод. Радиальное уравнение Шредингера для частицы в поле экранированного кулоновского потенциала записывается в виде уравнения на собственные значения оператора

$$T_s = p \alpha p + s^2/4x + \alpha/4, \quad s = 2\ell + 1,$$

Структура исследования



возмущенного потенциалом вида $\sum_{k=1}^{\infty} E^k f_k x^k$. Оператор T_3 был впервые введен Фоком. Его собственные функции образуют полную ортонормированную систему. Матрица оператора координаты на базисе собственных функций оператора T_3 имеет трехдиагональный вид. Это приводит к тому, что суммы по промежуточным состояниям, входящие в рекуррентные соотношения для коэффициентов ТВ, содержат лишь конечное число слагаемых, поэтому их можно получить в замкнутом аналитическом виде. Поправки к энергии, $E^{(k)}$, имеют вид многочленов от n^2 и $\ell(\ell+1)$, где n - главное квантовое число, ℓ - орбитальный момент. Коэффициенты многочленов в частном случае потенциала Дебая - Хюккеля найдены в виде рациональных дробей для всех $k \leq 13$.

Было замечено, что вычисление многочленов $E^{(k)}(n, \ell)$ значительно упрощается, когда квантовые числа n, ℓ принимают нефизические значения $\ell = 1/2, 1, 3/2, \dots, n = -\ell, -\ell+1, \dots, \ell, n \neq 0$ (приложение 1). Это обстоятельство предлагается использовать как для проверки правильности формул для коэффициентов разложений, так и для последующей экстраполяции в физическую область. Состояния, соответствующие нефизическим квантовым числам $|n| \leq \ell$, возникают при рассмотрении конечномерных неунитарных представлений группы $O(2, 1)$, являющейся динамической группой симметрии невозмущенной задачи. Волновая функция для таких состояний неограниченно возрастает при $n \rightarrow 0$. Уравнение на собственные значения энергии в этом случае сводится к однородной системе линейных алгебраических уравнений для компонент S -мерного вектора. Аналогичные соотношения выведены в приложении 1 для эффекта Штарка и ангармонического осциллятора.

В подразделе 1.1 также получены в численном виде и приведены в таблицах коэффициенты разложения энергии $E^{(k)}(n, \ell)$ для всех $n \leq 3, k \leq 130$ и сил осцилляторов $f_{n', \ell, n}^{(k)}$ для всех $n, n' \leq 3, k \leq 10$ (в случае потенциала Дебая - Хюккеля). Рассмотрен случай сплошного спектра ($E > 0$).

В подразделе 1.2 метод вычисления коэффициентов ТВ, основанный на разложениях по системе собственных функций введенного Фоком оператора, используется в более общем случае уравнения Дирака. Поправки к энергии получены в аналитическом виде (как многочлены) при всех $k \leq 7$ и численно - при $k \leq 25$.

Во втором разделе методы суммирования расходящихся рядов применяются для расчёта связанных состояний экранированного атома.

В подразделе 2.1 обсуждаются расходимость рядов в квантовой механике и обобщённые методы суммирования. Аргумент Дайсона, или аргумент перемены знака [1] свидетельствует о том, что ряд ТВ для потенциала $\sim e^{-\epsilon^2/\alpha}$ расходится при любом ϵ . Подчеркивается, что и вообще ряды ТВ в квантовой механике и теории поля за редкими исключениями являются расходящимися. Наиболее известными и детально исследованными примерами расходящихся рядов в квантовой механике являются ангармонический осциллятор и атом водорода во внешних полях.

В силу расходимости ТВ значения искомой функции могут быть приближённо определены посредством обычного суммирования только при достаточно малых значениях параметра разложения. Поправки высших порядков значительно превышают по абсолютной величине невозмущённое значение и могут достигать астрономических величин. Таким образом, ТВ в обычном понимании становится совершенно бессмысленной. С другой стороны, все коэффициенты расходящегося ряда ТВ несут информацию об искомой функции. Вопрос заключается в том, каким образом наиболее эффективно эту информацию можно использовать для практического вычисления искомой физической величины в широкой области параметра возмущения. Ответ на этот вопрос дают различные способы обобщённого суммирования ТВ, которые по существу сводятся к аналитическому продолжению искомой функции за пределы круга сходимости.

Как показано в работе [2], непосредственное суммирование нескольких первых членов ряда ТВ для энергии экранированного атома не даёт удовлетворительных результатов уже при $\epsilon \gtrsim 0,3\epsilon_c$, где ϵ_c - критическое значение параметра экранирования, при котором уровень выходит в сплошной спектр. Вычисление высоких порядков ТВ в этом случае оказывается бесполезным. Однако применение обобщённых методов суммирования расходящихся рядов позволяет использовать информацию, заключённую в коэффициентах разложения, для нахождения искомой функции в достаточно широкой области изменения ϵ . Эффективность таких методов зависит в первую очередь от числа членов разложения, которые могут быть учтены. Следова-

тельно, для их применения вычисление высоких порядков ТВ оказывается существенным.

Далее даются определения методов суммирования Хаттона, Че-заро, Шанкса, Эйлера и Паде.

В подразделе 2.2 применимость различных методов суммирования исследуется на конкретном примере ряда ТВ для энергии основного состояния электрона в поле с экранированным кулоновским потенциалом $-e^{-\ell r}/r$. Точность обобщенного метода суммирования характеризуется средним квадратичным разбросом \mathcal{D} нескольких подряд идущих обобщенных частных сумм. Зависимость \mathcal{D} от параметра ϵ для различных методов суммирования приводится на графиках. Сравнение различных методов суммирования показало, что для данного ряда метод аппроксимаций Паде (АП) наиболее удобен. Преимущества метода АП особенно заметно проявляются при использовании достаточно большого (более двадцати) коэффициентов исходного ряда.

Путем построения таблицы АП $[L/M]$ со всевозможными индексами L, M показано, что быстрее всего сходятся АП около диагонали ($L = M$).

Показано также, что относительная точность, с которой должны быть вычислены учитываемые при построении АП коэффициенты разложения, должна быстро возрастать с ростом порядка аппроксимации.

В подразделе 2.3 исследуется сходимость диагональных АП к энергии для основного и ряда возбужденных состояний. Вычисления показывают, что при $\ell = 0$ АП быстро сходятся при $0 \leq \epsilon \leq \epsilon_c$, а для основного состояния - даже до $\epsilon \sim 10 \epsilon_c$. Для состояний с $\ell \neq 0$ АП сходятся несколько медленнее.

Критические значения ϵ_c , полученные как корни АП, и силы осцилляторов, полученные суммированием методом АП, полностью согласуются с результатами, найденными ранее численными методами.

Подраздел 2.4 посвящен суммированию расходящихся рядов в релятивистском случае. В случае уравнения Дирака с потенциалом Юкавы методом АП вычислены энергии связанных состояний при всех значениях ϵ вплоть до порога ионизации и результаты представлены в виде графиков. Вычислены также релятивистские значения критических параметров экранирования и величина дублетного рас-

цепления уровня $2p$.

В третьем разделе разрабатываются обобщенные методы суммирования рядов для расчета квазистационарных состояний.

При $\ell \neq 0$ на отрезке (ϵ_c, ∞) накапливается много полюсов A_n , и поэтому последовательность A_n становится расходящейся. Такое расположение полюсов характерно в том случае, если функция имеет разрез, и отражает то обстоятельство, что в данном случае мы имеем дело с квазистационарными состояниями и функция $E(\epsilon)$ становится неоднозначной функцией комплексной переменной ϵ . Цепочка полюсов при $\epsilon > \epsilon_c$ воспроизводит разрыв функции на разрезе (ϵ_c, ∞) . При $\ell \neq 0$ и $\epsilon > \epsilon_c$ квазистационарные состояния возникают из-за наличия центробежного потенциального барьера.

Чтобы приблизить посредством A_n некоторую многозначную функцию, предложено ввести новую переменную t так, чтобы $\epsilon = \varphi(t)$, и потребовать, чтобы функция, обратная $\varphi(t)$, была многозначной. После этого приближенные значения энергии даются композицией $[E \circ \varphi]^{(L/M)} \circ \varphi^{-1}(\epsilon)$. Первоначально была выбрана функция $\varphi(t) = a(e^t - 1)$, где $a \in (-\epsilon, 0)$. Однако, как показали расчеты, при таком выборе $\varphi(t)$ точность определения $\text{Re } E$ и $\text{Im } E$ в области $\epsilon \sim \epsilon_c$ остается низкой из-за медленной сходимости аппроксимаций. Позднее в работе Вайнберга и Попова [3] для аналогичной цели было испытано отображение $\varphi(t) = \epsilon_c(2t - t^2)$, содержащее в явном виде заранее заданное значение параметра ϵ_c . Соответствующая обратная функция $\varphi^{-1}(\epsilon) = 1 - \sqrt{1 - \epsilon/\epsilon_c}$ имеет точку ветвления типа квадратного корня при $\epsilon = \epsilon_c$ и правильно воспроизводит разрез (ϵ_c, ∞) у искомой функции. Вычисления показали, что в широкой области ϵ выше порога преобразования A_n дают комплексные значения $E(\epsilon)$ с точностью 3 - 5 знаков; их сходимость нарушается только при $\epsilon = (1 + 1,03)\epsilon_c$.

В общем случае при наличии как связанных, так и квазистационарных состояний требуется разработать достаточно универсальный метод суммирования, не предполагающий наличия априорной информации о пороговом значении ϵ . Для того, чтобы приблизить неоднозначную функцию единым аналитическим выражением, предложено использовать обобщения A_n , ранее известные как многозначные аппроксимации [4], или аппроксимации Паде - Эрмита. В отличие от A_n , удовлетворяющих линейным соотношениям, рассматриваются

модифицированные аппроксимации, которые являются решениями нелинейных уравнений с полиномиальными коэффициентами, определяемыми из разложения приближаемой функции в ряд Тейлора. Интересно, что подобные аппроксимации впервые рассматривались в XIX веке в работах Эрмита и Паде, но начали использоваться в приложениях только в последнем десятилетии.

Для примера построены квадратичные диагональные аппроксимации к энергии состояния $2p$ и представлены в таблице. Результаты с точностью 2 - 6 знаков согласуются с соответствующими результатами, полученными в [3] методом конформного отображения.

Рассмотрение выше аппроксимации в окрестности точки ветвления $\tilde{\epsilon}_c$ ведут себя как $u_0 + i u_1 (\epsilon - \tilde{\epsilon}_c)^{1/2}$. В то же время разложение точной функции относительно её точки ветвления ϵ_c не содержит постоянного члена и членов, содержащих $(\epsilon - \epsilon_c)^{-1/2}$ для $j = 1, 2, \dots, l$. Из-за этого точность приближения вблизи порога ионизации $\epsilon_c \approx \tilde{\epsilon}_c$ ухудшается.

В подразделе 3.2 строятся аппроксимации Паде - Эрмита, которые имеют при $\epsilon \rightarrow \tilde{\epsilon}_c$ разложение того же типа, что и точная функция - при $\epsilon \rightarrow \epsilon_c$. Показано, что построенные аппроксимации вблизи порога ионизации по точности превосходят аппроксимации с преобразованной переменной и квадратичные аппроксимации. Вычислено несколько первых коэффициентов разложения энергии при $\epsilon \rightarrow \epsilon_c$ по полужелым степеням $\epsilon - \epsilon_c$.

В связи с практическим использованием аппроксимаций Паде - Эрмита возникает задача их вычисления. Использование для этой цели общих методов решения системы линейных уравнений приводит, так же как и в классическом случае аппроксимаций Паде, к большому объёму проводимых операций ($\sim k^3$ при возрастании порядка аппроксимации). В приложении 2 предлагается алгоритм построения аппроксимаций Паде - Эрмита, обобщающий классический алгоритм Висковатова. При этом объём операций $\sim k^2$.

Четвёртый раздел посвящён полуклассической ТВ для двух систем, встречающихся в теории атома: частицы в сферически-симметричном потенциале (подраздел 4.1) и системы трёх взаимодействующих частиц (подраздел 4.2).

Известно, что анализ многих полевых и квантовомеханических теорий значительно упрощается, когда N , или число простран-

ственных измерений системы, берётся достаточно большим. Если задача в пределе $N \rightarrow \infty$ точно решается, то построение разложения по степеням $1/N$ представляет собой ещё один вариант ТВ и может дать хорошее приближение к исходной теории с конечным N . В квантовой механике этот тип разложения впервые рассматривался в 1974 году для N -мерного сферически-симметричного ангармонического осциллятора. Позднее разложения по $1/N$ строились для частицы в потенциале δ -кванты, гауссовском и других сферически-симметричных потенциалах, а также для гелиеподобных атомов, атома водорода во внешнем магнитном поле и атомов в лазерном поле.

Метод, как правило, состоит в приведении N -мерной задачи к задаче гармонического осциллятора, возмущённого потенциалом в виде ряда по степеням параметра порядка $N^{-1/2}$. Метод имеет много общего с ТВ Релея - Шредингера, так как он по существу сводится к ТВ для ангармонического осциллятора. Для метода разложения по $1/N$ не требуется, чтобы гамильтониан записывался как сумма двух слагаемых: одного, с которым уравнение точно решается, и другого, малого в некотором смысле (это его преимущество перед методом ТВ).

Для случая частицы в сферически-симметричном потенциале $V(r)$ в N -мерном пространстве уравнение Шредингера сводится к радиальному уравнению с эффективным потенциалом

$$V_{ef}(r) = \ell'(\ell'+1)/2r^2 + V(r),$$

где $\ell' = \ell + (N-3)/2$, ℓ - степень сферической гармоники. В качестве параметра разложения используется величина

$$\lambda = [\ell'(\ell'+1)/2]^{-1/2}.$$

В пределе бесконечно больших N $\lambda \sim 1/N \rightarrow 0$.

После масштабного преобразования $t = \lambda^2 r$ радиальное уравнение записывается в виде

$$\left(-\frac{\lambda^2}{2} \frac{d^2}{dt^2} + \tilde{V}_{ef}(t) - \tilde{E} \right) Q(t) = 0,$$

где $\tilde{E} = \lambda^2 E$ и $\tilde{V}_{ef}(t) = \lambda^2 V_{ef}(r)$ отличаются от истинных энергии и эффективного потенциала множителем. Полученное уравнение совпадает с одномерным уравнением Шредингера, в котором λ играет

роль постоянной Планка. Далее рассматривается поведение собственного числа \tilde{E} в зависимости от величины параметра λ при фиксированном потенциале \tilde{V}_{ef} .

При $\lambda \rightarrow 0$ \tilde{E} стремится к классическому значению, которое даётся минимумом потенциала \tilde{V}_{ef} , V_0 , а волновая функция сосредоточена вблизи точки минимума. В низшем порядке по λ энергия $E \approx \lambda^2 V_0$ 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.

В приближении гармонического осциллятора потенциал \tilde{V}_{ef} аппроксимируется параболой, энергия даётся формулой $E \approx \lambda^2 V_0 + \lambda^3 (p + 1/2)\omega$, где ω - частота осциллятора, p - осцилляторное квантовое число, совпадающее с числом узлов волновой функции.

Далее, считая отличие \tilde{V}_{ef} от потенциала гармонического осциллятора возмущением, строится ТВ для ангармонического осциллятора. Можно показать, что энергия \tilde{E} разлагается по степеням λ , а волновая функция $Q(t)$ - по степеням $\lambda^{1/2}$. Коэффициенты разложения энергии имеют вид многочленов от квантового числа p .

Особый интерес представляет разложение в асимптотический ряд критических параметров экранирования, так как ранее для них не было получено каких-либо систематических разложений. Критические параметры экранирования ϵ_c находятся из уравнения $E(\epsilon) = 0$. Разложение ϵ_c по степеням λ имеет вид $\sum_{k=2}^{\infty} \epsilon_c^{(k)} \lambda^k$. Первые 6 коэффициентов $\epsilon_c^{(k)}$ получены в аналитическом виде (как многочлены от p).

Для состояний с $p=0$ ($n=\ell'-1$) радиальные волновые функции наиболее сильно сосредоточены в окрестности минимума эффективного потенциала, так как они не имеют узлов. Для таких состояний квантовые поправки, $\epsilon_c^{(k)}$ ($k \geq 3$) принимают наименьшие по модулю значения. Сумма 5 членов разложения в этом случае приближает ϵ_c для всех $\ell' > 0$ с относительной ошибкой менее 0,03%.

При $p \geq 1$ частные суммы ряда осциллируют вокруг правильного значения и при $\ell' \leq p$ уже не дают удовлетворительного приближения к ϵ_c . Однако, как свидетельствуют расчёты, при $p > 0$ AP

улучшают сходимость приближений. Как показал расчёт, проведённый для всех $p \leq 4$, AP , построенные по 10 - 11 коэффициентам разложения, приближают ϵ_c при $\ell' = 1$, $\ell' = 2$ и $\ell' \geq 3$ с относительными ошибками $4 \cdot 10^{-3}$, $2 \cdot 10^{-4}$ и $3 \cdot 10^{-5}$ соответственно.

Уравнение Шредингера для трёх взаимодействующих частиц, движущихся в пространстве N измерений, после отделения угловых переменных может быть приведено к уравнению на собственные значения для волновой функции, зависящей только от трёх взаимных расстояний. Эффективный потенциал, входящий в уравнение, для S -состояний имеет вид

$$V_{eff}(r_{12}, r_{23}, r_{31}) = (N-3)^2 \frac{r_{12}^2/m_3 + r_{23}^2/m_1 + r_{31}^2/m_2}{32 S^2(r_{12}, r_{23}, r_{31})} + V(r_{12}, r_{23}, r_{31})$$

где m_1, m_2, m_3 - массы, r_{12}, r_{23}, r_{31} - расстояния между частицами, V - потенциал взаимодействия, $S(r_{12}, r_{23}, r_{31})$ - площадь треугольника со сторонами длиной r_{12}, r_{23}, r_{31} . Первое слагаемое в выражении для V_{eff} играет роль центробежного потенциала и аналогично функции $\ell(\ell+1)/2r^2$ для частицы в сферически-симметричном поле.

Построение полуклассического разложения для уравнения с потенциалом $V_{eff}(r_{12}, r_{23}, r_{31})$ полностью аналогично построению соответствующего разложения для одномерного радиального уравнения Шредингера. Низший член разложения энергии дается минимумом потенциала V_{eff} . Следующие члены отвечают квантовым поправкам. В частном случае кулоновского взаимодействия разложение энергии по степеням $1/N$ имеет вид $E = \sum_{k=2}^{\infty} E_k N^{-k}$.

В работе [5] были найдены первые три члена разложения для гелиеподобных ионов, но их не достаточно для удовлетворительного приближения энергии. В настоящей работе разработан метод вычисления высоких порядков ТВ, удобный для реализации на ЭВМ. Рассмотрены результаты суммирования разложений по $1/N$ на примере гелиеподобных ионов и ряда экзотических атомов. AP , построенные с использованием 10 коэффициентов $1/N$ -разложения, приближают энергию гелиеподобных ионов для всех $Z = 2, 3, 4, 5, 6$ с точностью не хуже, чем $5 \cdot 10^{-3}$ и $2 \cdot 10^{-5}$ для состояний $(1s)^2 \ ^1S$ и $(2p)^2 \ ^1P$ ($N=3$) соответственно. Для мезоатома $\mu\mu\mu$ последние

из построенных A_1 даёт энергию основного состояния с точностью до трёх знаков.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные результаты, полученные в работе, следующие:

1. Разработан эффективный метод вычисления высоких порядков ТВ для широкого класса экранированных кулоновских потенциалов, основанный на переходе к задаче ТВ для фоковского оператора с чисто дискретным спектром. Метод одинаково удобен как для основного, так и для любого возбуждённого состояния.

2. Метод ТВ обобщён на случай уравнения Дирака с потенциалом $U_{\text{Кавы}}$.

3. Предпринят сравнительный анализ различных методов обобщённого суммирования расходящихся рядов: методов Хаттона, Чезаро и Эйлера, преобразования Шанкса и аппроксимаций Паде. Показано, что наиболее эффективным методом для случая энергии связанных состояний является метод A_1 .

4. С помощью метода суммирования Паде получены с высокой точностью уровни энергии связанных состояний и силы осцилляторов для переходов между дискретными уровнями.

5. Для вычисления энергии как связанных, так и квазистационарных состояний разработаны достаточно универсальные методы суммирования, не предполагающие знания величины критического параметра экранирования.

6. При рассмотрении неунитарных представлений группы $O(2, 1)$ получены точные соотношения, которые можно использовать как для проверки правильности формул для коэффициентов разложений, так и для вычисления коэффициентов ТВ путём экстраполяции по квантовым числам n, l .

7. Полуклассическая ТВ развита для случаев экранированного кулоновского потенциала и задачи трёх тел. Получены асимптотические разложения по степеням $1/N$ для энергии частицы в потенциале Дебая - Хюккеля и критических параметров экранирования, а также для энергии системы трёх частиц с кулоновским взаимодействием.

8. Показано, что суммирование полуклассического разложения

позволяет вычислить критические параметры экранирования и энергии гелиеподобных ионов с высокой точностью, которая приближается к точности непосредственного численного или вариационного расчётов.

4. СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ

1. Сергеев А.В., Шерстюк А.И. Использование аппроксимант Паде при расчёте состояний электрона в экранированном потенциале атома. - Тезисы всесоюзной конференции по теории атомов и атомных спектров, Тбилиси - 1981, с. 87.
2. Сергеев А.В., Шерстюк А.И. Высшие порядки и структура рядов теории возмущений для экранированного кулоновского потенциала. - ИЖТФ, 1982, т. 82, № 4, с. 1070 - 1078.
3. Сергеев А.В. Квазиклассическая теория возмущений для спектроскопических характеристик водородоподобных атомов в плазме. - Тезисы докладов XIX Всесоюзного съезда по спектроскопии. Часть I. Атомная спектроскопия, Томск - 1983, с. 33 - 35.
4. Сергеев А.В., Шерстюк А.И. Суммирование рядов теории возмущений для уравнения Дирака с экранированным кулоновским потенциалом. - Тезисы всесоюзной конференции по теории атомов и атомных спектров. Минск - 1983, с. 65.
5. Сергеев А.В. Теория возмущений по $1/N$ для лёгких атомов. - Тезисы всесоюзной конференции по теории атомов и атомных спектров. Минск - 1983, с. 66.
6. Сергеев А.В. Вычисление сил осцилляторов и критических параметров экранирования в дебаевском потенциале на основе теории возмущений. В сб.: "Методы атомных расчётов". М.: Б.и., 1983, с. 149 - 164.
7. Сергеев А.В., Шерстюк А.И. Использование неунитарных представлений группы $O(2, 1)$ для расчёта связанных состояний в модифицированном кулоновском потенциале. - В сб.: "Процессы во внутренних атомных оболочках". М.: Б.и., 1984, с. 270 - 292.
8. Сергеев А.В., Шерстюк А.И. Высшие порядки теории возмущений для связанных состояний уравнения Дирака с потенциалом типа Дкавы. - Ядерная физ., 1984, т. 39, № 5, с. 1158 - 1164.
9. Сергеев А.В. Теория возмущений для квазистационарных состо-

ный экранированного атома. - Тезисы всесоюзной конференции по теории атомов и атомных спектров. Ужгород - 1985, с. 12.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Simon B. Large orders and summability of eigenvalue perturbation theory: a mathematical overview. - *International journal of quantum chemistry*, 1982, v. 21, N1, p. 3-25.
2. Шерстюк А.И., Школьник А.М. Аналитический расчёт связанных состояний частицы в экранированном кулоновском потенциале. - *Изв. АН СССР, сер. физ.*, 1977, т. 41, № 12, с. 2648 - 2654.
3. Попов В.С., Вайнберг В.М. Суммирование рядов теории возмущений для потенциала Юкавы. *ДАН СССР*, 1983, т. 272, № 2, с. 335 - 340.
4. Short L. The evaluation of Feynman integrals in the physical region using multi-valued approximants. - *J. Phys. B*, 1979, v. 5, N2, p. 167-198.
5. Meadison L. D., Papantolao N. Pseudo-spin structure and large N expansion for a class of generalized helium hamiltonians. - *Ann. Phys.*, 1981, v. 131, N1, p. 1-35.

Сер-