

АСИМПТОТИЧЕСКИЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ ДЛЯ АТОМОВ И ИОНОВ

В. Д. Мур^а, В. С. Попов^б, Б. М. Карнаков^{а*}^а Московский инженерно-физический институт (Технический университет)
115409, Москва, Россия^б Институт теоретической и экспериментальной физики
117218, Москва, Россия

Поступила в редакцию 14 июля 1998 г.

В приближении эффективного радиуса получены удобные аналитические формулы для асимптотического коэффициента радиальной волновой функции на бесконечности, C_κ , а также для среднего радиуса системы. Сравнение с численными расчетами (по методу Хартри—Фока) для многоэлектронных атомов и ионов показывает, что данное приближение имеет хорошую точность для валентных s -электронов во всех атомах от водорода до урана. Вычислены значения длин рассеяния и эффективных радиусов для рассеяния электронов на атомах и ионах. Рассмотрено также квазиклассическое приближение для коэффициента C_κ . Обсуждается логарифмический рост эффективных радиусов ns -состояний при $n \rightarrow \infty$.

1. Волновая функция s -уровня имеет асимптотику

$$\psi_\kappa(r) = C_\kappa \sqrt{\frac{\kappa^3}{\pi}} e^{-\kappa r} (\kappa r)^{\nu-1} \left[1 - \frac{\nu^2 - \nu}{2\kappa r} + \dots \right], \quad r \gg r_0, \quad \frac{|\nu - 1|}{\kappa^2 a_B}, \quad (1)$$

где $\int \psi_\kappa^2 d^3r = 1$, $\kappa = \sqrt{-2E}$, E — энергия уровня, $\nu = Z/\kappa$, Z — заряд атомного остова, r_0 — его радиус, $a_B = 1/Z$ — радиус Бора и используются атомные единицы $\hbar = m = e = 1$.

Асимптотические коэффициенты C_κ являются важными физическими параметрами связанных состояний и постоянно встречаются в квантовой механике [1], атомной и ядерной физике [2–8], в обратной задаче квантовой теории рассеяния [9, 10], и т. д.¹⁾ Их точное вычисление достаточно сложно и, например, в случае тяжелых атомов требует численного решения уравнений Хартри—Фока для многоэлектронных систем, причем погрешность вычисления в ряде случаев достигает 10–30% и более [11]. Мы укажем простые аналитические приближения для коэффициентов C_κ , которые хорошо описывают результаты численных расчетов. Эти формулы можно использовать и для других кулоновских систем с короткодействием (например, в теории адронных атомов [12]).

Кратко опишем содержание работы. В п. 2 дано «разложение эффективного радиуса» для коэффициентов C_κ , проведено сравнение его с результатами численных расчетов и приведены результаты вычисления длин рассеяния и эффективных радиусов для некоторых атомов и ионов. В следующем п. 3 разложение (3) проиллюстрировано на ряде

* E-mail: karnak@theor.mephi.msk.su

¹⁾ Например, вероятность ионизации атома или иона в электрическом и магнитном полях пропорциональна C_κ^2 [2–8]. Коэффициенты C_κ фигурируют также при расчете взаимодействия атомных частиц на далеких расстояниях и в теории других периферических процессов [8].

модельных потенциалов, допускающих точное решение (в частности, приведены явные выражения для длины a_s s -рассеяния и эффективного радиуса r_s в случае потенциала Хюльтена). В п. 4 рассмотрено квазиклассическое приближение для коэффициентов C_κ . В п. 5 обсуждается случай $l \neq 0$, в п. 6 — логарифмический рост эффективных радиусов n -состояний при $n \rightarrow \infty$. В Приложения вынесены вывод разложения (3), детали вычислений и некоторые громоздкие формулы.

2. Разложение эффективного радиуса. Пусть потенциал

$$V(r) = -Zr^{-1} + U(r),$$

где $U(r)$ — его короткодействующая часть с характерным радиусом действия сил r_0 . Нормированная волновая функция мелкого s -уровня имеет вид

$$\chi_\kappa(r) = \sqrt{4\pi r} \psi_\kappa(r) = 2^{1-\nu} \kappa^{1/2} C_\kappa \begin{cases} \varphi(r)/\Gamma(1-\nu), & r \lesssim r_0, \\ W_{\nu, 1/2}(2\kappa r), & r \gg r_0, \end{cases} \quad (2)$$

где $l = 0$, $\kappa r_0 \ll 1$, $\varphi(r)$ — волновая функция, отвечающая нулевой энергии, $W_{\nu, 1/2}$ — функция Уиттекера, ν — параметр Зоммерфельда (для дискретного спектра). Областью сшивания выражений (2) является $r_0 \ll r \ll \min(\kappa^{-1}, a_B)$, а нормировочный интеграл набирается в основном на расстояниях $r > r_0$ и может быть вычислен аналитически. Поправка за счет малых ($r \lesssim r_0$) расстояний зависит от вида потенциала $U(r)$ и выражается через ядерно-кулоновский [13–15] эффективный радиус r_{cs} . В итоге приходим к следующему разложению (см. Приложение А):

$$C_\kappa = C_\kappa^{(0)} \{1 - c_1 \kappa r_{cs} + O((\kappa r_0)^3)\}^{-1/2}, \quad (3)$$

где $C_\kappa^{(0)}$ и c_1 — универсальные функции параметра ν (см. рис. 1 и 2):

$$C_\kappa^{(0)} = \frac{2^{\nu-1}}{\Gamma(1+\nu)} F(\nu), \quad c_1 = \frac{1}{2} \left[\frac{\sin \pi \nu}{\pi \nu} F(\nu) \right]^2, \quad (4)$$

$$F(\nu) = \left\{ 1 - \left(\frac{\sin \pi \nu}{\pi \nu} \right)^2 \left[\nu^2 \psi'(\nu) - \nu - \frac{1}{2} \right] \right\}^{-1/2}, \quad (4a)$$

а $\psi'(\nu)$ — тригамма-функция [16]. При «выключении» ($\nu \rightarrow 0$) кулоновского взаимодействия радиус $r_{cs} \rightarrow r_s$,

$$C_\kappa^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 + a_1 \nu + \dots), \quad c_1 = 1 - 2\nu + \dots$$

($a_1 = \ln 2 - 1 + C = 0.2704$, $C = 0.5772\dots$) и разложение (3) принимает вид, соответствующий короткодействующему потенциалу:

$$1/2 C_\kappa^2 = 1 - \kappa r_s + c_3 (\kappa r_s)^3 + \dots \quad (5)$$

При $\nu \rightarrow n = 1, 2, 3, \dots$ из (4) получаем

$$C_\kappa^{(0)} = \frac{2^{n-1}}{n!} [1 + b_1 \delta + O(\delta^2)], \quad c_1 = \frac{1}{2} \delta^2 - \delta^3 + \dots, \quad (6)$$

где $\delta = (\nu - n)/n$ и $b_1 = a_1 \approx 0.270$ при $n = 1$, $b_1 \approx -0.459$ при $n = 2$ и т.д. Значения $C_\kappa^{(0)} = 2^{n-1}/n!$ и $c_1 = 0$ отвечают чисто кулоновскому ($\nu = n$) спектру²⁾. Наконец, для высоковозбужденных (ридберговских) состояний

$$C_\kappa^{(0)} = \frac{2^{\nu-1}}{\Gamma(\nu+1)} \left[1 + \frac{\sin^2 \pi \nu}{12\pi^2 \nu^3} + \dots \right], \quad c_1 = \frac{\sin^2 \pi \nu}{2\pi^2 \nu^2} [1 + O(\nu^{-3})]. \quad (6a)$$

При $\nu \gg 1$ коэффициент c_1 численно мал и зависимость C_κ от эффективного радиуса r_{cs} становится несущественной (то же справедливо для значений параметра ν , близких к целым $n = 1, 2, \dots$).

Замечательной особенностью разложений (3), (5) является отсутствие в них членов, квадратичных по эффективному радиусу³⁾. Кроме того, коэффициенты c_3 , вычисленные нами для ряда модельных потенциалов $U(r)$, численно малы, см. ниже (19). Это расширяет область применимости указанных выше разложений.

Сравним результаты хартри-фоковских вычислений [11] с нулевым приближением $C_\kappa \approx C_\kappa^{(0)}$, т.е. $r_{cs} = 0$ в (3). Приведенные в справочнике [11] коэффициенты A отличаются от C_κ нормировкой: $A = 2\kappa^{\nu+1/2} C_\kappa$. Светлые точки на рис. 1 относятся (в порядке возрастания ν) к основным состояниям нейтральных атомов⁴⁾:

He ($\nu = 0.744$), Zn(1.203), Au(1.215), Cu(1.326), Ag(1.340), Ru(1.359), Cr(1.418), Y(1.460), Yb(1.475), U(1.484), Ca(1.493), Pa(1.515), Sr(1.546), La(1.563), Li(1.587), Ba(1.616), Na(1.626), K(1.770), Rb(1.805) и Cs(1.869).

На рис. 1 также отмечены (\blacktriangle) значения C_κ для некоторых положительных ионов: Li^+ ($\nu = 0.848$), He^+ (1.000), Al^+ (1.701), Be^+ (1.729), Zn^+ (1.741), Cd^+ (1.794), Fe^+ (1.833), Mg^+ (1.903), Ti^+ (2.002), Ca^+ (2.141)

(рассматривались только те случаи, когда валентный электрон находится в s -состоянии). Видно, что уже нулевое приближение неплохо описывает результаты хартри-фоковских расчетов и имеет точность $\sim 10\%$ (несмотря на то что параметр разложения $\kappa r_{cs} \sim 1$). Это объясняется численной малостью коэффициентов c_1 и c_3 в (3) и (5). Так, $c_1 = 0.0458$ при $\nu = 0.75$, а его максимальное значение в области $1 < \nu < \infty$ равно $c_m = 0.0236$ ($\nu_m \approx 1.45$). Коэффициенты c_3 при кубическом члене зависят от формы потенциала $U(r)$, причём для всех рассмотренных нами моделей $|c_3| \lesssim 0.15$.

Следует отметить, что коэффициенты A имеют значительно больший разброс, чем C_κ . Так, $A^2 = 0.18, 4.00, 8.24$ и 42 соответственно для атомов Cs, H, He и иона Li^+ , в то время как $C_\kappa^2 = 0.854, 1.000, 0.986$ и 1.04 . Коэффициенты C_κ , в отличие от A , масштабно-инвариантны (т.е. не меняются при преобразовании скейлинга $r \rightarrow \alpha r$ в уравнении Шредингера), поэтому они зависят от формы потенциала $V(r)$, но не от его глубины и радиуса по отдельности. В частности, в кулоновской задаче с $V(r) = -Z/r$ эти коэффициенты не зависят от Z .

В большинстве случаев $C_\kappa > C_\kappa^{(0)}$, что отвечает значениям $r_{cs} > 0$ (см. табл. 1), но иногда $C_\kappa < C_\kappa^{(0)}$ (точки на рис. 1, лежащие ниже сплошной кривой). В случае иона Be^+ и атома Cs это не может быть объяснено неточностью хартри-фоковских расчетов, в то время как для остальных атомов $C_\kappa \approx C_\kappa^{(0)}$ в пределах двух стандартных ошибок.

²⁾ Мы отвлекаемся от знака коэффициента C_κ , который в случае кулоновского поля при стандартном определении [1] равен $(-1)^{n-1}$.

³⁾ Что касается следующих членов разложения, то они, вообще говоря, все отличны от нуля —

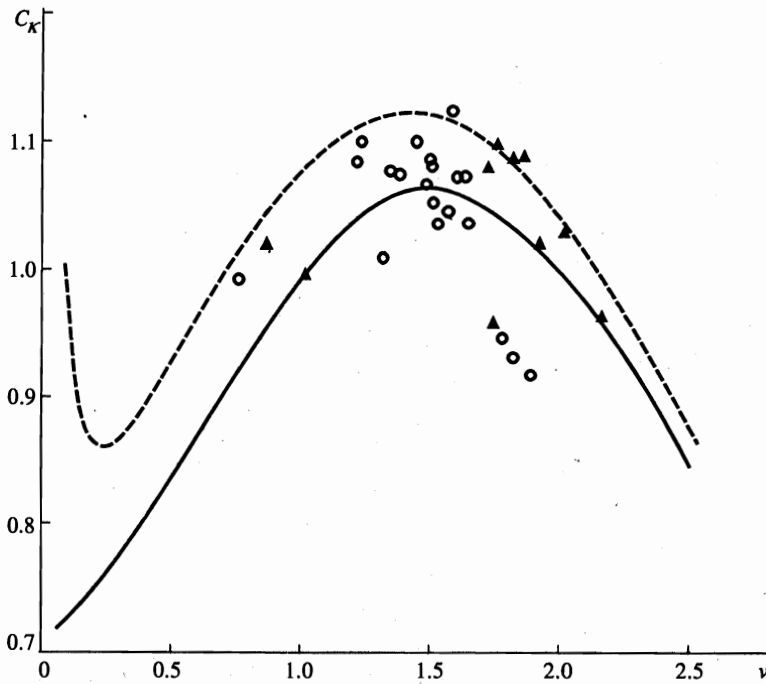


Рис. 1. Асимптотический коэффициент на бесконечности для нейтральных атомов (o) и для однозарядных положительных ионов \blacktriangle : сплошная кривая соответствует $C_{\kappa}^{(0)}$, штриховая кривая — квазиклассическое приближение (30), точки — результаты хартри-фоковских расчетов [11]

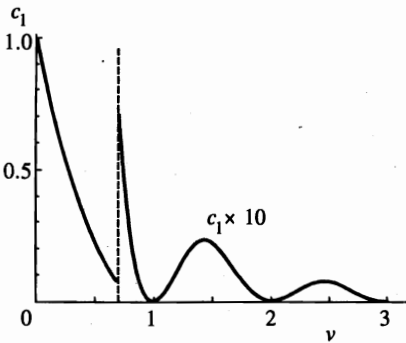


Рис. 2. Коэффициент $c_1(\nu)$ в разложении (3). При $\nu > 0.7$ масштаб по оси ординат увеличен в 10 раз

Используя (3) или (5) и разложение эффективного радиуса [13, 14], нетрудно по известным значениям κ и C_{κ} вычислить низкоэнергетические параметры — длину рассеяния и эффективный радиус. Так, в случае $Z = 0$ (отрицательные ионы)

$$\kappa r_s = 1 - \frac{1}{2C_{\kappa}^2}, \quad a_s^{-1} = \kappa - \frac{1}{2}\kappa^2 r_s, \quad (7)$$

см. пример (18).

⁴⁾ В скобках указаны значения параметра ν .

Таблица 1

Низкоэнергетические параметры отрицательных ионов

Ион	κ	a_s	r_s	C_κ
H ⁻	0.235	6.17	2.65	1.15
Li ⁻	0.212	6.6	2.7	1.09
Na ⁻	0.201	7.1	3.0	1.12
K ⁻	0.192	7.1	2.7	1.03
Rb ⁻	0.189	6.7	2.2	0.92
Fe ⁻	0.171	8.4	3.5	1.12
Cu ⁻	0.301	4.7	1.9	1.09
Ag ⁻	0.309	4.7	2.1	1.17

Примечание. Величины, относящиеся к отрицательному иону водорода, взяты из [10].

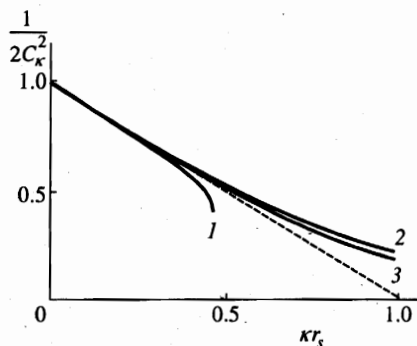


Рис. 3. Зависимость $1/2C_\kappa^2$ от κr_s (для основного состояния). Кривые 1 и 2 соответствуют потенциалам Хюльтена и Брейта, кривая 3 — прямоугольной яме

что дает значения a_s и r_s , приведенные в табл. 1. Из нее видно, что $a_s \gg r_0$, как это и должно быть для слабосвязанных ($\kappa r_s \ll 1$) систем. При этом эффективные радиусы r_s изменяются в пределах $(2-3)a_B$, а значения κr_s — от 0.41 для Rb⁻ до 0.65 для Ag⁻, что находится в пределах применимости разложения (5), см. ниже (19) и рис. 3. Приведенные в табл. 1 асимптотические коэффициенты C_κ пересчитаны из данных работы [11] указанным выше способом.

При наличии кулоновского взаимодействия формулы несколько усложняются:

$$\kappa r_{cs} = \frac{1}{c_1} \left[1 - \left(\frac{C_\kappa^{(0)}}{C_\kappa} \right)^2 \right], \quad a_{cs}^{-1} = \kappa \nu f(\nu) - \frac{1}{2} \kappa^2 r_{cs}, \quad (8)$$

где $f(\nu)$ — функция, определенная в (A.4). При этом, однако, из-за малости коэффициента c_1 (см. рис. 2) вычисление эффективного радиуса r_{cs} по этой формуле не очень надежно, и мы использовали несколько иную схему расчета. По экспериментально известным значениям квантового дефекта⁹⁾ для s -состояний [11] рассчитывалось значение

⁹⁾ Энергии высоковозбужденных (ридберговских) состояний $E_{nl} = -Z^2/2(n - \delta_l)^2$, причем квантовый дефект δ_l зависит от орбитального момента l , но практически не зависит от n .

a_{cs} по формуле Ситона [17, 18]:

$$a_{cs} = -(2\pi Z)^{-1} \operatorname{tg} \pi \delta_0,$$

после чего радиус r_{cs} вычислялся с помощью второго из уравнений (8).

Отметим, что для атомов щелочных и щелочноземельных элементов значения a_{cs} отрицательны и малы по сравнению с боровским радиусом a_B , что соответствует слабому притяжению высоковозбужденных s -электронов к атомному остатку. При этом, ввиду малости длины рассеяния, эффективные радиусы r_{cs} могут достигать довольно больших значений (см. в этой связи формулу (В.7) и следующие за ней в Приложении В). С другой стороны, для положительных ионов (кроме Mg^+) $a_{cs} > 0$, что можно интерпретировать как эффективное отталкивание внешнего электрона от остова. В этих случаях дробная часть квантового дефекта $\{\delta_0\} > 0.5$ (отметим, что $\{\delta_0\} \approx 0.5$ соответствует области перестройки атомного спектра [12]). Результаты расчета приведены в табл. 2.

Таблица 2

Параметры для нейтральных атомов и положительных ионов

АТОМ или ИОН	ν	a_{cs}	r_{cs}	$C_{\kappa}^{(0)}$	C_{κ}	$c_1 \cdot 100$
Li	1.589	0.490	0.59	1.063	1.076 ± 0.03	1.87
Na	1.627	-0.308	2.71	1.060	1.040 ± 0.03	1.64
K	1.770	-0.101	18.4	1.044	0.95 ± 0.1	0.71
Rb	1.805	-0.070	40.5	1.038	0.94 ± 0.09	0.52
Sr	1.546	-0.179	24.5	1.065	1.05 ± 0.1	2.08
Ca	1.492	-0.290	13.0	1.066	1.06 ± 0.1	2.29
Mg^+	1.903	-0.018	25.9	1.021	1.025 ± 0.01	0.13
Ca^+	2.141	0.056	14.2	0.965	0.970 ± 0.03	0.20
Sr^+	2.221	0.103	9.60	0.942	0.924 ± 0.03	0.14
Ba^+	2.332	0.298	8.09	0.907	1.19 ± 0.36	0.70

Примечание. Как в предыдущей таблице, значения длин рассеяния и эффективных радиусов даны в атомных единицах; C_{κ} и c_1 — безразмерные коэффициенты.

Разложения, аналогичные (3) и (5), можно получить для моментов распределения электронной плотности

$$\langle r^{\alpha} \rangle = \int_0^{\infty} \chi_{\kappa}^2(r) r^{\alpha} dr.$$

В частности,

$$\langle r \rangle = \frac{1}{2\kappa} \{ (3\nu + c_1)(1 + c_1 \kappa r_{cs}) + O((\kappa r_0)^2) \}. \quad (9)$$

Для атомов щелочных элементов даже приближение нулевого радиуса $\langle r \rangle_0$, т. е. $r_{cs} = 0$ в (9), имеет точность порядка $10 \div 20\%$. Так, отношение $\langle r \rangle / \langle r \rangle_0 = 1.021, 1.058, 1.11, 1.15$

и 1.20 соответственно для Li, Na, K, Rb и Cs. Таким образом, полученные выше разложения позволяют легко оценивать значения C_κ и $\langle r^\alpha \rangle$ для многоэлектронных атомов и ионов.

Простые аналитические формулы, аналогичные (9), получены для среднеквадратичного радиуса $\langle r^2 \rangle^{1/2}$ и для высших моментов распределения плотности s -электронов. Учет поправки порядка κr_{cs} с определенными выше (табл. 2) значениями эффективного радиуса является существенным и, как правило, приводит к хорошему согласию с результатами численных расчетов. Ограничимся двумя примерами: для основного состояния атома Li $\langle r \rangle = 3.82$ (3.87), $\langle r^2 \rangle^{1/2} = 4.16$ (4.21), а для Na имеем $\langle r \rangle = 4.09$ (4.21) и $\langle r^2 \rangle^{1/2} = 4.40$ (4.55); радиусы $\langle r \rangle$ и $\langle r^2 \rangle^{1/2}$ даны здесь в атомных единицах, причем в скобках указаны значения, рассчитанные по методу Хартри-Фока [11].

3. Сравнение с точными решениями. Рассмотрим потенциалы, для которых уравнение Шредингера с $l = 0$ решается аналитически. Это позволит установить область применимости разложений (3) и (5).

а) Для прямоугольной ямы (радиус $R \equiv r_0$, глубина U_0 , $g = 2U_0 R^2$ — безразмерная константа связи) имеем [3, 10]

$$C_\kappa = \left[\frac{1 - (\kappa R)^2/g}{2(1 + \kappa R)} \right]^{1/2} e^{\kappa R}, \quad (10)$$

$$a_s = R\xi, \quad r_s = \left(1 - \frac{1}{g\xi} - \frac{1}{3\xi^2} \right) R, \quad \xi = 1 - \frac{\text{tg}\sqrt{g}}{\sqrt{g}}.$$

Разлагая эти выражения при $\kappa \rightarrow 0$, $g \rightarrow \tilde{g}_n = (n - 1/2)^2 \pi^2$, получаем

$$\begin{aligned} \frac{1}{2C_\kappa^2} &= 1 - \kappa R + \frac{(\kappa R)^2}{\tilde{g}_n} + \left(\frac{2}{3} - \frac{\tilde{g}_n + 2}{\tilde{g}_n^2} \right) (\kappa R)^3 + \dots = \\ &= 1 - \kappa r_s + \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\tilde{g}_n} \right) (\kappa r_s)^3 + \dots \end{aligned} \quad (11)$$

В соответствии с (5) разложение по степеням κr_s не содержит члена $\propto r_s^2$ (в отличие от разложения по степеням κR). Для основного уровня $\tilde{g}_1 = \pi^2/4$ и $c_3 = 1/3 - 2\pi^{-2} = 0.1307$.

б) Потенциал Хюльгена

$$U(r) = -\frac{g}{2R^2[\exp(r/R) - 1]} \quad (12)$$

по форме близок к потенциалу Юкавы и часто используется в атомной и ядерной физике. Связанное состояние ns появляется при $g = \tilde{g}_n = n^2$ [9]:

$$\kappa R = \frac{g - \tilde{g}_n}{2n}, \quad C_\kappa = \sqrt{\frac{n + \kappa R}{2(n + 2\kappa R)}} \frac{\Gamma(n + 1 + 2\kappa R)}{\Gamma(n + 1)\Gamma(1 + 2\kappa R)}. \quad (13)$$

Длина s -рассеяния и эффективный радиус равны⁶⁾

⁶⁾ Явные выражения для C_κ , a_s и r_s в известной нам литературе отсутствуют (их вывод изложен в Приложении В.) Здесь и далее мы обозначаем тильдой величины, относящиеся к моменту возникновения уровня.

$$a_s = R \cdot a(g) = 2R \sum_{n=1}^{\infty} n \left(\frac{1}{g - g_n} + \frac{1}{g_n} \right),$$

$$r_s = \frac{2}{3} R \left\{ a - 2a^{-2} \left[\frac{d^2(ag)}{dg^2} + 4\zeta(3) \right] \right\},$$
(14)

где $a(g) = \psi(1 + \sqrt{g}) + \psi(1 - \sqrt{g}) + 2C$, $\psi(z) = \Gamma'(z)/\Gamma(z)$ и $\zeta(3) = 1.202$ [16]. Остается разложить эти выражения при $\kappa \rightarrow 0$, однако в случае произвольного n выкладки значительно усложняются. Мы ограничимся основным состоянием, когда

$$g = 1 + 2\kappa R, \quad \bar{g}_1 = 1, \quad C_\kappa = \sqrt{\frac{1}{2}(1 + \kappa R)(1 + 2\kappa R)}$$

и (см. Приложение В)

$$c_3 = [11 - 16\zeta(3)]/54 = -0.1525.$$
(15)

в) Простейшей моделью $U(r)$ является потенциал Брейта, который использовался для описания NN -взаимодействия при низких энергиях и в теории резонансных ядерных реакций [19, 20]. Он задается граничными условиями

$$\chi(r) \equiv 0, \quad 0 < r < R; \quad \left. \frac{r\chi'(r)}{\chi(r)} \right|_{r=R} = -g.$$
(16)

В этом случае имеется единственный s -уровень, для которого $\kappa R = g > 0$,

$$C_\kappa = \frac{1}{\sqrt{2}} e^g, \quad a_s = (1 + g^{-1})R, \quad \kappa r_s = \frac{2g(1 + g + g^2/3)}{(1 + g)^2}.$$
(17)

Отсюда находим

$$g = \sum_{k=1}^{\infty} d_k (\kappa r_s)^k, \quad d_k = 3^{k-1} \Gamma\left(\frac{2k+1}{3}\right) / 2^k k! \Gamma\left(\frac{4-k}{3}\right)$$
(17a)

и окончательно

$$\frac{1}{2C_\kappa^2} = e^{-2g} = 1 - \kappa r_s + \sum_{k=3}^{\infty} c_k (\kappa r_s)^k,$$
(18)

где $c_3 = 1/6$, $c_4 = 1/12$, $c_5 = -1/120$, $c_6 = -83/1440$, ... Быстрое убывание этих коэффициентов объясняет, почему приближение $C_\kappa \approx [2(1 - \kappa r_s)]^{-1/2}$ сохраняет хорошую точность вплоть до значений $\kappa r_s \sim 0.5$ (рис. 3).

г) Были рассмотрены также дельта-функциональное взаимодействие

$$U(r) = -\frac{g}{2R} \delta(r - R)$$

и сепарабельный потенциал Ямагучи [21]. Суммируем результаты расчета:

$$c_3 = -0.152, \quad 2/27, \quad 0.131, \quad 3/20 \quad \text{и} \quad 1/16$$
(19)

соответственно для потенциалов Хюльтена, Ямагучи, прямоугольной ямы, δ -потенциала и потенциала Брейта (значения c_3 для потенциала Хюльтена и прямоугольной ямы относятся к основному состоянию). Хотя коэффициент c_3 зависит от модели, можно думать, что его численная малость сохранится и для реалистических потенциалов $U(r)$.

На рис. 3 показана зависимость C_κ^{-2} от κr_s . Прямая штриховая линия отвечает пренебрежению в (5) всеми членами разложения, начиная с $(\kappa r_s)^3$. Это простое приближение оказывается удивительно точным и вне области $\kappa r_s \ll 1$, благодаря чему во многих случаях можно ограничиться поправкой первого порядка по κr_0 .

д) При наличии кулоновского взаимодействия формулы чрезвычайно усложняются, поэтому мы ограничимся моделью Брейта (16), для которой

$$\chi_\kappa(r) = 2^{1-\nu} \kappa^{1/2} C_\kappa W_{\nu,1/2}(2\kappa r) \theta(r-R), \quad (20)$$

$$\frac{1}{2C_\kappa^2} = 2^{-\nu} \int_{2\kappa R}^{\infty} W_{\nu,1/2}^2(x) dx = \frac{1}{2} [C_\kappa^{(0)}]^2 \left\{ 1 - c_1 \int_0^{2\kappa R} w^2(x) dx \right\}, \quad (20')$$

где $w = \Gamma(1-\nu) W_{\nu,1/2}(x)$.

На модели Брейта удобно рассмотреть особый случай $\nu = n$, когда энергия n_s -уровня в точности та же, что и в чисто кулоновском поле. Для $n = 1$ имеем

$$C_1 = [e^{-2\rho}(1 + 2\rho + 2\rho^2)]^{-1/2} = 1 - \frac{2}{3}\rho^3 - \rho^4 + \dots, \quad g_1 = -1 + \rho, \quad (21)$$

где $\rho = R/a_B$, $a_B = 1/Z$ — радиус Бора. В общем случае $\nu = n$ получаем при $\rho \ll 1$

$$C_n = C_\kappa^{(0)} \left(1 + \frac{2}{3n^3} \rho^3 - \frac{\rho^4}{n^3} + \dots \right), \quad C_\kappa^{(0)} = \frac{2^{n-1}}{n!}, \quad (21')$$

причем константа связи в (16), отвечающая $\nu = n$, равна

$$g_n = -1 + \rho + \frac{n^2 - 1}{3n^2} \rho^2 + \dots \quad (21'')$$

Таким образом, поправки к значению $C_\kappa^{(0)}$, происходящие от искажения кулоновского потенциала в области $r < R$, начинаются с членов $\propto (\kappa R)^3$. Если же потенциал $V(r)$ ограничен при $0 < r < R$, то поправка еще меньше и имеет порядок $(\kappa R)^4$.

4. Рассмотрим теперь приближение ВКБ для асимптотических коэффициентов на бесконечности:

$$C_\kappa^{WKB} = \xi \left(\frac{2\kappa}{\mu} \right) \frac{1}{2\kappa \sqrt{T_r}} (\kappa r_t)^{-\nu} \exp \left\{ \kappa r_0 - \int_{r_t}^{\infty} \left(|p(r)| - \kappa + \frac{\nu}{r} \right) dr \right\}, \quad (22)$$

$$T_r = 2 \int_0^{r_t} \frac{dr}{p(r)}$$

($l = 0$). При этом энергия n_s -уровня определяется из (модифицированного) правила квантования Бора—Зоммерфельда:

$$\int_0^{r_t} p(r)dr = (n - \gamma)\pi, \quad p^2 = -\kappa^2 - 2V(r), \quad n = n_r + 1 = 1, 2, 3, \dots, \quad (23)$$

в котором фаза $\gamma\pi$ зависит от поведения потенциала на малых расстояниях. Если $V(r) \propto r^\alpha$ при $r \rightarrow 0$, то для потенциалов притяжения [22]

$$\gamma = \begin{cases} 1/4, & \alpha \geq 0, \\ (\alpha + 1)/2(\alpha + 2), & -2 < \alpha \leq 0. \end{cases} \quad (24)$$

В частности, $\gamma = 0$ для потенциалов с кулоновской особенностью в нуле (потенциалы Юкавы, Хюльтена и др.), $\gamma = 1/4$ для потенциалов, конечных в нуле.

В формулах (22), (23) $p(r)$ — квазиклассический импульс, r_t — точка поворота, T_r — период радиальных колебаний классической частицы и $\xi(x) \equiv \xi(x, 0)$, где

$$\xi(x, a) = \sqrt{2\pi} \frac{x^{x+a-1/2} e^{-x}}{\Gamma(x+a)} = 1 - \frac{a_1}{2x} + \frac{a_2}{24x^2} + \dots, \quad x \rightarrow \infty, \quad (25)$$

причем $a_1 = b^2 - 1/12$, $a_2 = 3a_1^2 + 4b^3 - b$ и $b = a - 1/2$.

Появление в (22) множителя ξ связано с необходимостью модификации условия сшивания Крамерса в окрестности точки поворота в случае мелких уровней. Это объясняется [23, 24] тем, что область квазиклассичности в этом случае не перекрывается с той областью вблизи точки r_t , в которой справедливо линейное разложение потенциала (что используется при выводе обычных условий сшивания [1]). В итоге квазиклассическую волновую функцию в подбарьерной области $r > r_t$ следует умножить на $\xi(2\kappa/\mu)$, если потенциал $V(r)$ убывает как $\exp(-\mu r)$ на больших расстояниях (для потенциалов с кулоновским «хвостом» на бесконечности $\mu = 0$ и $\xi(\infty) = 1$).

Проиллюстрируем выражение (22) на потенциале Хюльтена, допускающем точное решение для состояний с $l = 0$. Условие квантования (23) приводит в данном случае [22] (как и для кулоновского потенциала [25]) к точному спектру s -уровней, см. первую формулу в (13). Из (22) находим

$$C_{ns}^{WKB} = \xi(n(\lambda - 1)) \sqrt{\frac{\lambda + 1}{8\pi n(\lambda - 1)}} a^n, \quad a = \frac{\lambda^\lambda}{(\lambda - 1)^{\lambda-1}}, \quad \lambda = \frac{g}{\bar{g}_n}, \quad (26)$$

$$\rho_n \equiv \frac{C_{ns}^{WKB}}{C_{ns}} = \frac{\xi(n\lambda)}{\xi(n)} = \frac{\xi(n + 2\kappa R)}{\xi(n)}. \quad (27)$$

Приближение (22) имеет высокую точность при $n \gg 1$ и произвольной энергии уровня:

$$\rho_n = 1 + \frac{\kappa R}{6n(n + 2\kappa R)} + \frac{1}{72n^2} \left(\frac{\kappa R}{n + 2\kappa R} \right)^2 + \dots,$$

а для мелких уровней — при всех $n = 1, 2, \dots$ (что достигается благодаря множителю $\xi(2\kappa R)$ в (22)):

$$\rho_n = 1 + d_1 \kappa R + d_2 (\kappa R)^2 + \dots, \quad \kappa R \ll 1, \quad (28)$$

$$d_1 = 2[\ln n - \psi(n)] - \frac{1}{n}, \quad d_2 = \frac{1}{2}d_1^2 + \frac{2n + 1}{n^2} - 2\psi'(n)$$

($d_1 = 0.154$, $d_2 = -0.278$ при $n = 1$, $d_1 = 0.041$, $d_2 = -0.039$ при $n = 2$ и $d_1 \approx 1/6n^2$, $d_2 \approx -1/3n^3$ при $n \gg 1$). Даже в наименее благоприятном случае глубоких уровней $\rho_n \rightarrow 1/\xi(n)$, что составляет 1.042, 1.028 и $1 + 0.083n^{-1}$ при $n = 2, 3$ и $n \rightarrow \infty$.

Аналогичные результаты были получены и для других потенциалов. Так, для $V(r) = -g/2R^2 \operatorname{ch}^2(r/R)$ имеем $\kappa R = \sqrt{g+1/4} - \sqrt{g_n+1/4}$, $\tilde{g}_n = 2n(2n-1)$ и

$$\rho_n = [\xi(2(n+\kappa R), 1/2)/\xi(2n, 1/2)]^{1/2}, \quad (29)$$

откуда $\rho_n = 1 + \kappa R/48n(n+2\kappa R) \rightarrow 1$ при $n \gg 1$ и $\rho_n = 1$ в момент возникновения ns -уровня, а в случае глубоких ($\kappa \rightarrow \infty$) уровней $\rho_n \rightarrow [\xi(2n, 1/2)]^{-1/2} = 0.9898, 0.9948$ и $1 - 0.0104n^{-1}$ соответственно для $n = 1, 2$ и $n \gg 1$. Рассмотренные примеры показывают, что квазиклассическое приближение, модифицированное в соответствии с работами [22–24], не только является асимптотически точным в пределе $n \rightarrow \infty$, но и «затягивается» вплоть до небольших квантовых чисел $n \sim 1$.

Наконец, для $V(r) = -Z/r$ имеем $\xi = 1$, точка поворота $r_t = 2\nu^2/Z$ и

$$C_\kappa^{WKB} = (8\pi\nu)^{-1/2}(2e/\nu)^\nu \quad (30)$$

(см. работу Аммосова, Делоне и Крайнова [6], в которой $n^* \equiv \nu$ — эффективное главное квантовое число, а асимптотический коэффициент $C_{n^*,0}$ отличается от нашего в два раза). При $\nu \gtrsim 1$ это выражение хорошо согласуется с $C_\kappa^{(0)}$, как видно из рис. 1. Однако при $\nu \rightarrow 0$ формула (30), в отличие от (3), не переходит в разложение (5), справедливое для слабосвязанных состояний в короткодействующем потенциале. Преимуществом приближения (3) является также то, что в нем учтена поправка на эффективный радиус системы, что, в частности, позволяет находить параметры r_s и r_{cs} (см. табл. 1 и 2).

5. Случай $l \neq 0$. При произвольном l асимптотику нормированной волновой функции запишем в виде

$$\psi_{\kappa lm}(r) \approx 2^{l+3/2} C_{\kappa l} \sqrt{\frac{\kappa^3}{(2l+2)!}} e^{-\kappa r} (\kappa r)^{\nu-1} Y_{lm} \left(\frac{r}{r_t} \right). \quad (31)$$

Для наимизшего состояния с орбитальным моментом l в кулоновской задаче, $V(r) = -Z/r$, имеем [1] $C_{\kappa l} = 1$ при любом $l = 0, 1, \dots$, чем объясняется выбор зависящих от l множителей в (31).

При $l \geq 1$ убывающее на бесконечности решение уравнения Шредингера $W_{\nu, l+1/2}(2\kappa r) \propto r^{-l}$ при $r \rightarrow 0$, поэтому приближение нулевого радиуса неприменимо. Достаточно общий результат можно получить в том случае, когда во «внутреннем» потенциале $U(r)$ имеется мелкий l -уровень. В момент возникновения l -уровня его волновая функция убывает на бесконечности (благодаря центробежному барьеру, $l \neq 0$) и остается нормируемой: $\chi_l(r) \approx A_l r^{-l}$, $r \gg r_0$. Применяя процедуру сшивания в области $r_0 \ll r \ll \min(\kappa^{-1}, a_B)$ и учитывая связь $1/A_l^2$ с эффективным радиусом системы [26], получаем

$$C_{\kappa l}^2 = (2l+2)! \left[\frac{\Gamma(l+1-\nu)}{2^{l+1-\nu} \Gamma(l+1)} \right]^2 \left| \frac{\kappa^{2l-1}}{\tilde{r}_l} \right|, \quad l \geq 1, \quad (32)$$

где \tilde{r}_l — значение эффективного радиуса в момент возникновения l -уровня. Отметим, что $\kappa^{2l-1}/\tilde{r}_l$ — безразмерный параметр, причем⁷⁾ $\tilde{r}_l < 0$. Так, для прямоугольной ямы радиуса R

$$\tilde{r}_l = -\beta_l R^{1-2l} \tag{33}$$

($\beta_1 = 3, \beta_2 = 15, \beta_3 = 315, \dots$) и аналогично для других короткодействующих потенциалов.

Имеется существенное различие между формулами (3) и (32): в то время как в (3) первый член разложения универсален и полностью определяется кулоновским взаимодействием (и энергией уровня), в (32) входит эффективный радиус \tilde{r}_l , зависящий от короткодействующей части потенциала $U(r)$. Для состояний с $l \neq 0$ не существует аналога разложения (3), мало чувствительного к искажению кулоновского потенциала на расстояниях $r \sim r_0 \ll a_B$. Подчеркнем, что наличие мелкого (не кулоновского, т. е. $\nu \neq n$) l -уровня уже указывает на перестройку атомного спектра (эффект Зельдовича) для состояний с моментом $l \neq 0$ [28, 29]. Именно к этому случаю и относится формула (32).

6. Формулы (3) и (5) связывают асимптотический коэффициент на бесконечности с эффективным радиусом системы. Если известно явное выражение для C_κ , то разложение его при $\kappa \rightarrow 0$ дает значение радиуса $\tilde{r}_n \equiv r_s(g = g_n)$ в момент возникновения n -уровня (а также и первую поправку $\propto \kappa$). Для потенциала Хюльтена из (13) таким способом получаем

$$r_s(g) = \tilde{r}_n - \beta'_n \kappa \tilde{r}_n^2 + \dots, \quad g \rightarrow \tilde{g}_n, \tag{34}$$

где

$$\tilde{r}_n = \beta_n R, \quad \beta_n = 4 [\psi(n+1) - \psi(1)] - n^{-1}. \tag{35}$$

Эти выражения можно получить также разложением точной формулы (14) вблизи $g = \tilde{g}_n$. Для основного уровня $\beta_1 = 3, \beta'_1 = 7/9$, для $n = 2$ имеем $\beta_2 = 5.5, \beta'_2 = 79/121$, а для высоковозбужденных состояний

$$\tilde{r}_n = 4R \left(\ln n + C + \frac{1}{4n} - \frac{1}{12n^2} + \dots \right), \quad \beta'_n = \frac{1}{2} + \frac{\pi^2}{24(\ln n + C)^2} + \dots \tag{36}$$

Аналогично в случае $U(r) = -g/2 \operatorname{ch}^2(r/R)$

$$\tilde{r}_n = 2R[\psi(2n) + C] = 2R \left[\ln n + (C + \ln 2) - \frac{1}{4n} - \frac{1}{48n^2} + \dots \right]. \tag{37}$$

Покажем, что логарифмический рост эффективных радиусов \tilde{r}_n для высоковозбужденных n -состояний является общим свойством короткодействующих (но не финитных!) потенциалов (см. также рис. 4). Пусть

$$U(r) \approx -\frac{1}{2}g\mu^2(\mu r)^{-2\beta} \exp\{-(\mu r)^\alpha\}, \quad r \gg r_0, \tag{38}$$

⁷⁾ Для состояний с $l \geq 1$ в короткодействующем потенциале [26]. С другой стороны, для s -состояний эффективный радиус $\tilde{r}_s > 0$, если только потенциал $U(r)$ не обладает широким барьером [27].

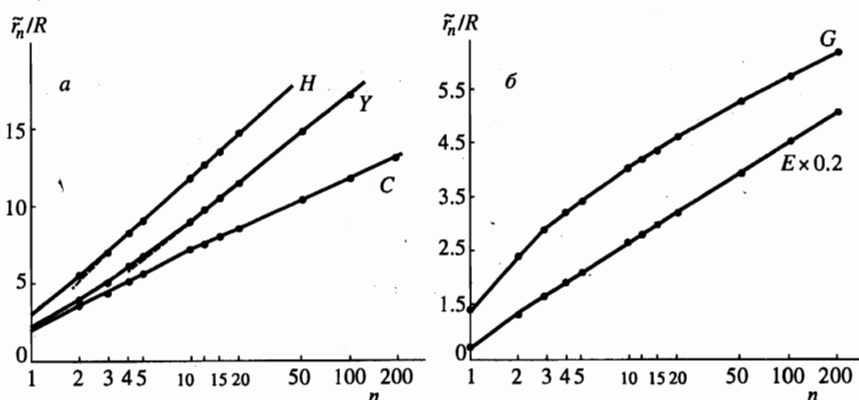


Рис. 4. Эффективные радиусы \bar{r}_n в момент возникновения ns -уровня, $g = \bar{g}_n$. Кривые H, Y, C, E и G относятся соответственно к $v(x) = (e^x - 1)^{-1}, e^{-x}/x, 1/\text{ch}^2 x$ (потенциал записан в форме (С.1)), $\exp(-x)$ и $\exp(-x^2)$. В случае E численные значения радиусов \bar{r}_n уменьшены в пять раз. Точками обозначены результаты численных расчетов

тогда в момент возникновения ns -уровня его волновая функция

$$\chi_0(r) = 1 - g_n \alpha^{-2} (\mu r)^{-2(\alpha+\beta-1)} \exp\{-(\mu r)^\alpha\} + \dots, \quad r \rightarrow \infty \quad (38a)$$

(параметр μ^{-1} относится к асимптотике потенциала $U(r)$ на больших расстояниях и не обязательно совпадает с его характерным радиусом r_0 , введенным в (2)). Разность $1 - \chi_0^2(r)$ становится экспоненциально малой при $r > r_*$, где

$$(\mu r_*)^\alpha = \ln g_n - 2(\alpha + \beta - 1) \ln \ln g_n + \dots$$

При $n \gg 1$ применима квазиклассика, откуда $g_n \propto n^2$ и при $r_0 \ll r < r_*$

$$\begin{aligned} |\chi_0(r)| &\lesssim [-U(r)]^{-1/4} \sim g_n^{-1/4} (\mu r)^{\beta/2} \exp\left\{\frac{1}{4}(\mu r)^\alpha\right\} \propto \\ &\propto \exp\left\{-\frac{\ln n}{2} \left[1 - \left(\frac{r}{r_*}\right)^\alpha\right]\right\} \ll 1. \end{aligned} \quad (39)$$

Интеграл в формуле Швингера—Сморозинского (А.9) набирается на расстояниях $r \lesssim r_*$ (переходная область $|r - r_*| \sim r_*/\ln n$ является узкой при $n \rightarrow \infty$), откуда⁸⁾

$$\bar{r}_n = 2^{(\alpha+1)/\alpha} \mu^{-1} \left\{ (\ln n)^{1/\alpha} - \frac{\alpha + \beta - 1}{\alpha} (\ln n)^{(1-\alpha)/\alpha} \cdot \ln \ln n + \dots \right\}. \quad (40)$$

В частности, для потенциалов с чисто экспоненциальным ($\alpha = 1, \beta = 0$) «хвостом» на бесконечности эта асимптотика согласуется с точными формулами (35) и (37), причем разложение идет по обратным степеням N :

⁸⁾ Предполагается, что потенциал $U(r)$ является гладким и применимо квазиклассическое приближение. Очевидный контрпример: финитные потенциалы, например прямоугольная яма (для которой $\bar{r}_n = R$ независимо от номера уровня n , см., например, [10]) или δ -потенциал.

$$\bar{r}_n = 4\mu^{-1} \left(\ln N + k_0 + \frac{k_1}{N} + \frac{k_2}{N^2} + \dots \right), \quad (41)$$

где $N = n - \gamma$, а постоянная γ (не зависящая от n) определена в (24). Так, для потенциала с кулоновской особенностью в нуле (например, потенциала Хюльгена) $\gamma = 0$ и $N = n$, а для конечных в нуле потенциалов $N = n - 1/4$. Для первых двух коэффициентов, k_0 и k_1 , можно получить замкнутые аналитические выражения, приведенные в Приложении С.

С другой стороны, в случае потенциала Юкавы $\alpha = 1$, $\beta = 1/2$, поэтому в асимптотике (40) присутствует двойной логарифм — см. кривую Y на рис. 4а, из которого видно, что асимптотика (40) для потенциала Юкавы устанавливается значительно позже, чем для потенциалов с чисто экспоненциальным «хвостом» (кривые H и C). Рисунок 4б показывает, что рост эффективных радиусов \bar{r}_n в случае гауссовского потенциала ($\alpha = 2$) более медленный, чем при $\alpha = 1$, и соответствует зависимости $\bar{r}_n \propto \sqrt{\ln n}$ (результаты, представленные на рис. 4 в виде точек, были получены при численном решении уравнения Шредингера).

Итак, эффективный радиус ns -состояния (при $g \approx g_n$) логарифмически «разбухает» с ростом n . Отметим определенное сходство этого результата с известным ограничением Фруассара в физике высоких энергий [30, 31].

7. В заключение заметим следующее. Разложение (5) справедливо только в резонансном случае: $\kappa r_0 \ll 1$, $|a_s| \gg r_s$, т. е. при наличии мелкого уровня (реального или виртуального) в короткодействующем потенциале $U(r)$. Что же касается (3), то для его применимости такое условие необязательно, поскольку частицу связывает не $U(r)$, а кулоновское притяжение ($Z > 0$). Как видно из (3), поправка к $C_\kappa^{(0)}$ содержит множитель c_1 . При $\nu \gg 1$ имеем $c_1 \propto \nu^{-2} \rightarrow 0$, что обеспечивает хорошую точность нулевого приближения $C_\kappa \approx C_\kappa^{(0)}$ в случае высоковозбужденных уровней.

Коэффициент c_1 сохраняет численную малость и в области $\nu \sim 1 \div 2$, к которой относится большая часть s -состояний нейтральных атомов и положительных ионов (см. рис. 1). Однако $c_1(\nu) \rightarrow 0$ при $\nu \rightarrow n$, и условие применимости формулы (3) меняется, так как приближение (2) перестает быть справедливым. Формально это проявляется в обращении в нуль функции $\varphi(r)/\Gamma(1 - \nu)$ при $r \lesssim r_0$, а по существу связано с тем, что коэффициенты разложения эффективного радиуса становятся аномально большими при $a_{cs} \rightarrow 0$: $r_{cs} \propto r_0^3/a_{cs}^2$, и т. д. (см. (В.7)). Этот случай нужно рассмотреть отдельно. Как вытекает из (21), поправка к $C_\kappa^{(0)}$ здесь мала, но не обращается в нуль при $\nu = n$. Окончательная формула (3) записана нами в форме, справедливой при всех $\nu \gg r_0$, включая и значения параметра ν , близкие к целым $n = 1, 2, 3, \dots$

Отметим, наконец, что выражение типа (3) для асимптотического коэффициента волновой функции возникает и в двухканальной задаче с кулоновским взаимодействием в одном из каналов и короткодействием в другом. Эта проблема изучалась [32, 33] на примере протон-антипротонного атома, в котором каналы $p\bar{p}$ и $n\bar{n}$ связаны благодаря сильному взаимодействию на малых ($r \sim r_0 \ll a_B$) расстояниях. При этом задача эффективно сводится к одноканальной и формулы (3), (4) остаются в силе, если параметр r_{cs} в (3) заменить на⁹⁾

$$r_{cs} \rightarrow (1 + \rho^2)r_e - \rho^2(2\Delta)^{-1/2}, \quad \rho^2 = \left\{ \left(\frac{1}{a_0} - \frac{1}{a_1} \right) / \left(\frac{1}{a_0} + \frac{1}{a_1} - 2\Delta \right) \right\}^2, \quad (42)$$

⁹⁾ Определение длин рассеяния a_0 и a_1 в [32, 33] различается знаком. Здесь мы следуем работе [32].

где a_0 и a_1 — длины рассеяния с изоспинами 0 и 1, $\Delta = \sqrt{2m_n(m_n - m_p)} \approx 1/4 \text{ Фм}^{-1}$, $r_e = r_{11} = r_{22}$ — элементы матрицы эффективных радиусов, а ρ^2 — относительная вероятность найти систему в состоянии $n\bar{n}$ в области действия ядерных сил (существенно, что коэффициент $c_1(\nu)$ сохраняет прежнее значение (4)). Однако вопрос об обращении в нуль коэффициента при следующем члене разложения ($\propto \kappa^2$) в указанных работах не рассматривался.

Авторы благодарны И. Л. Бейгману, Н. Б. Делоне, Б. О. Кербинову, В. П. Крайнову, Л. Б. Окуню и рецензенту за обсуждение результатов и полезные замечания, а также С. Г. Позднякову, А. В. Сергееву и М. Н. Маркиной за помощь в проведении численных расчетов и при оформлении рукописи. Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 98-02-17007).

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Для вывода разложений эффективного радиуса заметим, что волновая функция мелкого s -уровня в кулоновском поле $V(r) = -Zr^{-1} + U(r)$, искаженном на малых ($r \lesssim r_0 \ll \kappa^{-1}$) расстояниях, имеет вид (2), где

$$\Gamma(1 - \nu)W_{\nu, 1/2}(2\kappa r) \equiv w(r) = v(r, \kappa^2) - \frac{1}{2}\rho f(\nu)u(r, \kappa^2), \quad (\text{A.1})$$

$$u(r, \kappa^2) = \eta(\rho) + \frac{1}{6}\kappa^2 r^2 \bar{\eta}(\rho) + O((\kappa r)^4), \quad (\text{A.2})$$

$$v(r, \kappa^2) = \xi(\rho) + \frac{1}{2}\kappa^2 r^2 \bar{\xi}(\rho) + O((\kappa r)^4), \quad (\text{A.3})$$

$$f(\nu) = 2\psi(1 - \nu) - 2 \ln \nu + \nu^{-1}, \quad \psi(z) \equiv \Gamma'(z)/\Gamma(z), \quad (\text{A.4})$$

$\nu = Z/\kappa = (\kappa a_B)^{-1}$, $\rho = 2r/a_B$, $a_B = 1/Z$ — радиус Бора, $W_{\nu, 1/2}$ — функция Уиттекера и $\varphi(r)$ — волновая функция системы, отвечающая нулевой энергии; при этом

$$\varphi(r) \approx \xi(\rho) - \frac{r}{a_{cs}} \eta(\rho), \quad r \gg r_0. \quad (\text{A.5})$$

Входящие в (A.2), (A.3) функции ξ , η и т. д. выражаются через цилиндрические функции, причем $\xi(0) = \bar{\xi}(0) = \eta(0) = \bar{\eta}(0) = 1$. Например¹⁰⁾,

$$\eta(\rho) = \rho^{-1/2} J_1(2\sqrt{\rho}), \quad \xi(\rho) = -\rho^{1/2} N_1(2\sqrt{\rho}),$$

так что при $\rho \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} \eta(\rho) &= 1 - \frac{\rho}{2} + \frac{\rho^2}{12} + \dots, & \xi(\rho) &= 1 - \rho \ln \rho - (2C - 1)\rho + \frac{1}{2}\rho^2 \ln \rho + \dots, \\ \bar{\eta}(\rho) &= 1 - \frac{1}{12}\rho + \frac{1}{24}\rho^2 + \dots, & \bar{\xi}(\rho) &= 1 - \frac{1}{3}\rho \ln \rho + \frac{2}{9}(2 - 3C)\rho + \frac{1}{9}\rho^2 \ln \rho + \dots \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

¹⁰⁾ Явные выражения для функций $\bar{\eta}$ и $\bar{\xi}$ являются довольно громоздкими и приведены, например, в [34].

($C = 0.577\dots$), а при $\rho \rightarrow \infty$

$$\eta(\rho) \approx \pi^{-1/2} \rho^{-3/4} \sin\left(2\sqrt{\rho} - \frac{\pi}{4}\right), \quad \xi(\rho) \approx \pi^{1/2} \rho^{1/4} \cos\left(2\sqrt{\rho} - \frac{\pi}{4}\right),$$

и т. д. Функция $f(\nu)$ из (A.4) входит в уравнение, определяющее спектр мелких атомных уровней в кулоновской задаче с короткодействием [12, 35]:

$$Zf\left(\frac{Z}{\kappa}\right) = \frac{1}{a_{cs}} + \frac{1}{2}\kappa^2 r_{cs} + O(\kappa^4), \quad (A.7)$$

где a_{cs} и r_{cs} — ядерно-кулоновские [12–15] длина рассеяния и эффективный радиус; в частности,

$$r_{cs} = 2 \int_0^\infty \left\{ \left[\xi(2Zr) - \frac{r}{a_{cs}} \eta(2Zr) \right]^2 - \varphi^2(r) \right\} dr \quad (A.8)$$

(в силу (A.5) этот интеграл сходится на расстояниях $r \sim r_0$). В момент возникновения ns -уровня $a_{cs} = \infty$ (если $Z \neq 0$) или $a_s = \infty$ (если $Z = 0$), и (A.8) принимает вид

$$\bar{r}_{cs} = 2 \int_0^\infty [\xi^2(2Zr) - \varphi_0^2(r)] dr, \quad \bar{r}_s = 2 \int_0^\infty [1 - \chi_0^2(r)] dr. \quad (A.9)$$

Последняя формула была получена Швингером [36] и Смородинским [37]; см. также [1, стр. 631]. Тильдой мы обозначаем величины, относящиеся к моменту возникновения связанного s -состояния.

Сравнение (A.1) и (A.5) с учетом уравнения (A.7) показывает, что функции $w(r)$ и $\varphi(r)$ сшиваются в области $r_0 \ll r \ll \min(\kappa^{-1}, a_B)$. Условие нормировки $\int_0^\infty \chi_\kappa^2(r) dr = 1$ дает

$$\begin{aligned} \frac{2^{2\nu-2} \Gamma^2(1-\nu)}{\kappa C_\kappa^2} &= \int_0^{r_1} \varphi^2(r) dr + \int_{r_1}^\infty w^2(r) dr = \\ &= \int_0^\infty w^2(r) dr - 2r_{cs} - \int_0^{r_1} \left[w^2(r) - \left(\xi - \frac{r}{a_{cs}} \eta \right)^2 \right] dr, \end{aligned} \quad (A.10)$$

где мы использовали (A.8) и выбрали точку сшивания r_1 из указанной выше области. Как следует из (A.1), (A.6) и (A.7), при $r < r_1$

$$w(r) = \left(\xi - \frac{r}{a_{cs}} \right) \eta + \frac{1}{2} \kappa^2 \left(r^2 \bar{\xi} - \frac{r^3}{3a_{cs}} \bar{\eta} - r_{cs} r \eta \right) + O(\kappa^4),$$

поэтому последний интеграл в (A.10) имеет порядок $\kappa^2 r_0^3$ и не дает вклада в члены $\propto (\kappa r_0)^2$ в разложении C_κ^{-2} . Учитывая значение интеграла

$$\int_0^{\infty} [W_{\nu, 1/2}(x)]^2 dx = 2 \Gamma^2(\nu + 1) \left\{ 1 - \left(\frac{\sin \pi \nu}{\pi} \right)^2 \left[\psi'(\nu) - \frac{2\nu + 1}{2\nu^2} \right] \right\}, \quad (\text{A.11})$$

приходим при $\kappa r_0 \ll 1$ к формуле (3). Заметим, что два первых члена этого разложения были получены ранее в теории кулоновских систем с короткодействием (адронные атомы [12, 32]). При этом, однако, использовался более грубый метод и не было понято, что члены $\propto r^2 \ln r$, r^2 и $r^3 \ln r$ (реально присутствующие [16] в разложении кулоновских радиальных волновых функций при $r \rightarrow 0$) всегда нацело сокращаются, в силу чего неучтенные в (3) члены имеют порядок малости $(\kappa r_0)^3$.

ПРИЛОЖЕНИЕ В

В случае s -волны

$$k \operatorname{ctg} \delta_0(k) = -ik \frac{f(k) + f^*(k)}{f(k) - f^*(k)} = -\frac{1}{a_s} + \frac{1}{2} r_s k^2 + \dots, \quad (\text{B.1})$$

где $\delta_0(k)$ — фаза s -рассеяния, а $f(k) = |f| \exp(-i\delta_0)$ — функция Йоста. Уравнение Шредингера с $l = 0$ и потенциалом (12) имеет точные решения, выражающиеся через гипергеометрическую функцию Гаусса. Нормировка волновой функции дискретного спектра приводит к (13), а для $f(k)$ имеем [9]

$$f(k) = \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{g}{n(n-2ikR)} \right) = \frac{\Gamma(1-2ikR)}{\Gamma(1-ikR+\sqrt{g-(kR)^2}) \Gamma(1-ikR-\sqrt{g-(kR)^2})}. \quad (\text{B.2})$$

Разлагая это выражение при $k \rightarrow 0$, получаем формулы (14) для длины рассеяния и эффективного радиуса в потенциале Хюльтена. Для введенной в (14) функции $a(g)$ находим

$$a(g) = \pi \operatorname{ctg} \pi z + 2[\psi(1+z) + C] + (1+z)^{-1} = z^{-1} + 1 - \sum_{m=1}^{\infty} a_m z^m, \quad (\text{B.3})$$

где $z = \sqrt{g} - 1$, $a_m = 1$ при $m = 1, 3, 5, \dots$, $a_m = 2 \zeta(m+1) - 1$ при $m = 2, 4, \dots$ и $\zeta(s)$ — дзета-функция Римана [16]. Преобразуем (14) к виду

$$r_s = \frac{1}{3} \left\{ b'' + \frac{2}{b}(1-b'^2) + \frac{3b'}{1+z} - 16 \zeta(3) b^2 \right\} R, \quad (\text{B.4})$$

где $b = 1/a = z - z^2 + 2z^3 - 2cz^4 + 4cz^5 + \dots$, $b' = db/dz$ и $c = 2 - \zeta(3)$. В итоге

$$\frac{r_s}{R} = 3 - 7\kappa R + \frac{1}{2} [41 - 16 \zeta(3)] (\kappa R)^2 + \dots, \quad (\text{B.5})$$

а для

$$\frac{1}{2C_\kappa^2} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n (2^{n+1} - 1) (\kappa R)^n$$

получаем разложение (5) с коэффициентом c_3 , указанным в (15). При этом, как и следовало ожидать, в (5) отсутствует член, квадратичный по эффективному радиусу.

Для короткодействующих потенциалов имеют место следующие разложения: в момент возникновения n_s -уровня ($g \rightarrow \tilde{g}_n$, $n = 1, 2, \dots$)

$$\frac{a_s}{R} = \sum_{j=-1}^{\infty} \tilde{\alpha}_j (g - \tilde{g}_n)^j, \quad \frac{r_s}{R} = \sum_{j=0}^{\infty} \tilde{\beta}_j (g - \tilde{g}_n)^j, \quad (\text{B.6})$$

а вблизи нулей длины рассеяния, $g \rightarrow g_n$,

$$\frac{a_s}{R} = - \sum_{j=1}^{\infty} \alpha_j (g - g_n)^j, \quad \frac{r_s}{R} = \sum_{j=-2}^{\infty} \beta_j (g - g_n)^j, \quad (\text{B.7})$$

причем $0 < g_1 < \tilde{g}_1 < g_2 < \tilde{g}_2 < \dots$. Так, для прямоугольной ямы $\sqrt{g_n} = (n - 1/2)\pi$,

$$\tilde{\alpha}_{-1} = 2, \quad \tilde{\alpha}_0 = 1 - \frac{1}{2\tilde{g}_n}, \quad \tilde{\beta}_0 = 1, \quad \tilde{\beta}_1 = -\frac{1}{2\tilde{g}_n}, \dots, \quad (\text{B.8})$$

а значения g_n находятся из уравнения $\text{tg} \sqrt{g} = \sqrt{g}$, откуда

$$\sqrt{g_n} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi - \frac{1}{n\pi} + \dots \quad (n \gg 1), \quad \alpha_1 = \frac{1}{2}, \quad \alpha_2 = \frac{1}{4} \left(1 - \frac{1}{2g_n}\right),$$

$$\beta_{-2} = -\frac{1}{3\alpha_1^2} = -\frac{4}{3}, \quad \beta_{-1} = \frac{4}{3} \left(1 + \frac{1}{g_n}\right), \dots \quad (\text{B.9})$$

В случае потенциала Хюльгена

$$\tilde{g}_n = n^2, \quad \tilde{\alpha}_1 = 2n, \quad \tilde{\alpha}_0 = \frac{1}{2}\tilde{\beta}_0 = 2[\psi(n) + C] + \frac{3}{2n}. \quad (\text{B.10})$$

Для высоковозбужденных ($n \gg 1$) состояний получаем

$$\tilde{\alpha}_0 = 2(\ln n + C) + \frac{1}{n} + \dots, \quad \tilde{\beta}_1 = -\frac{(\ln n)^2}{n} \left(1 + \frac{2C}{\ln n} + \dots\right), \quad (\text{B.11})$$

$$\sqrt{g_n} = n + 1 - \frac{1}{2(\ln n + C)} + \dots, \quad \alpha_1 \approx 2\frac{(\ln n)^2}{n}, \quad \alpha_2 \approx 2\frac{(\ln n)^3}{n^2}, \quad \beta_{-2} \approx \frac{2n^2}{\ln n}. \quad (\text{B.12})$$

При значениях константы связи $g = g_n$, когда длина рассеяния обращается в нуль, эффективный радиус $r_s(g)$ имеет полюсы второго порядка¹¹⁾, причем он может обращаться как в $+\infty$ (например, для потенциала Хюльгена), так и в $-\infty$ (прямоугольная яма). Этим объясняется различие в поведении соответствующих кривых на рис. 3.

Наконец, при $g \rightarrow 0$ имеем

$$\frac{a_s}{R} = - \sum_{j=1}^{\infty} \alpha'_j g^j, \quad \frac{r_s}{R} = \sum_{j=-1}^{\infty} \beta'_j g^j. \quad (\text{B.13})$$

¹¹⁾ В отличие от этого при $g \rightarrow 0$ эффективный радиус $r_s(g)$ имеет полюс первого порядка.

Например, для прямоугольной ямы

$$\alpha'_j = \frac{2^{2j+3} - 2}{\pi^{2j+2}} \zeta(2j+2), \quad \beta'_{-1} = \frac{6}{5}, \dots \quad (\text{B.14})$$

($\alpha'_1 = 1/3$, $\alpha'_2 = 2/15$, $\alpha'_3 = 17/315$ и т. д.), а для потенциала Хюльгена

$$\alpha'_j = 2 \zeta(2j+1), \quad \beta'_{-1} = 4\zeta(5)[\zeta(3)]^{-2} = 2.871 \quad (\text{B.15})$$

(здесь мы использовали соотношение: $\psi^{(n)}(1) = (-1)^{n+1} n! \zeta(n+1)$, $n \geq 1$).

ПРИЛОЖЕНИЕ С

Короткодействующий потенциал притяжения запишем в виде

$$U(r) = -\frac{g}{2R^2} v\left(\frac{r}{R}\right) \equiv -U_0 f(\mu r), \quad (\text{C.1})$$

где $R \equiv r_0$ — радиус действия сил, а параметр μ^{-1} относится к асимптотической области $r \gg R$, в которой $U(r) \rightarrow 0$. Функция $v(r/R)$, или $f(\mu r)$, задает форму потенциала. Мы наложим условие

$$f(x) = e^{-x} + O(e^{-\lambda x}), \quad \lambda > 3/2 \quad (\text{C.2})$$

при $x \rightarrow \infty$, которое обеспечит сходимость интеграла J_1 в (C.4). Обычно можно считать, что $R = \mu^{-1}$ и $v(x) \equiv f(x)$, однако это не всегда удобно (например, в случае потенциала Вудса—Саксона).

Используя метод ВКБ, можно получить следующие формулы для коэффициентов разложения (41):

$$k_0 = C - \ln J_0, \quad k_1 = \frac{1}{2\pi} J_0(1 - J_1), \quad (\text{C.3})$$

где $C = 0.5772\dots$ — константа Эйлера,

$$J_0 = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \sqrt{f(x)} dx, \quad J_1 = \frac{1}{2} \int_0^\infty ([f(x)]^{-1/2} - e^{x/2}) dx \quad (\text{C.4})$$

(см. [38, стр. 147]). Рассмотрим несколько примеров. Для потенциала Хюльгена (12) $\mu^{-1} = R$,

$$N = n, \quad k_0 = C, \quad k_1 = 1/4, \quad (\text{C.5})$$

для $v(x) = 1/\text{ch}^2 x$ получаем $\mu^{-1} = R/2$,

$$N = n - 1/4, \quad k_0 = C + \ln 2 = 1.270, \quad k_1 = -1/4. \quad (\text{C.6})$$

Эти значения полностью согласуются с разложениями (36) и (37), вытекающими из точных формул для \tilde{r}_n . Для экспоненциального потенциала $\mu^{-1} = R$,

$$N = n - 1/4, \quad k_0 = C + \ln(\pi/2) = 1.029, \quad k_1 = 1/\pi^2 \quad (\text{C.7})$$

(различие в наклоне кривых на рис. 4а объясняется разной величиной параметра μ в этих случаях). Наконец, полагая

$$f(x) = (e^x + a)^{-1}, \quad -1 \leq a < \infty, \quad (\text{C.8})$$

будем иметь

$$J_0 = \frac{2}{\pi} \phi(a), \quad J_1 = a \left[\phi(a) - \left(1 + \sqrt{1+a}\right)^{-1} \right], \quad (\text{C.9})$$

$$\phi(a) = \begin{cases} \arcsin \sqrt{-a}/\sqrt{-a}, & -1 \leq a < 0, \\ a^{-1/2} \ln \left(\sqrt{a} + \sqrt{1+a} \right), & a > 0, \end{cases}$$

причем

$$\phi(a) = \begin{cases} \pi/a - \sqrt{1+a} + \dots, & a \rightarrow -1, \\ 1 - (1/6)a + (3/40)a^2 + \dots, & a \rightarrow 0, \\ (1/2)a^{-1/2}(\ln 4a + 1/2a + \dots), & a \rightarrow \infty. \end{cases}$$

Семейство потенциалов (С.8) включает в себя потенциал Хюльтена ($a = -1$), экспоненциальный ($a = 0$), а также известный из ядерной физики потенциал Вудса—Саксона ($a = \exp(\mu R)$), R — радиус ядра, μ^{-1} — диффузность его края). В последнем случае

$$\bar{g}_n = n^2 \pi^2 \left\{ 1 + \frac{2 \ln 2}{\rho} + O(e^{-\rho}) \right\}^{-2}, \quad \rho = \mu R \gg 1, \quad (\text{C.10})$$

$$k_0 = \frac{1}{2}\rho - \ln \rho + O(1), \quad k_1 = -\frac{\rho^2}{4\pi^2} + \dots$$

В пределе $\mu \rightarrow \infty$ потенциал становится финитным (прямоугольная яма радиуса R) и в (41) исчезает член, приводящий к логарифмическому росту эффективного радиуса.

В заключение отметим, что ряд (41) является, как правило, расходящимся. Так, в случае потенциала Хюльтена из (35) вытекает, что

$$k_j = -j^{-1} B_j \propto (-1)^{j/2} (j-1)! (2\pi)^{-j}, \quad j \rightarrow \infty, \quad (\text{C.11})$$

т. е. эти коэффициенты (с четными j) возрастают факториально. То же справедливо и для примера (37).

Литература

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика (нерелятивистская теория)*, Наука, Москва (1974).
2. Б. М. Смирнов, М. И. Чибисов, ЖЭТФ **49**, 841 (1965).
3. А. М. Переломов, В. С. Попов, М. В. Терентьев, ЖЭТФ **50**, 1393; **51**, 309 (1966).
4. В. С. Попов, В. П. Кузнецов, А. М. Переломов, ЖЭТФ **53**, 331 (1967).
5. Т. Yamabe, A. Tachibana, and H. J. Silverstone, Phys. Rev. A **16**, 877 (1977).
6. М. В. Аммосов, Н. Б. Делоне, В. П. Крайнов, ЖЭТФ **91**, 2008 (1986).

7. V. S. Popov, B. M. Karnakov, and V. D. Mur, Phys. Lett. A **229**, 306 (1997); В. С. Попов, Б. М. Карнаков, В. Д. Мур, ЖЭТФ **113**, 1579 (1998).
8. В. М. Галицкий, Е. Е. Никитин, Б. М. Смирнов, *Теория столкновений атомных частиц*, Наука, Москва (1981).
9. R. G. Newton, *Scattering Theory of Waves and Particles*, McGraw-Hill, New York (1982).
10. Т. Ю. Ву, Т. Омура, *Квантовая теория рассеяния*, Наука, Москва (1969).
11. А. А. Радциг, Б. М. Смирнов, *Параметры атомов и атомных ионов*, Энергоатомиздат, Москва (1986).
12. В. С. Попов, А. Е. Кудрявцев, В. Д. Мур, ЖЭТФ **77**, 1727 (1979); **80**, 1271 (1981).
13. H. A. Bethe, Phys. Rev. **76**, 38 (1949).
14. J. D. Jackson and J. M. Blatt, Rev. Mod. Phys. **22**, 77 (1950).
15. G. E. Brown and A. D. Jackson, *The Nucleon-Nucleon Interaction*, North-Holland, Amsterdam (1976).
16. М. Абрамовиц, И. Стиган, *Справочник по специальным функциям*, Наука, Москва (1979).
17. M. J. Seaton, Monthly Notices Roy. Astron. Soc. **118**, 504 (1958).
18. Ф. Дж. Бэрк, *Потенциальное рассеяние в атомной физике*, Атомиздат, Москва (1980).
19. G. Breit and W. G. Bourcicus, Phys. Rev. **74**, 1546 (1948).
20. Г. Брейт, *Теория резонансных ядерных реакций*, ИИЛ, Москва (1961).
21. Y. Yamaguchi, Phys. Rev. **95**, 1628 (1954).
22. М. С. Маринов, В. С. Попов, ЖЭТФ **67**, 1250 (1974); M. S. Marinov and V. S. Popov, J. Phys. A **8**, 1250 (1975).
23. Б. М. Карнаков, В. Д. Мур, В. С. Попов, ЖЭТФ **107**, 1768 (1995).
24. V. S. Popov, B. M. Karnakov, and V. D. Mur, Phys. Lett. A **210**, 402 (1996).
25. А. Б. Мигдал, *Качественные методы в квантовой теории*, Наука, Москва (1975).
26. В. Д. Мур, В. С. Попов, ТМФ **27**, 204 (1976).
27. А. Б. Мигдал, А. М. Переломов, В. С. Попов, ЯФ **14**, 874 (1971).
28. Б. М. Карнаков, В. Д. Мур, В. С. Попов, ДАН СССР **279**, 345 (1984).
29. Б. М. Карнаков, А. Е. Кудрявцев, В. Д. Мур, В. С. Попов, ЖЭТФ **94**, 65 (1988).
30. M. Froissart, Phys. Rev. **123**, 1053 (1961).
31. A. Martin, Preprint CERN/LHCC 97-49 (1997).
32. В. Д. Мур, А. Е. Кудрявцев, В. С. Попов, Препринт ИТЭФ-46, Москва (1980); Письма в ЖЭТФ **31**, 429 (1980).
33. J. Jaenicke, V. Kerbikov, and H.-J. Pirner, Z. Phys. A **339**, 297 (1991).
34. В. Д. Мур, В. С. Попов, ЯФ **42**, 1470 (1985).
35. T. L. Trueman, Nucl. Phys. **26**, 57 (1961).
36. J. Schwinger, Phys. Rev. **72**, 742 (1947); **78**, 135 (1950).
37. Я. А. Смородинский, ДАН СССР **60**, 217 (1948).
38. Б. М. Карнаков, В. П. Крайнов, *Квазиклассическое приближение в квантовой механике (ВКБ-метод)*, изд. МИФИ, Москва (1992).