ЖЭТФ, 2019, том 156, вып. 4 (10), стр. 742–749

РАЗЛОЖЕНИЕ НЕРЕГУЛЯРНОГО РЕШЕНИЯ В ТЕОРИИ ЭФФЕКТА ШТАРКА В РИДБЕРГОВСКИХ СОСТОЯНИЯХ ВОДОРОДОПОДОБНЫХ АТОМОВ

В. Г. Ушаков* [*], $\boxed{\textit{В. И. Ошеров}}$, ***Э. С. Медведев**** [**]

Институт проблем химической физики Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 6 марта 2019 г.,
после переработки 6 марта 2019 г.
Принята к публикации 7 марта 2019 г.

Получено разложение нерегулярного физического решения по сферическим функциям при отрицательных энергиях, необходимое для вывода S-матрицы. Прослежена взаимосвязь этого разложения с теорией, развитой в работе [6]. В частности, показано, что отсутствующее в этой теории разложение нерегулярного решения может быть получено из ее постулатов. Полученное таким образом разложение оказывается численно эквивалентным нашему разложению, в том числе и при больших значениях углового момента. Выведены аналитические выражения для матриц обоих разложений.

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 100-летию И. М. Халатникова

DOI: 10.1134/S0044451019100171

1. ВВЕДЕНИЕ

Для количественного описания спектров фотопоглощения атомов щелочных металлов в электрическом поле Хармин [1] использовал идею Фано [2] о локальном преобразовании (ЛП) волновых функций. В рамках этого подхода физические, т. е. ограниченные на бесконечности решения, записанные в параболических координатах, необходимо сшить вблизи остова со сферическими решениями, удовлетворяющими граничным условиям, определяемым в теории квантового дефекта [3, 4]. Согласно этой теории, решения вне остова представляют собой линейные комбинации регулярной и нерегулярной сферических кулоновских функций. Поэтому, чтобы получить решение, справедливое при любых значениях радиальной координаты r вне остова, необходимо сшить физическое параболическое решение со сферическими функциями, отвечающими определенным значениям орбитального углового момента l. Такая сшивка возможна лишь локально в промежуточной области расстояний, где влияние структуры остова и внешнего поля мало по сравнению с кулоновским притяжением остова. В процедуре сшивки используются взаимные разложения регулярных и нерегулярных параболических и сферических решений, которые необходимы для расчета наблюдаемых величин. Теория Хармина была с успехом применена к расчетам сечения фотоионизации атомов натрия и для интерпретации экспериментов по фотоионизации. Однако ее применение к расчетам дифференциального сечения в экспериментах по ионизационной микроскопии и сравнение с результатами высокоточных экспериментов [5] оказались неудовлетворительными. Более того, было показано, что ЛП для нерегулярной волновой функции, определенное в теории Хармина, не удовлетворяет некоторым необходимым требованиям [5–8].

Недавно Джаннакис и др., используя формальную операторную алгебру и вводя эффективный одночастичный потенциал, предложили обобщенную теорию локального преобразования (ОЛП) [6]. В теории ОЛП сделана попытка не использовать ЛП нерегулярного решения, но оно тем не менее присутствует неявно и может быть выведено из ее постулатов. В данной работе мы, во-первых, даем свой вывод ЛП нерегулярного решения и приводим явное аналитическое выражение для матрицы этого

[*] E-mail: uvg@icp.ac.ru
[**] E-mail: medvedev@icp.ac.ru

преобразования (разд. 2). Во-вторых, мы сравниваем наше ЛП нерегулярного решения с тем, которое мы вывели из теории Джаннакиса и др. (разд. 3), и находим, что численно они эквивалентны.

2. РАЗЛОЖЕНИЕ НЕРЕГУЛЯРНОГО РЕШЕНИЯ

В пределе слабого поля $F \ll 1$ (используются атомные единицы) можно выделить область остова ($r \lesssim 1$) и промежуточную (кулоновскую) область расстояний $1 \ll r \ll F^{-1/2}$, в которой внешнее поле слабо, $Fr \ll 1/r$, и потенциал является кулоновским, $-1/r$. В кулоновской области внешнее поле, несмотря на его слабость, может смешивать состояния с разными значениями орбитального момента на расстояниях, где полевая энергия электрона превышает разность его центробежных энергий между соседними состояниями l и $l-1$, $Fr \geq 2l/r^2$. Поэтому смешиванием можно пренебречь не во всей кулоновской области, а только в ее части, «ближней кулоновской области» $1 \ll r \ll F^{-1/3}$, которая намного у́же. При малых r, т. е. в ближней кулоновской области, существуют одновременно сферические и параболические решения, и поэтому можно выполнить ЛП между ними, тогда как при больших r, т. е. вне ее, имеются только параболические функции. Как следствие l-смешивания в кулоновской области, пришитые сферические функции должны неизбежно включать линейную комбинацию состояний с разными l. Результирующее уравнение сшивки имеет вид

$$P_l^m(\cos\theta)\, G_l(r) + \sum_{l'=m}^{\infty} \gamma_{l,l'} P_{l'}^m(\cos\theta)\, F_{l'}(r) = \\ = \sum_{k=1}^{\infty} \Upsilon_{l,k} \psi_k(\xi,\eta), \quad (1)$$

где $P_l^m(\cos\theta)$ — полиномы Лежандра, $F_{l'}(r)$ и $G_l(r)$ — регулярное и нерегулярное в нуле решения радиального уравнения Шредингера в чисто кулоновском потенциале и $\psi_k(\xi,\eta)$ — физические, ограниченные на бесконечности нерегулярные решения в чисто штарковском потенциале. Коэффициенты $\gamma_{l,l'}$ и $\Upsilon_{l,k}$ однозначно определяются условиями сшивки. Правая часть уравнения (1) представляет собой нерегулярное физическое решение вне остова, которое в ближней кулоновской области должно переходить в линейную комбинацию сферических функций, стоящую слева, что и выражает формула (1). Подробности вывода приведены в [9].

В [9] матрица $\gamma_{l,l'}$ вычислялась численно. В этом разделе будет выведено ее явное аналитическое выражение. Определения ненормированных радиальных сферических функций, принятые в [9], имеют вид

$$F_l(r) = \left(\frac{r}{n}\right)^l e^{-r/n}\Phi(-n+l+1, 2l+2, 2r/n), \quad (2)$$

и

$$G_l(r) = \left(\frac{r}{n}\right)^l e^{-r/n}\Psi(-n+l+1, 2l+2, 2r/n), \quad (3)$$

где $n = 1/\sqrt{-2E}$, E — энергия, $\Phi(a,b,x)$ и $\Psi(a,b,x)$ — функции Куммера соответственно $M(a,b,x)$ и $U(a,b,x)$ [10]. Мы рассматриваем случай $n \gg 1$, что соответствует высоковозбужденным ридберговским состояниям.

Функции в правой части уравнения (1) — это нерегулярные решения штарковской задачи в параболических координатах. Они имеют вид

$$\psi_k(\xi,\eta) = \chi_{\nu_k}(\xi)\, \psi_{\mu_k}(\eta), \quad (4)$$

где $\chi_{\nu_k}(\xi)$ — нормированные на единицу решения задачи на собственные значения для финитного движения вдоль координаты ξ и $\psi_{\mu_k}(\eta)$ — нерегулярные в нуле решения штарковской задачи для инфинитного движения по η. Нецелые квантовые числа $\nu_k = n\beta_k - (m+1)/2$ и $\mu_k = n - \nu_k - m - 1$ пробегают ряд дискретных значений, соответствующих собственным значениям β_k константы разделения β (парциального заряда) сепарабельного уравнения Шредингера в параболических координатах. При малых r, т. е. в ближней кулоновской области, эти функции примерно совпадают с параболическими кулоновскими функциями,

$$\chi_{\nu_k}(\xi) \approx c_k\, f_{\nu_k}(\xi), \quad \psi_{\mu_k}(\eta) \approx g_{\mu_k}(\eta), \quad (5)$$

где c_k — нормировочные постоянные. Регулярные и нерегулярные параболические кулоновские функции соответственно определены как

$$f_\varkappa(\zeta) = \left(\frac{\zeta}{n}\right)^{m/2} e^{-\zeta/2n}\Phi(-\varkappa, m+1, \zeta/n) \quad (6)$$

(где либо $\zeta = \xi$ и $\varkappa = \nu$, либо, как требуется ниже в выражении (10), $\zeta = \eta$ и $\varkappa = \mu$) и соответственно

$$g_\mu(\eta) = \left(\frac{\eta}{n}\right)^{m/2} e^{-\eta/2n}\,\Psi(-\mu, m+1, \eta/n). \quad (7)$$

Нерегулярные сферические и параболические функции (3) и (7) выбраны из условия ограниченности решения на бесконечности.

Коэффициенты $\gamma_{l,l'}$ и $\Upsilon_{l,k}$ однозначно определяются условием сшивки физического параболического решения со сферическими функциями в ближней кулоновской области и выбором функций (3) и (7).

Матрица $\Upsilon_{l,k}$ имеет вид [9]

$$\Upsilon_{l,k} = \frac{W_l}{m!\,N_{lm}} A_{\nu_k \mu_k, l}\, c_k\, \Gamma\left(-\mu_k\right), \tag{8}$$

где

$$A_{\nu\mu,l} = \sum_{p=0}^{l-m} \frac{(-1)^{p+m} 2^l \,(l-m)!l!\Gamma\left(1+\nu\right)\Gamma\left(1+\mu\right)(m!)^2}{(2l)!\Gamma\left(1+\nu-p\right)\Gamma\left(1+\mu+m-l+p\right)(l-p)!(l-m-p)!(m+p)!p!} \tag{9}$$

— матрица ЛП для регулярных решений. Последние имеют вид произведения функций, определенных в (6); ЛП для них определяется формулой (см. [1], а также Приложение А в [9])

$$f_\nu\left(\xi\right)\, f_\mu\left(\eta\right) = \sum_{l=m}^{\infty} A_{\nu\mu,l} P_l^m\left(\cos\theta\right) F_l(r). \tag{10}$$

В формуле (8) W_l и N_{lm} — вронскиан и нормировочная постоянная для сферических кулоновских функций,

$$W_l = \frac{n\,(2l+1)!}{2^{2l+1}\Gamma\left(1+l-n\right)}, \quad N_{lm} = \frac{2l+1}{2}\,\frac{(l-m)!}{(l+m)!}. \tag{11}$$

Наш метод вывода формулы (1) основан на точном разложении нерегулярных сферических функций по нерегулярным параболическим кулоновским функциям,

$$\mathcal{G}_l\left(r,\theta\right) \equiv P_l^m\left(\cos\theta\right) G_l(r) = \\ = \sum_{n_1=0}^{\infty} B_{l,n_1}\, f_{n_1}\left(\xi\right)\, g_{n_2}\left(\eta\right), \tag{12}$$

в котором матрица преобразования имеет вид

$$B_{l,n_1} = \frac{W_l}{m!\,N_{lm}} A_{n_1 n_2, l}\, N_{n_1}^2\, \Gamma\left(-n_2\right) \tag{13}$$

и $n_2 = n - n_1 - m - 1$. Параметр N_{n_1} есть нормировочная постоянная регулярного решения $f_{n_1}\left(\xi\right)$:

$$N_{n_1} = \frac{1}{m!}\sqrt{\frac{(m+n_1)!}{n_1!n}}. \tag{14}$$

Разложение (12) было получено в [9] для произвольных целых и нецелых n при специальном выборе (3) нерегулярной радиальной сферической функции $G_l\left(r\right)$, удовлетворяющей требованию затухания на бесконечности. Благодаря такому выбору, сферическую функцию в левой части выражения (12) при любом фиксированном $\eta \neq 0$ можно разложить по базису функций $f_{n_1}\left(\xi\right)$. Коэффициенты этого разложения пропорциональны затухающему на бесконечности параболическому решению (7) с $\mu = n_2$. Отметим, что любая другая нерегулярная радиальная функция, отличная от $G_l\left(r\right)$, является экспоненциально растущей и соответствующая ей сферическая функция не может быть разложена по параболическим решениям.

Физическая нерегулярная штарковская волновая функция в правой части формулы (1) с коэффициентами $\Upsilon_{l,k}$, определяемыми по формуле (8), при конечном r сходится к регулярной функции от θ, тогда как сингулярная часть этой функции при $r = 0$ совпадает с сингулярной частью $\mathcal{G}_l\left(r,\theta\right)$ [9]. Поэтому разность между ними есть регулярная функция от r и θ, которую можно разложить в ряд по регулярным сферическим функциям:

$$\Psi_{l,reg}\left(\xi,\eta\right) = \sum_{k=1}^{\infty} \Upsilon_{l,k}\chi_{\nu_k}\left(\xi\right)\psi_{\mu_k}\left(\eta\right) - \mathcal{G}_l\left(r,\theta\right) = \\ = \sum_{l'=m}^{\infty} \gamma_{l,l'} P_{l'}^m\left(\cos\theta\right) F_{l'}(r), \tag{15}$$

что приводит к формуле (1).

В работе [9] матрица γ была найдена численно, здесь же мы дадим ее аналитическое выражение. Для начала заметим, что основная трудность при вычислении матричных элементов $\gamma_{l,l'}$ связана с неравномерной сходимостью суммы в левой части уравнения (15), см. [9]. Почленное проектирование этой суммы на полиномы Лежандра невозможно, так как приводит к расходящемуся ряду. Обрезанная сумма имеет особенность при $\eta = 0$, причем вклад этой особенности в интеграл не исчезает при стремлении верхнего предела суммирования в бесконечность.

Чтобы найти матрицу $\gamma_{l,l'}$, преобразуем $\Psi_{l,reg}$ с помощью соотношений (8), (12) и (13) к виду

$$\Psi_{l,reg}(\xi,\eta) = \sum_{k=1}^{\infty} \Upsilon_{l,k}\chi_{\nu_k}(\xi)\,\psi_{\mu_k}(\eta) - \sum_{n_1=0}^{\infty} B_{l,n_1} f_{n_1}(\xi) g_{n_2}(\eta) = \frac{W_l}{N_{lm} m!} \times \left[\sum_{k=1}^{\infty} A_{\nu_k\mu_k,l}\, c_k^2\, \Gamma(-\mu_k)\; f_{\nu_k}(\xi) g_{\mu_k}(\eta) - \sum_{n_1=0}^{\infty} A_{n_1 n_2,l}\, N_{n_1}^2\, \Gamma(-n_2)\; f_{n_1}(\xi) g_{n_2}(\eta)\right]. \quad (16)$$

Обе суммы в правой части формулы (16) сходятся неравномерно при $\eta = 0$, и их разность при произвольно выбранных конечных верхних пределах суммирования является сингулярной функцией, которую нельзя разложить по сферическим гармоникам. Однако эту сингулярность можно устранить, вводя в суммы специальным образом подобранные обрезающие функции.

При асимптотически больших значениях k и n_1 коэффициенты $A_{\nu_k\mu_k,l}$ и $A_{n_1 n_2,l}$ являются гладкими функциями индексов,

$$A_{\nu\mu,l} \approx (-1)^l \nu^{l-m} \frac{2^l\,(m!)^2}{(l!)^2\,(l+m)!}. \quad (17)$$

Произведение $\Gamma(-\mu)\; g_\mu(\eta)$ при больших отрицательных значениях μ — также гладкая функция μ. Благодаря гладкой зависимости членов сумм от индексов, суммирования по большим значениям индексов могут быть заменены интегрированиями:

$$\sum_{n_1=n_{1,max}}^{\infty} F_{Coul}(n_1)\, A_{n_1 n_2,l} N_{n_1}^2 \Gamma(-n_2) \times f_{n_1}(\xi) g_{n_2}(\eta) = \int\limits_{n_{1,max}}^{\infty} F_{Coul}(n_1)\; A_{n_1 n_2,l}\, N_{n_1}^2 \times \Gamma(-n_2)\, f_{n_1}(\xi) g_{n_2}(\eta)\, dn_1, \quad (18)$$

и

$$\sum_{k=k_{max}}^{\infty} F_{St}(\nu_k)\; A_{\nu_k\mu_k,l}\, c_k^2\, \Gamma(-\mu_k)\; f_{\nu_k}(\xi) g_{\mu_k}(\eta) = \int\limits_{\nu_{k_{max}}}^{\infty} F_{St}(\nu)\, A_{\nu\mu,l} c_k^2 \Gamma(-\mu)\, f_\nu(\xi) g_\mu(\eta) \frac{dk}{d\nu}\, d\nu. \quad (19)$$

Здесь $F_{St}(\nu_k)$ и $F_{Coul}(n_1)$ — обрезающие множители для штарковской и кулоновской сумм. При больших значениях k и n_1 имеем

$$\frac{dk}{d\nu} = \frac{N_{n_1}^2}{c_k^2}, \quad (20)$$

где $n_1 = \nu$. Тогда, выбирая $n_{1,max} = \nu_{k_{max}}$ и $F_{Coul}(z) = F_{St}(z) = F_{cut}(z)$, получаем, что два интеграла равны друг другу.

Сингулярное поведение функций g_{μ_k} и g_{n_2} в формуле (16) определяется вырожденной гипергеометрической функцией $\Psi(a,b,x)$, которую можно представить в виде суммы равномерно сходящегося ряда по возрастающим степеням η и конечного числа сингулярных членов. После введения универсальной обрезающей функции в формулу (16) сингулярные члены взаимно уничтожаются и остающуюся функцию можно разложить в ряд по полиномам Лежандра. Разложение регулярных членов сумм проводится так же, как это делалось в [9] для регулярных функций. Окончательно получаем

$$\gamma_{l,l'} = \frac{W_l}{N_{lm}} \left[\sum_{n_1=0}^{\infty} F_{cut}(n_1)\, A_{n_1 n_2,l}\, N_{n_1}^2 \breve{A}_{n_1 n_2,l'} - \sum_{k=1}^{\infty} F_{cut}(\nu_k)\, A_{\nu_k\mu_k,l}\, c_k^2\, \breve{A}_{\nu_k\mu_k,l'}\right], \quad (21)$$

где

$$\breve{A}_{\nu\mu,l} = \sum_{p=0}^{l-m} \frac{(-1)^{p+m}\, 2^l\, (l-m)! l! \Gamma(1+\nu)\, \Gamma(1+\mu+m)\; \Psi(\mu, l-m-p)}{(2l)! \Gamma(1+\nu-p)\, \Gamma(1+\mu+m-l+p)\, (l-p)!(l-m-p)!(m+p)!p!}, \quad (22)$$

$$\Psi(\mu,s) = \psi(-\mu+s) - \psi(1+m+s) - \psi(1+s) \quad (23)$$

(ψ — это дигамма-функция).

Следует отметить, что сходимость сумм в формуле (21) обеспечивается обрезающими функциями, которые в обеих суммах имеют один и тот же функциональный вид. Отметим также, что точная сшивка штарковской волновой функции со сферическими кулоновскими решениями происходит только в асимптотическом пределе $n \to \infty$. Это обстоятельство отражает приближенный характер сшивки вследствие полного пренебрежения полем в ближней кулоновской области. На точность сшивки влияет также важный физический параметр

$$\delta = 16Fn^4, \quad (24)$$

определяющий высоту потенциального барьера для ионизации; значение $\delta = 1$ соответствует классическому порогу ионизации. На практике, когда $\delta \sim 1$, высокой точности сшивки можно добиться уже при $n > 10$, если правильно выбрать обрезающую функцию.

Новым по сравнению с разложением Хармина [1] в нашем локальном преобразовании (1) является то, что сшивка параболических функций со сферическими проводится в более узкой ближней области, а не во всей кулоновской области и что в левой части уравнения сшивки (1) добавилась сумма по регулярным сферическим функциям. Вне ближней кулоновской области происходит смешивание состояний с разными l, и поэтому физическое решение, продолженное в область сферической симметрии, обязательно должно включать вклады состояний с разными l. Это радикально отличается от харминовского уравнения сшивки, в котором физическое решение сшивается со сферической функцией с определенным l во всей кулоновской области. Преимущество нашего разложения было численно продемонстрировано в работе [9] для $l = 1, 3, 5$, $r = 10 - 80$ и $-1 < \cos\theta < 1$ путем сравнения с точным решением.

Используя разложение (1) нерегулярного решения и известное аналогичное разложение регулярного решения [1, 6, 9], мы получили в [9] выражение для S-матрицы, пригодное для расчета наблюдаемых величин, таких как сечения фотоионизации. В альтернативном методе ОЛП, развитом Джаннакисом и др. [6], разложение нерегулярного решения в явном виде не фигурирует. Тем не менее, используя основные предположения теории ОЛП, это разложение можно вывести в явном виде и сравнить его с полученным в данной работе. Это делается в следующем разделе.

3. СРАВНЕНИЕ С ТЕОРИЕЙ ОЛП

В этом разделе мы используем обозначения работы [6], а ссылки на формулы в ней снабжены префиксом «G». Одним из основных сильных утверждений теории ОЛП является равенство двух гриновских функций на малых расстояниях (см. формулы G18–G21 и последующий текст в [6]):

$$G^{C-S,smooth}\left(\mathbf{r},\mathbf{r}'\right) = G^{C,smooth}\left(\mathbf{r},\mathbf{r}'\right). \tag{25}$$

Обе функции определены как расходящиеся суммы по бесконечному набору дискретных значений константы разделения β (парциального заряда), но фактическое суммирование выполняется до некоторого общего максимального значения β. Подставляя явные выражения для соответствующих функций, приведенные в формулах G13, G15, G18, G19 и G22, и разлагая все регулярные параболические функции по базису сферических функций (формула G10), мы получим разложение нерегулярной функции в виде

$$g_{\epsilon\, lm}\left(\mathbf{r}\right) = \sum_{\beta^F} \left[U^T\left(\epsilon\right)\right]_{l\beta^F m} \chi_{\epsilon\beta^F m}\left(\mathbf{r}\right) - \\ - \sum_{l'} \tilde{\gamma}_{l,l'} f_{\epsilon\, l' m}\left(\mathbf{r}\right), \tag{26}$$

где

$$\tilde{\gamma}_{l,l'} = J_{l,l'} + \operatorname{ctg}\left(\pi n\right), \tag{27}$$

а $J_{l,l'}$ дается формулой G22. Подставляя в (26) наши функции и обозначения, получаем окончательный результат в виде формулы (1), в которой

$$\gamma_{l,l'} = \frac{W_l}{N_{lm}\,(m!)^2}\left[\sum_{n_1=0}^{\infty} A_{n_1 n_2,l}\, N_{n_1}^2\, \Omega(n_2) A_{n_1 n_2,l'} - \right. \\ \left. - \sum_{k=1}^{\infty} A_{\nu_k\mu_k,l}\, c_k^2\, \Omega(\mu_k)\, A_{\nu_k\mu_k,l'}\right], \tag{28}$$

где

$$\Omega(\mu) = \frac{\Gamma\left(1+m+\mu\right)}{\Gamma\left(1+\mu\right)} \times \\ \times \left[\frac{\psi\left(1+m+\mu\right) + \psi\left(1+\mu\right) - 2\ln n}{2} + \pi \operatorname{ctg}\left(\pi\mu\right)\right]. \tag{29}$$

Обе суммы в (28) расходятся, однако суммирование проводится до некоторого общего максимального значения β с использованием подходящей обрезающей функции.

Несмотря на очевидное различие выражений (21) и (28) для γ, они оказываются численно эквивалентными вплоть до больших значений углового момента. Чтобы сравнить эти две формулы для γ, мы использовали обрезающую функцию из работы [6]. Две матрицы, (21) и (28), определяют приближенные нерегулярные сферические решения $\mathcal{G}_{l,matched}(r,\theta)$, пришитые к физическому нерегулярному параболическому решению двумя разными методами. На рис. 1*а,б* и 2*а,б* показано их наложение на точное решение, а на рис. 1*в,г* и 2*в,г* — их разности с точным решением. На рис. 1 видно, что обе приближенные функции идеально совпадают с точной, а их разность с точной функцией составляет величину порядка 10^{-3} в широкой области изменения переменных.

Процедура сшивки справедлива, строго говоря, лишь в асимптотическом пределе $n \to \infty$, т. е. в пределе $F \to 0$ при фиксированном значении δ (см. (24)). Рисунок 2 иллюстрирует быструю сходимость: при увеличении n от 10.5 до 28.5 разность между

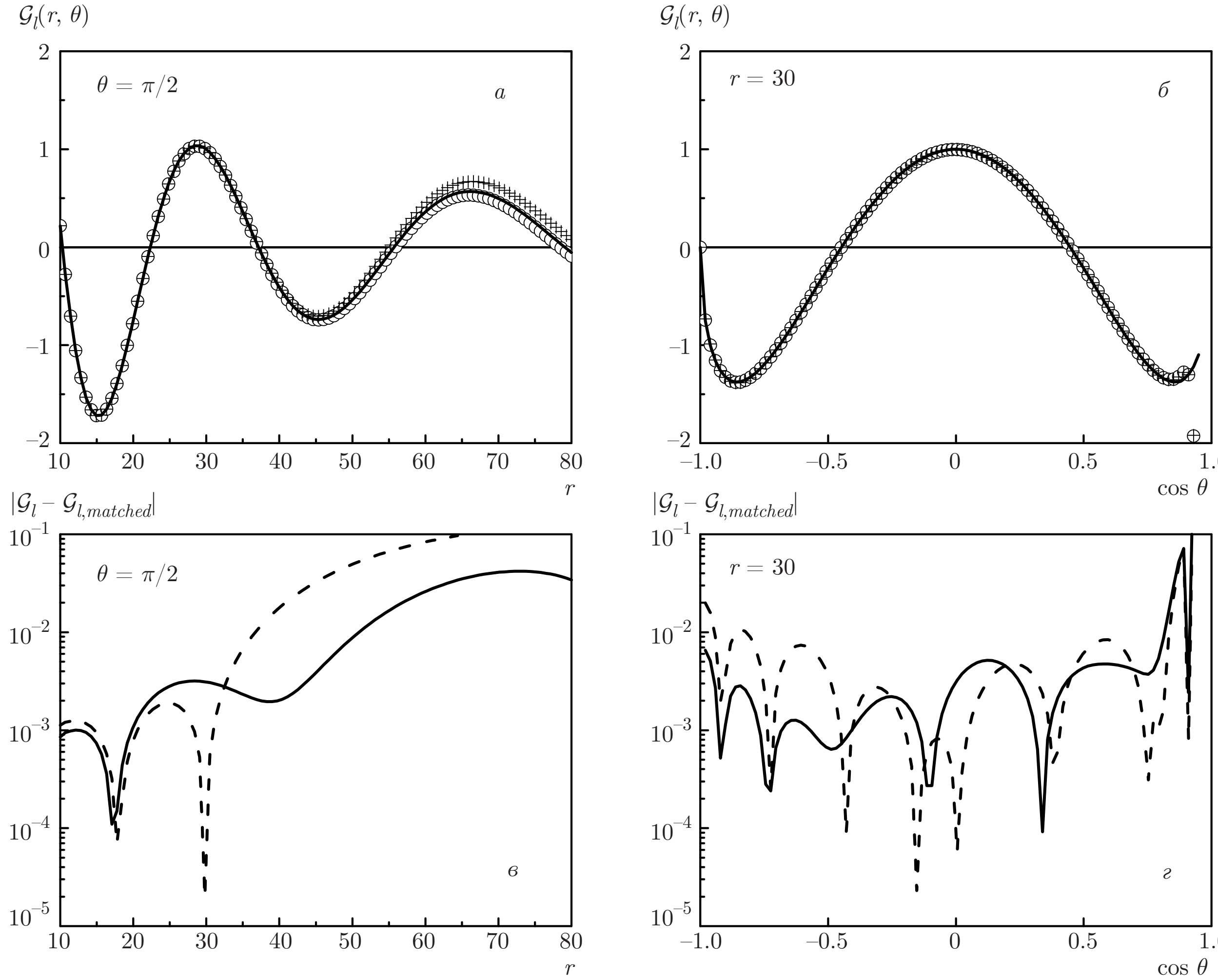

Рис. 1. Сравнение двух пришитых нерегулярных сферических функций с точным решением при $n = 10.5$, $m = 1$, $l = 3$ и $\delta = 1.3$: *а,б* — сплошные линии соответствуют точным решениям, символы — приближенным функциям $\mathcal{G}_{l,matched}(r,\theta)$, полученным двумя методами; *в,г* — поскольку две приближенные функции почти совпадают и их символы неразличимы, показана разность между точным решением и приближенными функциями, отвечающими матрицам (21) (сплошные линии) и (28) (штриховые линии). Все функции поделены на $\mathcal{G}_l\,(r = 30, \cos\theta = 0)$

точной и приближенными функциями уменьшается на порядок.

Отметим, что разность приближенной и точной функций возрастает при малых η ($\cos\theta \approx +1$). Это обусловлено не погрешностями сшивки, как таковой, а использованием конечного базиса при вычислении суммы в правой части формулы (1) и неравномерной сходимостью этой суммы при $\eta = 0$.

4. ОБСУЖДЕНИЕ

Основным источником неточностей теории Хармина является сшивка на малых расстояниях r физической нерегулярной штарковской волновой функции с нерегулярным сферическим решением, отвечающим определенному значению орбитального углового момента l. Однако, строго говоря, такая сшивка физически невозможна, потому что в широкой области малых r внешнее поле сильно смешивает состояния с разными l, несмотря на то, что оно мало по сравнению с кулоновским. Джаннакис и др. вывели общее выражение для K-матрицы (т. е. вещественной матрицы рассеяния, связывающей стоячие волны на бесконечности, см. формулу G6 в [6]), не прибегая явно к процедуре сшивки нерегулярного решения. Они ввели одночастичный потенциал, имитирующий соответствующее теории квантового дефекта граничное условие на остове, и применили формализм Липпмана – Швингера. На

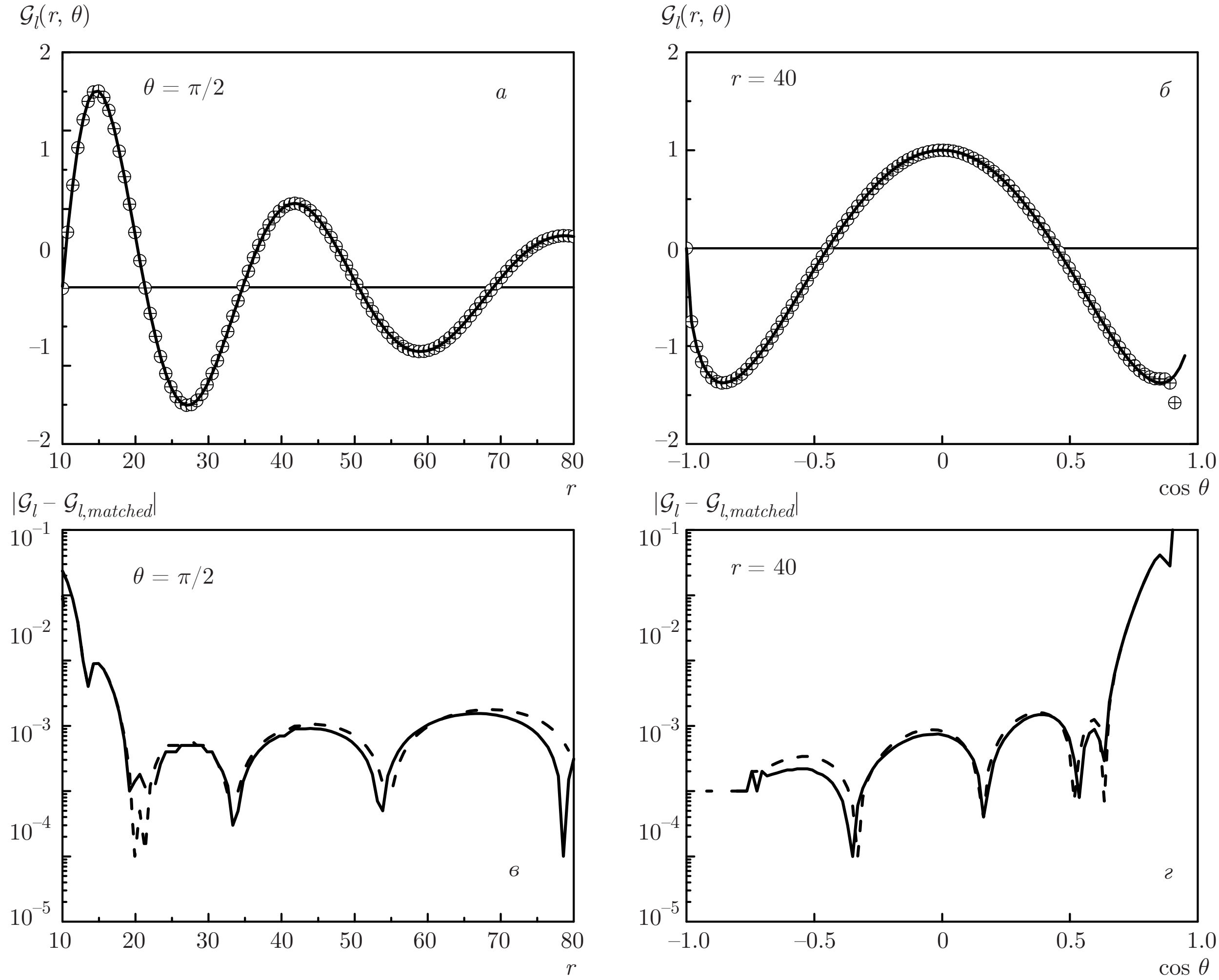

Рис. 2. То же, что на рис. 1, при $n=28.5$, $m=1$, $l=3$, и $\delta=1.3$. Все функции поделены на $\mathcal{G}_l\,(r=40, \cos\theta=0)$

самом же деле, как показано в настоящей работе, сшивка нерегулярных штарковской и кулоновской функций все равно неявно присутствует в теории Джаннакиса и др., и здесь дан прямой вывод условия сшивки на основе одного из ее главных постулатов — формулы G22; результирующее разложение нерегулярной функции приведено в (26) и (27). Используя эти формулы и аналогичное разложение регулярного решения, приведенное в формуле G10, можно получить ту же K-матрицу, что и в работе [6], безо всякого одночастичного потенциала. Матрица сшивки — матрица γ — в наших обозначениях имеет вид (28). Альтернативный подход, развитый в данной работе, основан на полученном в работе [9] точном разложении нерегулярной сферической кулоновской функции по нерегулярным параболическим кулоновским функциям (формула (12)). Результирующая формула (21) для матрицы γ внешне отличается от (28), однако численные расчеты показали, что две формулы имеют одинаковую точность и одинаковые пределы применимости.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В области сферической симметрии выполнена аналитическая сшивка физического нерегулярного решения штарковской задачи для ридберговских состояний водородоподобных атомов с линейной комбинацией нерегулярной и регулярных сферических функций в чисто кулоновском поле. Был принят во внимание тот факт, ранее ускользавший от внимания исследователей, что на малых расстояниях, где внешнее поле уже слабо по сравнению с кулоновским (кулоновская область), поле все еще может эффективно смешивать состояния с разными значениями орбитального момента. Другими словами, область сферической симметрии оказывается намного уже кулоновской области, что приводит к значительной перестройке волновой функции. Используя полученную здесь сшивку и аналогичную сшивку для регулярного решения, можно стандартными методами получить S-матрицу [9], необходимую для расчета наблюдаемых величин.

Мы посвящаем эту работу столетнему юбилею выдающегося ученого, основателя и многолетнего директора Института теоретической физики им. Л. Д. Ландау и просто замечательного человека академика Исаака Марковича Халатникова, «Халата» для его коллег и учеников. Один из нас (Э. С. Медведев) хранит теплые воспоминания о 1957–1963 гг. учебы в Московском физико-техническом институте и Институте физических проблем им. П. Л. Капицы, когда Халат был куратором 722 группы.

Финансирование. Работа выполнена по теме Государственного задания, номер государственной регистрации 0089-2019-0002.

ЛИТЕРАТУРА

1. D. A. Harmin, Phys. Rev. A **24**, 2491 (1981).

2. U. Fano, Phys. Rev. A **24**, 619 (1981).

3. M. J. Seaton, Prog. Phys. Soc. **88**, 801 (1966).

4. M. J. Seaton, Rep. Prog. Phys. **46**, 167 (1983).

5. G. D. Stevens, C.-H. Iu, T. Bergeman, H. J. Metcalf, I. Seipp, K. T. Taylor, and D. Delande, Phys. Rev. A **53**, 1349 (1996).

6. P. Giannakeas, Chris H. Greene, and F. Robicheaux, Phys. Rev. A **94**, 013419 (2016).

7. P. Giannakeas, F. Robicheaux, and Chris H. Greene, Phys. Rev. A **91**, 043424 (2015).

8. L. B. Zhao, I. I. Fabrikant, M. L. Du, and C. Bordas, Phys. Rev. A **86**, 053413 (2012).

9. V. G. Ushakov, V. I. Osherov, and E. S. Medvedev, J. Phys. A: Math. Theor. **52**, 385302 (2019).

10. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, т. 1, Наука, Москва (1973).