Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Г. А. Кравцова, А. М. Мандель, В. Н. Родионов, Уравнение для комплексной энергии связанной частицы в поле лазерного излучения в присутствии сильных статических электромагнитных полей, *ТМФ*, 2005, том 145, номер 2, 198–211

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf1896>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 35.174.16.151

26 апреля 2023 г., 17:17:18

© 2005 г. Г. А. Кравцова*, А. М. Мандель†, В. Н. Родионов†

УРАВНЕНИЕ ДЛЯ КОМПЛЕКСНОЙ ЭНЕРГИИ СВЯЗАННОЙ ЧАСТИЦЫ В ПОЛЕ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ПРИСУТСТВИИ СИЛЬНЫХ СТАТИЧЕСКИХ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ

Построены точные решения уравнений Шредингера и Паули для заряженных частиц во внешнем поле обобщенной конфигурации Редмонда. В данном поле рассчитаны функции Грина скалярной и спинорной частиц. С их помощью двумя различными методами выведены уравнения для комплексной квазиэнергии частицы, связанной короткодействующим потенциалом. Обсуждается область применимости полученных уравнений и различия в их решениях на примере внешнего постоянного электрического поля.

Ключевые слова: интенсивные поля, нелинейные явления, точные решения, квазистационарные состояния.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Как известно, одним из наиболее быстро развивающихся разделов атомной физики является начатое практически сразу после создания лазеров исследование процессов нелинейной ионизации атомов и их ионов сильным низкочастотным полем электромагнитного излучения [1]–[16]. При этом исходными данными были известные закономерности процесса ионизации постоянным электрическим полем и реакции однофотонной ионизации. В частности, уже в первых работах, посвященных этой теме, было показано, что в случае, когда энергия фотонов волны меньше потенциала ионизации, возникают явления многофотонной ионизации и туннельные эффекты, во многом аналогичные процессам в постоянном поле. Важно подчеркнуть, что с самого начала для теоретического изучения многофотонных процессов разрабатывались методы, не опирающиеся на теорию возмущений. В этой связи отметим, что основные результаты непертурбативного подхода к исследованию нелинейной ионизации постоянным и переменным полями были получены на основе модели короткодействующего атомного потенциала.

*Московский государственный университет, Москва, Россия. E-mail: krav@dio.ru

†Московская государственная геологоразведочная академия, Москва, Россия.
E-mail: vnrodionov@mtu-net.ru

Возрастающая актуальность подобных исследований обусловлена как получением все более сильных электромагнитных полей в лабораторных условиях, так и совершенствованием теоретических методов изучения квантовых процессов, описание которых невозможно в рамках стандартной теории возмущений по внешнему полю. Это относится, например, к исследованию нелинейных явлений в сильных полях сложных конфигураций, интерес к которым в последние годы заметно возрос [8]–[12], [16]–[18]. В частности, подробно рассматривалось совместное действие интенсивных статических электрического и магнитного полей на процесс ионизации атомарных частиц [16]. Детальный анализ процесса взаимодействия лазерного излучения с отрицательным ионом в сильном статическом электрическом поле представлен в работах [17], [18]. Изучение аналогичных нелинейных процессов ионизации в поле лазерного излучения при учете действия сильного магнитного поля¹⁾ содержится в серии работ [8], [9], [11], [12].

Весьма перспективным представляется изучение более общего случая, когда совместное действие на ионизацию оказывают лазерное излучение и интенсивные статические электромагнитные поля. Помимо чисто теоретического интереса к обобщению закономерностей, рассмотренных ранее, эта суперпозиция полей способна привлечь и внимание экспериментаторов. Комбинация волнового и статического полей дает возможность наблюдения ряда резонансных эффектов в многофотонных и туннельных явлениях ионизации. Важно, что при определенной полевой геометрии здесь также удастся отыскать точные решения квантовых уравнений движения заряженных частиц и, таким образом, несмотря на достаточную сложность конфигурации, продолжить развитие непертурбативного подхода к анализу изучаемых явлений.

Рассмотрим далее заряженную частицу, связанную короткодействующим потенциалом δ -ямы и находящуюся при этом во внешнем поле *обобщенной конфигурации Редмонда*. Это поле представляет собой комбинацию бегущей электромагнитной волны циркулярной поляризации и постоянного электрического и магнитного полей, ориентированных вдоль волнового вектора Пойнтинга. В общем случае такое поле задается четырьмя непрерывными параметрами – напряженностями постоянных электрического и магнитного полей, а также амплитудой и частотой волны. Кроме того, имеется еще одна дискретная степень свободы, отвечающая направлению круговой поляризации волны.

Процесс выхода частицы из δ -ямы обусловлен ее переходом с изолированного отрицательного уровня энергии на уровень в сплошном спектре, т.е. сводится к распаду связанного состояния. Внешнее электромагнитное поле влияет на этот переход двояким образом. Во-первых, формируются волновые функции конечного состояния; во-вторых, происходит сдвиг и уширение первоначального связанного уровня в δ -яме. В результате начальное состояние частицы во внешнем поле становится квазистационарным. Как известно, удобным инструментом для исследования таких состояний является понятие

¹⁾Напомним, что за такой полевой конфигурацией закрепилось название “поле Редмонда” по имени автора, впервые получившего точные решения квантовых уравнений движения заряженных частиц в этом поле [19].

комплексной энергии [2], [3]

$$W = W_0 + \Delta W - \frac{i\Gamma}{2}, \quad (1)$$

где $W_0 < 0$ – энергия невозмущенного связанного уровня, ΔW – сдвиг уровня энергии, обусловленный влиянием внешних полей, а Γ – ширина уровня, пропорциональная вероятности распада связанного состояния. Заметим, что при наличии волнового внешнего поля для адекватного описания рассматриваемой системы необходим переход к понятию комплексной квазиэнергии (см., например, [4], [5], [10]). Основная задача предлагаемой работы состоит в получении уравнения для комплексной квазиэнергии во внешнем поле, представляющем собой обобщенную конфигурацию Редмонда. Для этого используется метод аналитического продолжения, ранее примененный для внешнего поля простой конфигурации Редмонда [20].

2. РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА И ФУНКЦИЯ ГРИНА СКАЛЯРНОЙ ЧАСТИЦЫ ВО ВНЕШНЕМ ПОЛЕ ОБОБЩЕННОЙ КОНФИГУРАЦИИ РЕДМОНДА

Векторный потенциал внешнего поля обобщенной конфигурации Редмонда можно представить в виде

$$\vec{A} = -\vec{e}_x \frac{cE_0}{\omega} \sin(\omega t - kz) + \vec{e}_y \left[Hx + \frac{gcE_0}{\omega} \cos(\omega t - kz) \right] - \vec{e}_z Ect, \quad (2)$$

где $\vec{e}_i$ – орты декартовых осей, c – скорость света, ω и E_0 – частота волны и амплитуда ее электрического поля, $g = \pm 1$ задает круговую поляризацию волны, E и H – напряженности постоянных электрического и магнитного полей. Предполагается, что волна распространяется вдоль оси z , и вдоль этой же оси ориентированы векторы $\vec{E}$ и $\vec{H}$. Отметим, что формально изменение поляризации волны легко учесть изменением знака ω , что и используется в дальнейшем.

Для получения волновой функции скалярной заряженной частицы в поле обобщенной конфигурации Редмонда необходимо решить нестационарное уравнение Шредингера с гамильтонианом

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{Sh}} = & -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + i\hbar \frac{eE_0}{m\omega} \sin(\omega t) \frac{\partial}{\partial x} - i\hbar \left[\frac{eE_0}{m\omega} \cos(\omega t) + \omega_H x \right] \frac{\partial}{\partial y} + \\ & + \frac{e^2 E_0^2}{2m\omega^2} + \frac{1}{2} m\omega_H^2 x^2 + \frac{eE_0}{\omega} \omega_H x \cos(\omega t) + eEz, \end{aligned} \quad (3)$$

где e и m – соответственно модуль заряда²⁾ и масса частицы, $\omega_H = eH/mc$ – циклотронная частота. Уравнение Шредингера с гамильтонианом (3) решается стандартным методом разделения переменных. Движение в плоскости, нормальной магнитному полю, имеет тот же характер, что и в поле простой конфигурации Редмонда, т.е. при отсутствии электрического поля. Соответствующие собственные функции представляют

²⁾Поскольку в подобных расчетах, как правило, рассматриваются электроны, в дальнейшем предполагается, что заряд частицы отрицателен.

собой функции Эрмита, каждая из которых связана с определенным уровнем Ландау [4]. С другой стороны, движение вдоль оси z аналогично движению в однородном электрическом поле и описывается функцией Эйри [3]. Непосредственной подстановкой нетрудно убедиться, что волновая функция заряженной частицы в поле рассматриваемой конфигурации имеет вид

$$\psi_n(\vec{r}, t) = N u_n(\rho) \varphi(\xi) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \left[t \left(\hbar \omega_H \left(\frac{1}{2} + n \right) + e E z_0 + \frac{e^2 E_0^2}{2 m \omega (\omega - \omega_H)} \right) - y p_y + \frac{\omega_H e E_0}{\omega (\omega - \omega_H)} \left(x + \frac{p_y}{m \omega_H} \right) \sin(\omega t) - \frac{\omega_H e^2 E_0^2}{4 m \omega^2 (\omega - \omega_H)^2} \sin(2 \omega t) \right] \right\}, \quad (4)$$

где N – нормировочный коэффициент, $u_n(\rho)$ – функции Эрмита с аргументом

$$\rho(x) = \left(\frac{m \omega_H}{\hbar} \right)^{1/2} \left[x + \frac{p_y}{m \omega_H} - \frac{e E_0 \cos(\omega t)}{m \omega (\omega - \omega_H)} \right],$$

удовлетворяющие уравнению

$$\frac{d^2 u_n(\rho)}{d\rho^2} + (2n + 1 - \rho) u_n(\rho) = 0.$$

В вышеприведенных формулах p_y – сохраняющаяся величина поперечного импульса, n определяет уровень Ландау, а z_0 характеризует константу разделения переменных в уравнении Шредингера. В свою очередь, функции $\varphi(\xi)$ в (4) пропорциональны регулярной на бесконечности функции Эйри $\text{Ai}(\xi)$:

$$\varphi(\xi) = \frac{(2m)^{1/3}}{\pi (eE)^{1/6} \hbar^{2/3}} \text{Ai}(\xi)$$

с аргументом³⁾

$$\xi(z) = \left(\frac{2m e E}{\hbar^2} \right)^{1/3} (z - z_0).$$

Построим теперь временную функцию Грина скалярной заряженной частицы в рассматриваемом поле. С целью некоторого упрощения вычислений мы, не ограничивая общности, положим один из аргументов двухточечной функции Грина равным нулю. Проводя свертку по параметрам p_y , n и z_0 , задающим решение (4) в данном внешнем поле, имеем

$$G_{\text{Sh}}(\vec{r}, t; \vec{0}, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dp_y \int_{-\infty}^{\infty} dz_0 \Psi_n^*(\vec{0}, 0) \Psi_n(\vec{r}, t). \quad (5)$$

³⁾ При $z = z_0$ аргумент функции Эйри меняет знак. Нетрудно видеть, что z_0 представляет собой границу области классического движения частицы по оси z , т.е. соответствует точке поворота при ее продольном движении в постоянном электрическом поле.

Входящий в выражение (5) интеграл по z_0 легко вычисляется с использованием свойств функций Эйри. В результате имеем

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dz_0 \operatorname{Ai} \left[\left(\frac{2meE}{\hbar^2} \right)^{1/3} (z - z_0) \right] \operatorname{Ai} \left[- \left(\frac{2meE}{\hbar^2} \right)^{1/3} z_0 \right] \exp \left(- \frac{i}{\hbar} teEz_0 \right) = \\ = \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{it} \right)^{1/2} \frac{\hbar^{5/6}}{(2m)^{1/6} (eE)^{2/3}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\frac{mz^2}{2t} - \frac{(eE)^2 t^3}{24m} - \frac{1}{2} eEzt \right) \right]. \end{aligned}$$

Интеграл по p_y с функциями Эрмита аналогичен тому, который впервые рассматривался в работе [21]. Образующийся после этого интегрирования в выражении (5) ряд по полиномам Лагерра суммируется по n с помощью алгоритма, описанного в статье [9] (см. также [22], [23]). В результате временная функция Грина скалярной заряженной частицы в поле обобщенной конфигурации Редмонда выражается в элементарных функциях

$$G_{\text{Sh}}(\vec{r}, t; \vec{0}, 0) = \left(\frac{m}{2\pi i} \right)^{3/2} \frac{\omega_H}{2t^{1/2}} \sin^{-1} \left(\frac{\omega_H t}{2} \right) \exp \left(\frac{iS}{\hbar} \right), \quad (6)$$

где

$$\begin{aligned} S = \frac{mz^2}{2t} - \frac{1}{2} eEzt - \frac{(eE)^2 t^3}{24m} + \frac{1}{4} m\omega_H \left[(x^2 + y^2) \operatorname{ctg} \left(\frac{\omega_H t}{2} \right) - 2xy \right] + \\ + \frac{eE_0 y}{\omega} - \frac{(eE_0)^2 t}{2m\omega(\omega - \omega_H)} + \frac{\sin(\omega t/2) \sin(t(\omega_H - \omega)/2)}{\sin(\omega_H t/2)} \frac{eE_0 \omega_H}{\omega(\omega - \omega_H)} \times \\ \times \left[y \operatorname{ctg} \left(\frac{\omega t}{2} \right) - x - \frac{eE_0}{m\omega(\omega - \omega_H)} \right]. \end{aligned} \quad (7)$$

Следует отметить, что полученные выражения (6), (7) обобщают целый ряд ранее известных результатов. В пределе $\omega \rightarrow 0$ из них следует пропагатор скалярной частицы в постоянном электромагнитном поле произвольной конфигурации. Он задается той же формулой (6), но с показателем экспоненты

$$\begin{aligned} S = \frac{mz^2}{2t} - \frac{1}{2} eEzt - \frac{(eE)^2 t^3}{24m} + \frac{1}{4} m\omega_H \left[(x^2 + y^2) \operatorname{ctg} \left(\frac{\omega_H t}{2} \right) - 2xy \right] + \\ + \frac{1}{2} eE_0 xt + \frac{eE_0}{\omega_H} \left[\frac{\omega_H t}{2} \operatorname{ctg} \left(\frac{\omega_H t}{2} \right) - 1 \right] \left(y + \frac{eE_0 t}{2m\omega_H} \right). \end{aligned} \quad (8)$$

Легко видеть, что если принять массу частицы за единицу и произвести очевидные преобразования, то выражения (6), (8) воспроизводят соотношения (А.7)–(А.9) работы [16] для статического электромагнитного поля. При $E = 0$ выражение (6) описывает функцию Грина скалярной частицы в скрещенном поле [24], [25]. Если, напротив, “выключить” в выражении (6) постоянные поля, то получим пропагатор заряженной частицы в циркулярно поляризованной волне:

$$G_{\text{Sh}}(\vec{r}, t; \vec{0}, 0) = \left(\frac{m}{2\pi it} \right)^{3/2} \exp \left(\frac{iS}{\hbar} \right), \quad (9)$$

где

$$S = \frac{m}{2t}(x^2 + y^2 + z^2) + \frac{2eE_0x}{\omega^2 t} \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right) - \frac{eE_0y}{\omega} \left(\frac{\sin(\omega t)}{\omega t} - 1\right) + \frac{(eE_0)^2 t}{2m\omega^2} \left[\frac{4}{(\omega t)^2} \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right) - 1\right]. \quad (10)$$

Последняя формула согласуется с аналогичными результатами работ [5], [26].

3. УРАВНЕНИЕ ДЛЯ КОМПЛЕКСНОЙ КВАЗИЭНЕРГИИ СКАЛЯРНОЙ СВЯЗАННОЙ ЧАСТИЦЫ В ПОЛЕ ОБОБЩЕННОЙ КОНФИГУРАЦИИ РЕДМОНДА

Проследим основные моменты вывода уравнения для комплексной квазиэнергии на примере скалярной частицы. Вероятность распада связанного состояния частицы в единицу времени P в данном внешнем поле можно получить непосредственно из квадрата матричного элемента, просуммированного по квантовым числам конечных состояний до проведения интегрирования по времени. В нерелятивистском пределе это можно свести к однократному интегралу по времени от пропагатора легкой заряженной частицы (см. [9], [10], [27]). Таким образом, вероятность процесса представима в виде

$$P = \pi \left(\frac{2}{m}\right)^{3/2} \left(\frac{|W_0|}{\hbar}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dt G_{\text{Sh}}(\vec{0}, t; \vec{0}, 0) \exp\left(\frac{i}{\hbar} W_0 t\right) = \frac{\omega_H}{2} \left(\frac{|W_0|}{\pi \hbar}\right)^{1/2} \exp\left(-i\frac{3\pi}{4}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{t^{1/2}} \sin^{-1}\left(\frac{\omega_H t}{2}\right) \exp\left[\frac{i}{\hbar} (S + W_0 t)\right], \quad (11)$$

где W_0 – энергия невозмущенного связанного уровня, а функция S при нулевых пространственных координатах определяется формулой

$$S = -\frac{(eE)^2 t^3}{24m} - \frac{(eE_0)^2 t}{2m\omega(\omega - \omega_H)} \left[1 + \frac{2\omega_H \sin(\omega t/2) \sin(t(\omega_H - \omega)/2)}{t\omega(\omega - \omega_H) \sin(\omega_H t/2)}\right]. \quad (12)$$

Полюсы подынтегральной функции в точках $t_n = 2\pi n/\omega_H$, где $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, обходятся снизу.

Как известно, ширина связанного уровня пропорциональна вероятности процесса $\Gamma = P\hbar$. Для аналитического продолжения выражения (11) перепишем это соотношение таким образом, чтобы интегрирование в нем проводилось по положительной полуоси. С этой целью следует представить экспоненту в (11) в виде суммы действительной и мнимой частей. Интеграл, содержащий мнимую часть, конечен, а интеграл с действительной частью расходится в нуле как $t^{-1/2}$. Поэтому необходимо провести его регуляризацию, явно обходя нулевую точку снизу по бесконечно малому контуру. В результате такого обхода расходимость в нуле сокращается. В обоих слагаемых при переходе к положительной полуоси возникает вопрос выбора регулярной ветви квадратного корня

из-за точки ветвления в нуле. Отметим, что наличие такой точки, обусловленное полужелой степенью t в знаменателе, — неотъемлемый признак нерелятивистских пороговых процессов [3], [8], [20]. Выбор нужной ветви определяется требованием действительности вклада, соответствующего вероятности рассматриваемого процесса.

После простых преобразований формулу для ширины уровня можно привести к виду

$$\frac{\Gamma}{4|W_0|^{1/2}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar}{\pi} \right)^{1/2} \int_0^\infty \frac{dt}{t^{3/2}} \left[\frac{\omega_H t}{2} \sin^{-1} \left(\frac{\omega_H t}{2} \right) \sin \left(\frac{S + W_0 t}{\hbar} - \frac{\pi}{4} \right) + \sin \frac{\pi}{4} \right]. \quad (13)$$

Очевидно, что левая часть выражения (13) представляет собой мнимую часть разложения (1) при $\Gamma \ll |W_0|$, $|\Delta W| \ll |W_0|$:

$$(-W)^{1/2} = (-W_0 - \Delta W + i\Gamma/2)^{1/2} \approx |W_0|^{1/2} - \frac{\Delta W}{2|W_0|^{1/2}} + i \frac{\Gamma}{4|W_0|^{1/2}},$$

а правая является мнимой частью выражения для комплексной энергии:

$$(-W)^{1/2} = \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar}{\pi} \right)^{1/2} \int_0^\infty \frac{dt}{t^{3/2}} \left[\frac{\omega_H t}{2 \sin(\omega_H t/2)} \exp \left(i \frac{S + W_0 t}{\hbar} - i \frac{\pi}{4} \right) - \exp \left(-i \frac{\pi}{4} \right) \right]. \quad (14)$$

При этом действительная часть выражения (14) определяет сдвиг уровня внешним полем. Используя тождественное преобразование, справедливое при любом действительном W_0 ,

$$\int_0^\infty \frac{dt}{t^{3/2}} \left[\exp \left(i \frac{tW_0}{\hbar} \right) - 1 \right] = -2 \left(\frac{\pi |W_0|}{\hbar} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{i\pi}{4} \text{sign}(W_0) \right], \quad (15)$$

из (14), (15) получим уравнение для комплексной квазиэнергии связанного уровня скалярной частицы в поле обобщенной конфигурации Редмонда:

$$(-W)^{1/2} - (-W_0)^{1/2} = \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar}{i\pi} \right)^{1/2} \int_0^\infty \frac{dt}{t^{3/2}} \exp \left(i \frac{W_0 t}{\hbar} \right) \times \\ \times \left\{ \frac{\omega_H t}{2} \sin^{-1} \left(\frac{\omega_H t}{2} \right) \exp \left(\frac{iS}{\hbar} \right) - 1 \right\}, \quad (16)$$

где функция S задается формулой (12).

Легко видеть, что полученное уравнение явно разрешено относительно W . Подчеркнем, что все интегралы в используемых промежуточных соотношениях, как и в итоговой формуле (16), конечны. При выводе было использовано условие относительной малости ширины и сдвига исходного уровня, что накладывает определенные ограничения на область применимости уравнения (16). Впрочем, подобные ограничения следуют уже из самого понятия квазистационарного уровня энергии [3]. Отметим, что математически более строгий вывод уравнения, подобного (16), для более частной конфигурации внешнего поля приведен в работе [20].

Вернемся теперь к выражениям (6), (7) для функции Грина и получим из них уравнение для комплексной квазиэнергии связанного уровня скалярной частицы во внешнем поле рассматриваемой конфигурации методом, обычно применяемым для класса короткодействующих потенциалов. Наиболее последовательно, на наш взгляд, этот метод описан в работе [16], которой мы и будем следовать далее.

Вначале перейдем к энергетическому представлению функции Грина связанной частицы

$$G_{\text{Sh}}(\vec{r}, \vec{0}; W) = \lim_{\delta \rightarrow +0} i \int_0^\infty dt G_{\text{Sh}}(\vec{r}, t; \vec{0}, 0) \exp[i(W + i\delta)t]. \quad (17)$$

Следующий шаг – выделение в выражении (17) расходимости при $r \rightarrow 0$. Для этой цели подынтегральная функция в правой части (17) представляется в виде

$$G_{\text{Sh}}(\vec{r}, t; \vec{0}, 0) = G_0(\vec{r}, t; \vec{0}, 0) + [G_{\text{Sh}}(\vec{r}, t; \vec{0}, 0) - G_0(\vec{r}, t; \vec{0}, 0)],$$

где

$$G_0(\vec{r}, t; \vec{0}, 0) = \left(\frac{m}{2\pi i t} \right)^{3/2} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \frac{m r^2}{2t} \right)$$

– функция Грина свободной скалярной частицы. Интеграл от нее в выражении (17) определяется формулой

$$\int_0^\infty \frac{dt}{t^{3/2}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(W t + \frac{m r^2}{2t} \right) \right] = \left(\frac{2\pi i \hbar}{m} \right)^{1/2} \frac{1}{r} \exp \left[-r \left(-\frac{2mW}{\hbar^2} \right)^{1/2} \right]. \quad (18)$$

Оставшийся интеграл при $r \rightarrow 0$ уже не содержит особенности. В результате асимптотика функции Грина во внешнем поле в окрестности нулевой точки приобретает вид

$$\begin{aligned} G(\vec{r}, \vec{0}; W) &\underset{r \rightarrow 0}{\approx} \frac{m \hbar^{1/2}}{2\pi r} - \frac{m^{3/2}}{(2\hbar)^{1/2} \pi} (-W)^{-1/2} + \\ &+ i^{-1/2} \left(\frac{m}{2\pi} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{dt}{t^{3/2}} \exp \left(i \frac{W t}{\hbar} \right) \left\{ \frac{\omega_H t}{2} \sin^{-1} \left(\frac{\omega_H t}{2} \right) \exp \left(\frac{iS}{\hbar} \right) - 1 \right\} + O(r). \end{aligned} \quad (19)$$

Описываемый метод получения уравнения для комплексной квазиэнергии основан на утверждении, что в точке сосредоточения δ -потенциала граничное условие для функции Грина при наличии внешних полей должно быть таким же, как и в их отсутствие:

$$G(\vec{r}, \vec{0}; W) \underset{r \rightarrow 0}{\approx} G_0(\vec{r}, \vec{0}; W_0) \underset{r \rightarrow 0}{\approx} \frac{m \hbar^{1/2}}{2\pi r} - \frac{m^{3/2}}{(2\hbar)^{1/2} \pi} (-W_0)^{-1/2} + O(r). \quad (20)$$

При этом подчеркивается, что такое граничное условие удовлетворяется *только при комплексных значениях энергии W* (см., например, [7], [13]). Именно сопоставление

асимптотических условий (19) и (20) дает трансцендентное уравнение для комплексной энергии:

$$(-W)^{1/2} - (-W_0)^{1/2} = \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar}{i\pi} \right)^{1/2} \int_0^\infty \frac{dt}{t^{3/2}} \exp \left(i \frac{Wt}{\hbar} \right) \times \\ \times \left\{ \frac{\omega_H t}{2} \sin^{-1} \left(\frac{\omega_H t}{2} \right) \exp \left(\frac{iS}{\hbar} \right) - 1 \right\}. \quad (21)$$

Следует подчеркнуть, что уравнение (21), полученное нами методом граничных условий в δ -потенциале [16], отличается от уравнения (16) только заменой $W_0 \rightarrow W$ в экспоненте правой части. Разумеется, из (21) следуют все известные уравнения для ряда частных конфигураций внешних полей, получаемых из обобщенной конфигурации Редмонда предельными переходами ([7], [13]–[17]).

4. РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ПАУЛИ И ФУНКЦИЯ ГРИНА СПИНОРНОЙ ЧАСТИЦЫ ВО ВНЕШНЕМ ПОЛЕ ОБОБЩЕННОЙ КОНФИГУРАЦИИ РЕДМОНДА

Хорошо известно, что в рассматриваемом нерелятивистском приближении для учета спиновых состояний частицы необходимо перейти к нестационарному уравнению Паули (см., например, [3], [28])

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_n(\vec{r}, t) = \hat{H}_P \Psi_n(\vec{r}, t), \quad (22)$$

где гамильтониан Паули включает энергию взаимодействия спина с внешним магнитным полем $\vec{H}^{\text{ext}}$:

$$\hat{H}_P = \hat{H}_{\text{Sh}} + \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\sigma} \vec{H}^{\text{ext}},$$

здесь $\hat{H}_{\text{Sh}}$ – ранее введенный гамильтониан Шредингера (3), а $\vec{\sigma}$ – матрицы Паули. Учитывая конкретный характер внешнего магнитного поля в обобщенной конфигурации Редмонда, задаваемый векторным потенциалом (2), гамильтониан Паули легко привести к следующему матричному виду:

$$\hat{H}_P = \begin{pmatrix} \hat{H}_{\text{Sh}} + \frac{\hbar\omega_H}{2} & -i\frac{\hbar\omega_\nu}{2} \exp(-i\omega t) \\ i\frac{\hbar\omega_\nu}{2} \exp(i\omega t) & \hat{H}_{\text{Sh}} - \frac{\hbar\omega_H}{2} \end{pmatrix}, \quad (23)$$

где $\omega_\nu = eE_0/(mc)$ – постоянная, имеющая размерность частоты.

Решение уравнения (22) представимо в форме

$$\Psi_n(\vec{r}, t) = \psi_n(\vec{r}, t) \begin{pmatrix} S_1(t) \\ S_2(t) \end{pmatrix}, \quad (24)$$

где $\psi_n(\vec{r}, t)$ – решение скалярного уравнения Шредингера (4), а спиновые функции S_1 и S_2 зависят только от времени. Условие нормировки волновой функции требует, чтобы $|S_1|^2 + |S_2|^2 = 1$. Как известно, возможность разделения решения уравнения Паули на координатную и спиновую части присуща нерелятивистскому приближению.

После подстановки (24) в уравнение (22) с учетом вида гамильтониана (23) для амплитуд вероятности ориентации спина частицы по оси $z(S_1)$ и против оси $z(S_2)$ получаем систему уравнений

$$\frac{dS_{1,2}(t)}{dt} = \mp \frac{i}{2} \omega_H S_{1,2}(t) \mp \frac{\omega_\nu}{2} S_{2,1}(t) \exp(\mp i\omega t), \quad (25)$$

причем верхние знаки соответствуют первым по порядку индексам. Явная зависимость от времени из уравнений (25) исключается заменой

$$S_{1,2}(t) = R_{1,2}(t) \exp\left(\mp \frac{i}{2} \omega t\right).$$

После этого уравнения для спиновых функций “расцепляются” и приводятся к виду

$$\frac{d^2 R_{1,2}}{dt^2} + \frac{\Omega^2}{4} R_{1,2} = 0, \quad (26)$$

где

$$\Omega = \sqrt{(\omega_H - \omega)^2 + \omega_\nu^2}.$$

В результате полное решение уравнения Паули (24) может быть представлено в форме

$$\Psi_n(\vec{r}, t) = \psi_n(\vec{r}, t) \begin{pmatrix} \exp(-\frac{i}{2}\omega t) [A \cos(\frac{\Omega t}{2}) + B \sin(\frac{\Omega t}{2})] \\ \exp(\frac{i}{2}\omega t) [C \cos(\frac{\Omega t}{2}) + D \sin(\frac{\Omega t}{2})] \end{pmatrix}, \quad (27)$$

причем комплексные коэффициенты спиновых функций в силу упоминавшегося уже требования нормировки удовлетворяют условиям

$$AA^* + CC^* = 1, \quad BB^* + DD^* = 1, \quad A^*B + AB^* + CD^* + C^*D = 0. \quad (28)$$

Отметим, что полученное решение описывает смешанное состояние для гамильтониана Паули (23), поскольку оператор проекции спина на ось z с ним не коммутирует [4], [28].

С помощью (27) нетрудно получить спиновую часть временной функции Грина. Ясно, что это – зависящая только от времени матрица 2×2 . Поскольку начальный момент времени выбран нулевым, имеем

$$S_j(t) = G_{jk}(t, 0) S_k(0), \quad (29)$$

где $j, k = 1, 2$ – спинорные индексы (по повторяющимся индексам подразумевается суммирование). Полагая в решении (27) вначале $A = 1, C = 0$, а затем $A = 0, C = 1$, что соответствует исходной (при $t = 0$) поляризации частицы вдоль или против направления магнитного поля, с помощью формул (25), (28), (29) получаем явные выражения для составляющих спиновой части пропагатора частицы (см. также [29], [30]):

$$\begin{aligned} G_{11}(t, 0) &= G_{22}^*(t, 0) = \exp\left(-\frac{it}{2}\omega\right) \left[\cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) - \frac{i}{\Omega} (\omega_H - \omega) \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \right], \\ G_{12}(t, 0) &= -G_{21}^*(t, 0) = -\frac{\omega_\nu}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \exp\left(-\frac{it}{2}\omega\right). \end{aligned} \quad (30)$$

Здесь G_{11} характеризует амплитуду вероятности распада связанного состояния с сохранением ориентации спина частицы вдоль магнитного поля, G_{21} – амплитуду распада с переворотом спина из положения вдоль поля к положению против поля и т.д. Полное выражение для функции Грина спинорной частицы хотя и достаточно громоздко, но, как видно из формул (6), (7) и (30), также представимо в элементарных функциях. Легко видеть, что уравнение для комплексной квазиэнергии спинорной частицы следует из построенной функции Грина.

5. ОБЛАСТИ ПРИМЕНИМОСТИ ПОЛУЧЕННЫХ УРАВНЕНИЙ

Итак, имеется два подхода для описания квазистационарных систем, связанных короткодействующими силами, которые приводят к несколько различным уравнениям. Для простоты проведем их сравнительный анализ, ограничившись случаем скалярных частиц. Уравнения вида (21) в случае электромагнитных полей, образующих более простые конфигурации, хорошо известны в литературе. Как правило, подобные уравнения решаются с помощью итерационной процедуры, причем на первом шаге используется замена $W \rightarrow W_0$, что приводит уравнение (21) к виду (16). Поэтому уравнение (16) воспринимается обычно как *приближенное*. В связи с этим выбор одного из предложенных выше альтернативных подходов практически сводится к вопросу о том, нужны ли итерационные поправки более высоких порядков или достаточно остановиться на “первой итерации”.

Очевидно, что уравнение для комплексной энергии (21) является трансцендентным и потому сложнее для решения, чем (16). Более сложное уравнение представляет интерес, только если оно дает более точные или принципиально новые результаты. Поэтому важно обсудить обоснованность приближений, использованных в ходе вывода указанных соотношений. При выводе уравнения (16) мы использовали условия $\Gamma \ll |W_0|$, $|\Delta W| \ll |W_0|$, что накладывает ограничения сверху на величины внешних полей. Впрочем, наличие таких ограничений следует как из самого нерелятивистского характера решаемой задачи, так и из предположения о наличии “мелкого связанного уровня” в глубокой и узкой потенциальной яме [2]. Более того, как уже отмечалось, само понятие квазистационарного уровня предполагает малость вероятности его распада [3].

Вместе с тем оценить возможные ограничения на величины внешних полей, допускаемые при выводе (21), *вообще не представляется возможным*, поскольку все промежуточные интегралы в выражениях (17)–(20) и итоговый интеграл в уравнении (21) расходятся при $\text{Im } W < 0$. В то же время граничное условие (20) выполняется только для комплексного значения W . Заметим, что введение в формулы типа (17) *бесконечно малой* зоммерфельдовой добавки $+i\delta$ не имеет смысла, поскольку W уже содержит *конечную* отрицательную мнимую добавку $-i\Gamma/2$. Как отмечалось в работе [31], в описанной ситуации можно использовать метод Боголюбова, предназначенный для регуляризации экспоненциально расходящихся интегралов и связанный с введением понятия “элементарной длины” [32].

Наконец, на наш взгляд, вызывает сомнение и ключевое условие (20), на котором базируется вся процедура дальнейшего вывода. Оно фактически требует, чтобы не только

сингулярная, но и конечная часть асимптотического разложения функции Грина в нуле в формулах (19), (20) не зависела от внешних полей. Аргументы физического характера в пользу этого утверждения, насколько нам известно, в литературе не приводились. Но, как видно из выражения (19), *конечная часть* асимптотики функции Грина содержит *расходящийся интеграл*, если W имеет мнимую часть требуемого знака. В этих условиях требование равенства конечных членов – явное превышение точности приближения.

Не следует думать, что указанные выше трудности получения выражения (21) характерны только для варианта вывода, приведенного в работе [16]. Те же вопросы относятся, например, и к соответствующим формулам статьи [13]. Любопытно отметить, что подобных проблем нет в работах [6] и [15], но только по той причине, что их авторы определяют комплексную энергию, в отличие от (1), с положительной мнимой частью. Это снимает проблему расходимостей в формулах типа (17)–(21), но противоречит классическому определению комплексной энергии. В соответствии с таким определением все вероятности в квазистационарном состоянии со временем должны экспоненциально расти [3].

Остановимся теперь на некоторых вариантах решения полученных уравнений. В работе [17] утверждается, что исключение расходимостей интегралов типа (21) заменой $W \rightarrow W_0$ некорректно в случае сильных полей. Обсудим в этой связи более подробно простую конфигурацию постоянного электрического внешнего поля с точки зрения обоснованности и применимости уравнений (16) и (21). Чтобы упростить сопоставление результатов, перейдем к обозначениям работы [18]: энергию ε будем измерять в единицах $|W_0|$, а напряженность внешнего электростатического поля F – в характерных атомных единицах:

$$\varepsilon = \frac{W}{|W_0|}, \quad F = \frac{eE\hbar}{(2m|W_0|^3)^{1/2}}.$$

В электростатическом внешнем поле уравнение (16) сводится к виду [25]

$$(-\varepsilon)^{1/2} - 1 = (-\varepsilon_0)^{1/2} + \frac{F^{1/3}}{\pi} [Ai'(Bi' + i Ai') + \varepsilon_0 F^{-2/3} Ai(Bi + i Ai)], \quad (31)$$

причем общим аргументом функций Эйри Ai , Bi и их производных Ai' , Bi' является $-\varepsilon_0 F^{-2/3}$, а $\varepsilon_0 = -1$. Если правую часть (31) аналитически продолжить в комплексную плоскость по аргументу функций Эйри, заменяя ε_0 на комплексное значение ε , получим уравнение

$$1 + \frac{1}{\pi} F^{1/3} [Ai'(Bi' + i Ai') + \varepsilon F^{-2/3} Ai(Bi + i Ai)] = 0. \quad (32)$$

Согласно выводам авторов работы [17], во внешнем поле трансцендентное уравнение⁴⁾ (32) может быть получено традиционным путем рассмотрения граничного условия для δ -потенциала. Однако еще раз отметим, что посредством тождественных преобразований переход от уравнения (21) к (32) невозможен. Это неудивительно, ибо функции

⁴⁾Здесь нормировка функций Эйри соответствует (31).

Эйри в левой части уравнения (32) конечны, в то время как интеграл в правой части (21) при значениях $\text{Im } W < 0$ расходится. Легко видеть, на каком этапе преобразований может “исчезнуть бесконечность”. Например, переход от общего выражения (16) к формуле (31) можно осуществить с помощью преобразования (15), содержащего действительную W_0 . Однако при аналитическом продолжении соотношения (15) в нижнюю полуплоскость комплексной переменной W интеграл в его левой части расходится, а правая часть остается конечной. Здесь и проявляется “превышение точности приближения”, о котором шла речь выше. Заметим, что ситуация с преобразованием (18), использованным в статье [16], полностью аналогична.

В слабом поле $F \ll 1$ как (31), так и (32) воспроизводят хорошо известное асимптотическое выражение [6]

$$-\varepsilon = 1 + \frac{F^2}{16} + \frac{i}{4}F \exp\left(-\frac{4}{3F}\right),$$

если ограничиться первыми не исчезающими членами разложения функций Эйри. В сильном поле $F = 1$ (т.е. сравнимом с внутриатомным) из (31) легко получить

$$-\varepsilon \approx 1.0411 + 0.0451 i,$$

а численное решение (32) дает [18]

$$-\varepsilon \approx 1.0442 + 0.0388 i,$$

что свидетельствует о незначительном отличии конечных результатов двух альтернативных подходов.

Наконец, существует критическое значение электрического поля F_k , при котором полностью исчезает энергетическая щель между “сдвинутым” и “уширенным” уровнем и сплошным спектром, т.е. когда $\text{Re}(-\varepsilon) = \text{Im}(-\varepsilon)$. Ясно, что для более интенсивных электрических полей понятие квазистационарного уровня вообще теряет смысл, и его необходимо доопределять. Согласно формуле (31), это значение составляет $F_k \approx 13.26$. Из трансцендентного уравнения (32) то же значение равно $F_k \approx 11.38$.

В заключение укажем, что нетрудно заметить глубокую аналогию между определением комплексной энергии в теории распада квазистационарных систем и *комплексной диэлектрической проницаемостью* в физике полупроводников (см., например, [22], [23], [33], [34]). Подчеркнем, что при выводе уравнений для комплексной диэлектрической проницаемости, как правило, используются хорошо развитые дисперсионные методы (см., например, [23], [33]–[35]), в основе которых лежат дисперсионные соотношения, применяемые нами при выводе формул (16) и (31).

Благодарности. Работа выполнена при участии Программы поддержки ведущих научных школ (грант НШ-2027.2003.2), а также при поддержке РФФИ (грант № 05-02-16535).

Список литературы

- [1] Ю. Н. Демков, В. Н. Островский. Метод потенциала нулевого радиуса в атомной физике. Л.: ЛГУ, 1975.
- [2] А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука, 1971.
- [3] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1974.
- [4] И. М. Тернов, В. Р. Халилов, В. Н. Родионов. Взаимодействие заряженных частиц с сильным электромагнитным полем. М.: МГУ, 1982.
- [5] Н. Б. Делонэ, В. П. Крайнов. Атом в сильном световом поле. М.: Атомиздат, 1978.
- [6] Ю. Н. Демков, Г. Ф. Друкарев. ЖЭТФ. 1964. Т. 47. С. 918.
- [7] Ю. Н. Демков, Г. Ф. Друкарев. ЖЭТФ. 1965. Т. 49. С. 257.
- [8] В. Н. Родионов. ЖЭТФ. 1998. Т. 113. С. 21.
- [9] В. Н. Родионов. ЖЭТФ. 1997. Т. 111. С. 3.
- [10] А. И. Никишов, В. И. Ритус. Тр. ФИАН. 1986. Т. 168. С. 232.
- [11] В. Н. Родионов, Г. А. Кравцова, А. М. Мандель. Письма в ЖЭТФ. 2002. Т. 75. С. 435.
- [12] В. Н. Родионов, Г. А. Кравцова, А. М. Мандель. Докл. РАН. 2002. Т. 386. С. 753.
- [13] Н. Л. Манаков, Л. П. Рапопорт. ЖЭТФ. 1975. Т. 69. С. 842.
- [14] I. J. Verson. J. Phys. B. 1975. V. 8. P. 3078.
- [15] Г. Ф. Друкарев, Б. С. Монозон. ЖЭТФ. 1971. Т. 61. С. 956.
- [16] В. С. Попов, Б. М. Карнаков, В. Д. Мур. ЖЭТФ. 1998. Т. 113. С. 1579.
- [17] Н. П. Манаков, М. В. Фролов, Б. Борка, А. Ф. Старасе. Письма в ЖЭТФ. 2000. Т. 52. С. 426.
- [18] N. L. Manakov, M. V. Frolov, A. F. Starace, I. I. Fabrikant. J. Phys. B. 2000. V. 33. P. R141.
- [19] P. J. Redmond. J. Math. Phys. 1965. V. 6. P. 1163.
- [20] В. Г. Кадышевский, В. Н. Родионов. ТМФ. 2000. Т. 125. С. 432.
- [21] Н. П. Клепиков. ЖЭТФ. 1954. Т. 26. С. 19.
- [22] А. Е. Шабад. Тр. ФИАН. 1988. Т. 192. С. 5.
- [23] А. И. Ансельм. Введение в теорию полупроводников. М.: Наука, 1978.
- [24] Л. И. Магарилл, С. К. Саввиных. ЖЭТФ. 1971. Т. 60. С. 175.
- [25] В. Н. Родионов, Г. А. Кравцова, А. М. Мандель. Вестн. МГУ. Сер. 3. Физика. Астрономия. 2002. № 5. С. 6.
- [26] Л. П. Рапопорт, Б. А. Зон, Н. П. Манаков. Теория многофотонных процессов в атомах. М.: Атомиздат, 1978.
- [27] Е. Х. Ахмедов. ЖЭТФ. 1983. Т. 85. С. 1521.
- [28] И. М. Тернов. Введение в физику спина релятивистских частиц. М.: МГУ, 1997.
- [29] Л. С. Левитов, А. В. Шитов. Функции Грина. Задачи и решения. М.: Физматлит, 2003.
- [30] Г. Липкин. Квантовая механика. М.: Мир, 1977.
- [31] В. Г. Кадышевский, Г. А. Кравцова, А. М. Мандель, В. Н. Родионов. ТМФ. 2003. Т. 134. № 2. С. 227.
- [32] Н. Н. Боголюбов, Б. В. Медведев, М. К. Поливанов. Вопросы теории дисперсионных соотношений. М.: Физматлит, 1958.
- [33] А. Б. Мигдал. Качественные методы в квантовой теории. М.: Наука, 1975.
- [34] В. М. Агранович, В. Л. Гинзбург. Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов. М.: Наука, 1979.
- [35] Х. М. Нуссинцевейг. Причинность и дисперсионные соотношения. М.: Мир, 1976.

Поступила в редакцию 11.II.2005 г.