

# О методе регуляризации Зельдовича в теории квазистационарных состояний

В. Д. Мур, С. Г. Поздняков, В. С. Попов<sup>+</sup>, С. В. Попруженко

Московский государственный инженерно-физический институт, 115409 Москва, Россия

<sup>+</sup> Институт теоретической и экспериментальной физики, 117218 Москва, Россия

Поступила в редакцию 7 февраля 2002 г.

Вычислена комплексная квазиэнергия, в том числе ширина уровня, слабосвязанного атомного состояния в интенсивном монохроматическом лазерном поле с циркулярной поляризацией. В расчётах использован предложенный Зельдовичем метод регуляризации расходящихся интегралов с гамовской волновой функцией. Продемонстрирована сходимость этого метода и указаны условия его применимости. На основе полученных результатов обсуждается вопрос о точности квазиклассического приближения в задачах теории ионизации.

PACS: 03.65.Sq, 32.80.Rm

В теории элементарных частиц, атомной и ядерной физике часто встречаются квазистационарные состояния, гамовская волновая функция которых экспоненциально растет на бесконечности:  $|\chi_k(r)| \sim \exp(k_2 r)$ , где импульс  $k = \sqrt{2E} = k_1 - ik_2$  и  $k_2 > 0$ . Вследствие этого при использовании аппарата квантовой механики возникают очевидные трудности, так как даже нормировочный интеграл  $\int_0^\infty |\chi_k(r)|^2 dr$  оказывается расходящимся. Способ преодоления этой трудности был указан Зельдовичем [1]: нормировочный интеграл следует понимать в регуляризованном смысле как предел:

$$N = \lim_{\alpha \rightarrow +0} \int_0^\infty \chi_k^2(r) \exp(-\alpha r^2) dr, \quad (1)$$

что позволяет, в частности, построить теорию возмущений для квазистационарных состояний [1, 2].

Однако, насколько нам известно, метод регуляризации Зельдовича до сих пор не применялся к конкретным физическим задачам квантовой механики. Здесь мы обсудим вопрос о его применимости на примере задачи о распаде атомного уровня, связанного короткодействующими силами, в поле электромагнитной волны с циркулярной поляризацией<sup>1)</sup> и укажем условия его применимости.

Переход в систему отсчета, вращающуюся вместе с полем [5], приводит к стационарному уравнению Шредингера с гамильтонианом

$$H_\omega = -\frac{1}{2}\Delta + U(r) - \omega L_z + \mathcal{E}x, \quad (2)$$

где  $\hbar = m = e = 1$ ,  $\omega$  и  $\mathcal{E}$  – частота и амплитуда электрического поля, а  $L_z$  – проекция орбитального момента электрона на направление распространения волны. Спектр комплексных квазиэнергетических уровней совпадает со спектром квазистационарных уровней гамильтониана  $H_\omega$ .

Ограничиваясь  $s$ -состояниями, будем, как и в работах [6, 7], использовать для  $U(r)$  приближение нулевого радиуса действия ( $\delta$ -потенциал), что в трехмерном случае эквивалентно граничному условию [2]

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{d}{dr}(r\psi)/(r\psi) = -\kappa_0, \quad (3)$$

где  $E_0 = -\kappa_0^2/2$  – энергия уровня в отсутствие волны. С учетом явного аналитического выражения для функции Грина задачи (2), удовлетворяющей на бесконечности условию излучения Зоммерфельда, возникает замкнутое уравнение для квазиэнергии  $E = E_r - i\Gamma/2$  квазистационарного состояния (полученное в работах Берсона [6] и Манакова и Рапопорта [7]), которое можно записать в виде<sup>2)</sup>

$$I(\epsilon; \gamma, K_0) = \sqrt{\epsilon} - 1, \quad (4)$$

<sup>1)</sup> Эта задача представляет и самостоятельный интерес для теории многофотонной ионизации отрицательных ионов типа  $H^-$ ,  $Li^-$ ,  $Na^-$  и т.д. Многочисленные результаты, достигнутые в этой области, обсуждаются в монографии [3] и обзоре [4].

<sup>2)</sup> См. также [3, 4]. Обобщение уравнения (4) на случай состояний с отличным от нуля орбитальным моментом  $l$  с учетом эффективного радиуса взаимодействия (что существенно при  $l \geq 1$ , поскольку при  $l \neq 0$  приближения сил нулевого радиуса не существует) получено в работе [8].

$$I = \frac{1}{(2\pi i K_0)^{1/2}} \int_0^\infty \frac{du}{u^{3/2}} \left\{ \exp\left(i \frac{2K_0 \sin^2 u}{\gamma^2} \frac{1}{u}\right) - 1 \right\} \times \exp(-2i K_0 \epsilon u). \quad (4a)$$

Здесь введены обозначения:

$$\epsilon = \varepsilon + \gamma^{-2}, \quad \varepsilon = E/E_0 = 1 + \delta + i\kappa_0^{-2}\Gamma, \quad (5)$$

$$\delta = (E_r - E_0)/E_0,$$

$$\gamma = \omega\kappa_0/\mathcal{E} = 1/2K_0F, \quad K_0 = |E_0|/\omega, \quad F = \mathcal{E}/\kappa_0^3, \quad (5a)$$

$\varepsilon$  и  $F$  – приведенные квазиэнергия и электрическое поле,  $\gamma$  – параметр адиабатичности Келдыша [9] и  $K_0$  – параметр многоквантовости процесса. Учитывая, что в модели  $\delta$ -потенциала выполняются соотношения скейлинга:  $\Gamma \propto \kappa_0^2$  и  $\mathcal{E} \propto \kappa_0^3$ , далее, без потери общности, мы полагаем  $\kappa_0 = 1$ .

Поскольку для квазистационарного состояния  $\text{Im } \epsilon = \Gamma > 0$ , то интеграл (4a) экспоненциально расходится на верхнем пределе и требует регуляризации, что в данном случае сводится к аналитическому продолжению (4a) из нижней полуплоскости  $\epsilon$ , где интеграл хорошо определен. Для этой цели мы используем метод Зельдовича, то есть будем считать решением уравнения (4) предел при  $\alpha \rightarrow +0$  решений уравнения

$$I_\alpha(\epsilon; \gamma, K_0) = \sqrt{\epsilon} - 1, \quad (6)$$

где  $I_\alpha$  отличается от  $I$  лишь введением множителя  $\exp(-\alpha u^2)$  под знак интеграла. Для иллюстрации сходимости метода Зельдовича рассмотрим характерный пример. При  $\gamma = 3$  и  $K_0 = 1.5$  численное решение уравнения (6) дает:  $\delta = 3.89207(-3)$ ,  $\Gamma = 6.27485(-4)$ ;  $\delta = 3.89202(-3)$ ,  $\Gamma = 6.27398(-4)$ ;  $\delta = 3.892006(-3)$ ,  $\Gamma = 6.27370(-4)$  соответственно при  $\sqrt{\alpha} = 2.0(-3)$ ,  $\sqrt{\alpha} = 1.0(-3)$  и  $\sqrt{\alpha} = 2.5(-4)$ , а экстраполяция к  $\alpha = 0$  дает  $\delta = 3.892005(-3)$  и  $\Gamma = 6.27369(-4)$ ; здесь  $a(b) \equiv a \cdot 10^b$ . Для вычисления  $\Gamma$  с относительной точностью  $10^{-5}$  нужно, как правило, достичь значений  $\alpha \leq 10^{-4} \div 10^{-5}$ , причем сходимость метода для штарковского сдвига  $\delta$  на 1-2 порядка выше, чем для  $\Gamma$ .

Результаты расчета ширины  $\Gamma$  для нескольких значений параметра Келдыша показаны на рис.1. Видно, что в антиадиабатической области  $\gamma > 1$  проявляются своеобразные нерегулярности в поведении  $\Gamma$ , связанные с тем, что открывается или закрывается очередной канал  $n$ -фотонной ионизации. В то же время при  $\gamma \leq 1$  зависимость ширины уровня от частоты поля является монотонной. На рис.1 показаны также значения  $\Gamma_Q$ , рассчитанные в квазиклассическом приближении по формулам, полученным в

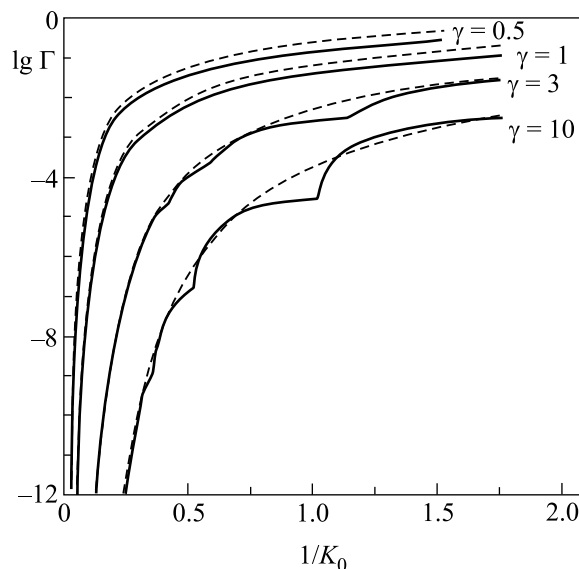


Рис.1. Ширина уровня  $\Gamma$  в зависимости от  $1/K_0 = 2\omega$ . Сплошными линиями показаны результаты численного расчета по ур.(6), штриховыми – квазиклассическое приближение  $\Gamma_Q$ . У кривых указаны значения параметра Келдыша  $\gamma$ , масштаб по оси ординат логарифмический

[10, 11]. Более детально о точности квазиклассического приближения можно судить по рис.2, на котором

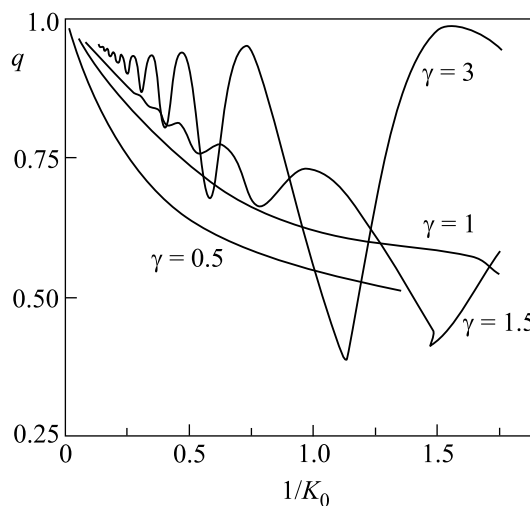


Рис.2. Точность квазиклассического приближения: отношение  $q = \Gamma/\Gamma_Q$  в зависимости от  $1/K_0$

показано отношение  $q(\gamma, K_0) = \Gamma/\Gamma_Q$ . При  $\gamma < 1$  оно монотонно убывает с уменьшением параметра многоквантовости  $K_0$ , а с ростом  $\gamma$  появляются осцилляции, обусловленные пороговыми эффектами. В пределе  $K_0 \rightarrow \infty$  квазиклассическое приближение становится точным при любых  $\gamma$ . Наконец, на рис.3 приведена зависимость ширины  $\Gamma$  от поля  $F$  для несколь-

ких значений  $\omega = 1/2K_0$ . В окрестности порогов  $n$ -фотонной ионизации ( $K_0 = n$  при  $\gamma \gg 1$ ) видны характерные разрывы функции  $\Gamma(F, \omega)$ . В этих областях значений параметров расчет ширины встречает вычислительные трудности: предел уравнения (6) здесь не существует. Таким образом, в довольно узких областях вблизи порога ионизации метод Зельдовича оказывается неприменимым.

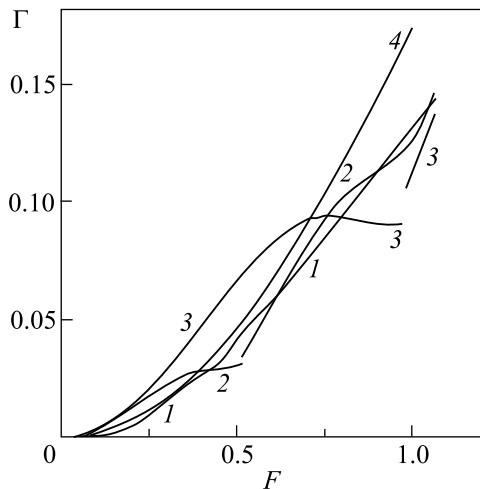


Рис.3. Зависимость ширины  $\Gamma$  от приведенного электрического поля  $F$ . Кривые 1, 2, 3 и 4 соответствуют значениям частоты  $\omega = 0.5, 0.75, 1.0$  и  $1.5$

Для выяснения причины этого рассмотрим интеграл

$$J(\varepsilon, s) = \int_0^{\infty} dt \cdot t^{s-1} \exp \left\{ -i\varepsilon t \right\} = \Gamma(s)(i\varepsilon)^{-s}, \quad (7)$$

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2,$$

сходящийся в нижней полуплоскости  $\varepsilon$ . Вводя регуляризацию по Зельдовичу, находим:

$$J_{\alpha}(\varepsilon, s) = \int_0^{\infty} dt \cdot t^{s-1} \exp \left\{ -i\varepsilon t - \alpha t^2 \right\} =$$

$$= \Gamma(s)(2\alpha)^{-s/2} \exp \left( -\varepsilon^2/8\alpha \right) \mathcal{D}_{-s} \left( i\varepsilon/2\alpha \right), \quad (8)$$

где  $\mathcal{D}_{-s}(z)$  – функция параболического цилиндра. Отсюда при  $\alpha \rightarrow 0$

$$J_{\alpha}(\varepsilon, s) = \Gamma(s)(i\varepsilon)^{-s} \left\{ 1 + O \left( \exp(-\varepsilon^2/8\alpha) \right) \right\}, \quad (9)$$

где поправка в фигурных скобках выписана с преэкспоненциальной точностью. Если  $\varepsilon_1^2 - \varepsilon_2^2 > 0$ , то

в пределе  $\alpha \rightarrow +0$  отсюда следует (7). Однако при  $\varepsilon_1^2 - \varepsilon_2^2 < 0$  второе слагаемое в (9) экспоненциально растет, и  $J_{\alpha}$  не имеет предела, что связано с явлением Стокса, известным в теории асимптотических разложений.

Таким образом, для квазистационарного состояния с импульсом  $k = k_1 - ik_2$  рецепт Зельдовича (1) применим, если

$$|k_1| > k_2, \quad (10)$$

то есть ширина уровня меньше, чем его расстояние до порога. Последнее условие, не отмеченное в [1, 2], обычно выполняется (и даже “с запасом”). Однако при рассмотрении динамического эффекта Штарка в сильном поле (и, в частности, при решении уравнения (6)) могут возникать такие случаи, когда неравенство (10) нарушается и метод Зельдовича не работает, что и проявляется в наличии разрывов у кривых на рис.3.

Возникает вопрос, не следует ли в (6) использовать регуляторы, еще быстрее спадающие на бесконечности, например  $\exp(-\alpha u^4)$ . Оказывается, что это не так. Численный анализ показывает, что в последнем случае сходимость при  $\alpha \rightarrow +0$  только ухудшается, а область применимости метода сужается:  $|k_2| < 0.41|k_1|$  вместо (10). Можно показать, что для регулятора вида  $R_{\lambda} = \exp(-\alpha u^{\lambda})$  сходимость имеет место в угле

$$k_2 < |k_1| \operatorname{tg} \frac{\pi}{2\lambda}, \quad \lambda > 1. \quad (11)$$

При  $\lambda \rightarrow \infty$ , то есть, например, для  $R_{\infty} = \exp(-\alpha e^u)$  регуляризация не работает уже при всяком  $k_2 > 0$ . В этом смысле предложенный Зельдовичем метод регуляризации является наиболее оптимальным.

Отметим, что аналогичная ситуация имеет место в теории расходящихся рядов [12]: существуют чрезвычайно мощные методы, позволяющие суммировать отдельные быстро расходящиеся ряды, однако они “отказываются” применительно к столь слабо расходящемуся ряду, как  $1 - 1 + 1 - 1 + \dots = 1/2$ .

В заключение отметим, что ранее выполненные расчеты [7, 3] зависимости ширины  $\Gamma$  от параметров  $\gamma$  и  $\omega$  в модели  $\delta$ -потенциала находятся в резком противоречии с рис.1 и, по нашему мнению, неверны (что уже отмечалось в работе [8]). Недавно был предложен [13] способ регуляризации уравнения (4), существенно отличный от метода Зельдовича<sup>3)</sup>. Полученные с его помощью значения  $\Gamma$  согласуются с

<sup>3)</sup> В работах [13, 14] этим методом рассматривался процесс стабилизации в сильном поле и вычислена скорость ионизации отрицательного иона водорода лазерным излучением.

результатами наших вычислений (сравни кривую 2 на рис.3 с соответствующей кривой на рис.1 из работы [14]). Однако метод регуляризации Зельдовича является значительно более универсальным и, на наш взгляд, найдет дальнейшие применения в теории квазистационарных состояний.

Авторы благодарны С. П. Гореславскому, Б. М. Карнакову, Л. Б. Окуню и В. И. Ритусу за полезные обсуждения и ряд замечаний.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты # 00-02-16354, # 00-02-17078 и # 01-02-16850).

1. Я. Б. Зельдович, *ЖЭТФ* **39**, 776 (1961).
2. А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике*, М.: Наука, 1971, гл. 7.
3. Л. П. Рапопорт, Б. А. Зон, Н. Л. Манаков, *Теория многофотонных процессов в атомах*, М.: Атомиздат, 1978.
4. N. L. Manakov, M. L. Frolov, A. F. Starace, and I. I. Fabricant, *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys.* **33**, R141 (2000).
5. Ф. В. Бункин, А. М. Прохоров, *ЖЭТФ* **46**, 1090 (1964).
6. I. J. Verson, *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **8**, 3078 (1975).
7. Н. Л. Манаков, Л. П. Рапопорт, *ЖЭТФ* **69**, 842 (1975).
8. С. П. Андреев, Б. М. Карнаков, В. Д. Мур, В. А. Полушин, *ЖЭТФ* **86**, 866 (1984).
9. Л. В. Келдыш, *ЖЭТФ* **47**, 1945 (1964).
10. А. И. Никишов, В. И. Ритус, *ЖЭТФ* **50**, 255 (1966).
11. А. М. Переломов, В. С. Попов, М. В. Терентьев, *ЖЭТФ* **51**, 309 (1966).
12. G. H. Hardy, *Divergent Series*, Oxford Univ. Press, Oxford, 1967 [перевод: Г. Харди, *Расходящиеся ряды*, М.: ИЛ, 1951].
13. Н. Л. Манаков, М. В. Фролов, Б. Борка, А. Ф. Старасе, *Письма в ЖЭТФ* **72**, 426 (2000).
14. M. V. Frolov, N. L. Manakov, B. Borca, and A. F. Starace, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **34**, L579 (2001).