Письма в ЖЭТФ, том 57, вып.7, стр.406 - 409

ПРАВИЛА КВАНТОВАНИЯ ДЛЯ НАДБАРЬЕРНЫХ РЕЗОНАНСОВ

*В.Д.Мур, В.С.Попов**

Московский инженерно-физический институт
115409 Москва, Россия
**Институт теоретической и экспериментальной физики РАН*
117259 Москва, Россия

Поступила в редакцию 12 марта 1993 г.

Получено аналитическое продолжение условия квантования Бора–Зоммерфельда в надбарьерную область, с помощью которого найдена асимптотика энергии резонансов в режиме сильной связи.

1. Квазиклассическое приближение, или метод ВКБ, – один из самых эффективных приближенных методов квантовой механики. Обычно он используется в случае дискретного спектра (см., например, [1–3]). Мы сформулируем обобщение правила квантования Бора–Зоммерфельда для квазистационарных состояний (резонансов) с комплексной энергией $E = E_r - i\Gamma/2$, что значительно упрощает вычисление E_r и Γ, особенно в предельном случае сильных внешних полей.

2. Рассмотрим гладкий (аналитический) потенциал $U(x)$, удовлетворяющий условиям квазиклассичности, и введем обозначения: $x_0 < x < x_1$ – классически разрешенная область, в которой совершается финитное движение частицы, $x_1 < x < x_2$ – подбарьерная область, x_m – вершина барьера, $U_m = U(x_m)$; при $x > x_2$ частица уходит на бесконечность. Когда энергия $E_r \to U_m$, точки поворота x_1 и x_2 сближаются; имеется (узкая) область энергий, в которой квазиклассическое приближение неприменимо. Однако при дальнейшем возрастании E_r, то есть в надбарьерной области, эти точки расходятся в комплексную плоскость, и квазиклассика снова начинает работать. Можно показать, что аналитическое продолжение условия квантования Бора–Зоммерфельда имеет вид

$$\frac{1}{2\pi}\oint\limits_C \left\{p + \frac{1}{24}\frac{U''}{p^3} + O(\hbar^4)\right\} dx = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar, \qquad (1)$$

где $n = 0, 1, 2, \ldots$, $p(x, E) = [2m(E - U(x))]^{1/2}$, контур интегрирования C охватывает точки поворота x_0 и x_2 (комплексные при $E_r > U_m$) и учтены поправки порядка $\hbar^2$ к обычной квазиклассике [2,3]. В случае дискретного спектра контур C охватывает точки поворота x_0 и x_1, которые лежат на вещественной оси [1–3]. Таким образом, при переходе из подбарьерной области ($E < U_m$) в надбарьерную ($E > U_m$) происходит перезацепление контура интегрирования.

Уравнение (1) значительно проще в вычислительном отношении, чем другие (численные) методы определения E_r и Γ. В последние годы эти вопросы приобрели особую актуальность, в частности, в связи с экспериментальными наблюдениями сложной резонансной структуры сечений фотоионизации атомов в присутствии внешних полей. Оставляя эти вопросы для дальнейшего, ограничимся здесь модельным примером (2), допускающим сравнение уравнения (1) с точным решением, а также проиллюстрируем (на примере эффекта

Штарка) возможность использования его для нахождения асимптотики энергий резонансов в режиме сильной связи.

3. Рассмотрим одномерный ангармонический осциллятор:

$$H = \frac{1}{2}(p^2 + x^2) - gx^N, \qquad N = 3, 5, 7... \tag{2}$$

Применяя (1), можно показать, что при $g \to \infty$

$$E_n(g) \approx C_N e^{-i\pi/(N+2)} \left[\left(n + \frac{1}{2}\right)^N g\right]^{2/(N+2)} \sum_{k=0}^{\infty} d_k \lambda^{-k\alpha}, \tag{3}$$

где $\alpha = 4/(N+2)$,

$$C_N = \left\{\left(\frac{\pi}{8}\right)^{1/2} (N+2)\Gamma\left(\frac{N+2}{2N}\right) / \Gamma\left(\frac{1}{N}\right) \cos\frac{\pi}{2N}\right\}^{2N/(N+2)}, \tag{4}$$

$$d_k = d_k^{(0)} + d_k^{(2)}(n+1/2)^{-2} + d_k^{(4)}(n+1/2)^{-4} + ... \tag{5}$$

и $\lambda = (n+1/2)^{(N-2)/2} g$ – эффективная константа связи для высоковозбужденных уровней. При этом $d_0^{(0)} = 1$, а остальные коэффициенты выражаются через контурные интегралы

$$J_k = \oint x^{2k}(1 - x^N)^{1/2-k} dx$$

и могут быть вычислены аналитически.

Потенциал (2) с $N = 3$ (кубический осциллятор) рассмотрен в работе Альвареца [4], где получены численные значения $E_n(g)$ при $n = 0, 1$ и $g \leq 100$ с очень высокой точностью [1)]. В этом случае несколько первых коэффициентов в разложениях (3), (5) имеют следующие значения:

$$C_3 = 1,6586, \qquad d_1^{(0)} = 0, \qquad d_2^{(0)} = -0,0366 \exp(-i\pi/5),$$
$$d_0^{(2)} = 3^{1/2}/50\pi = 0,0110, \qquad d_1^{(2)} = 0, ... \tag{6}$$

Коэффициенты $d_k^{(j)}$ убывают с ростом j и k, поэтому в (3) можно ограничиться всего тремя членами.

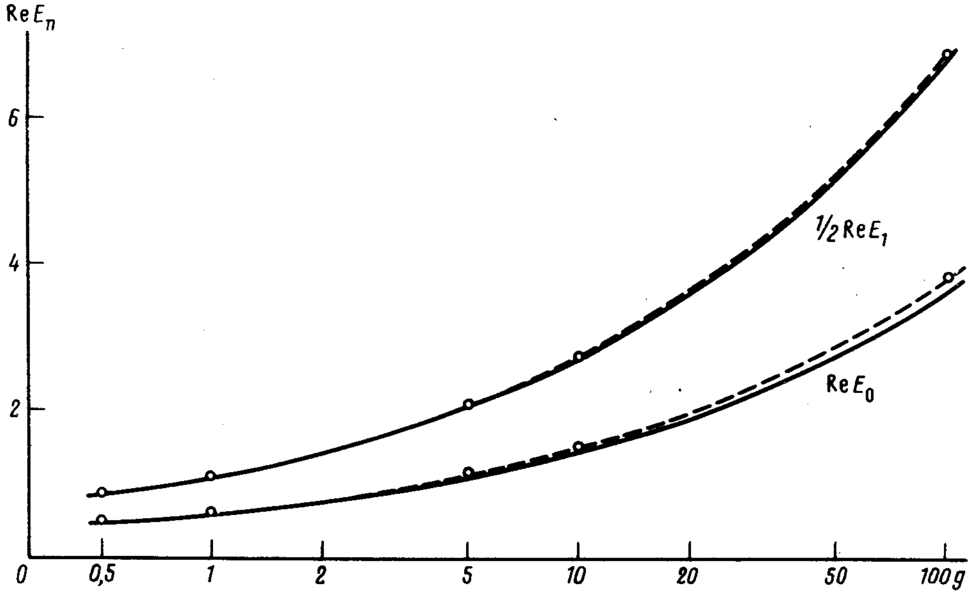
Сравнение результатов [4] с асимптотикой (3) показано на рисунке, из которого видно, что область применимости квазиклассической асимптотики "затягивается" до значений $g \sim 1$ (даже в случае основного уровня, $n = 0$). Особенно высокая точность достигается (см. табл. 1) для отношения

$$\xi = -\mathrm{Im}E_n(g)/\mathrm{Re}E_n(g). \tag{7}$$

В случае эффекта Штарка в атоме водорода квазиклассические условия квантования в подбарьерной области рассмотрены в [5]. Аналитическое продолжение их в надбарьерную область энергий, выполненное в соответствии с (1), приводит к следующей системе уравнений (для состояний типа $(n_1, n_2, 0)$) :

$$(\beta_1/z_1)^{3/4} G(-z_1) = -2\nu_1 F^{1/4},$$

[1)] При этом использовался метод "комплексных вращений".



Положение резонансов с $n = 0$ (основной уровень) и $n = 1$ для кубического ангармонического осциллятора. Сплошная кривая – главный член асимптотики, пунктир – два члена ряда (3), точками обозначены результаты численного счета [4]. Масштаб по оси абсцисс – логарифмический

$$(\beta_2/z_2)^{3/4}[G(z_2) - i \cdot 2^{1/2}G(1 - z_2)] = 2\nu_2 F^{1/4}, \qquad (8)$$

где $z_i = 16\beta_i F/\epsilon^2, \nu_i = (n_i + 1/2)/n$, β_i – константы разделения, $\beta_1 + \beta_2 = 1$, $G(z) = z\,{}_2F_1(1/4, 3/4; 2; z)$, а ϵ и F – приведенные переменные: $\epsilon = 2n^2(E_r - i\Gamma/2)$, $F = n^4\mathcal{E}$ (как и в [5,6], используются атомные единицы). В (8) мы пренебрегли поправками порядка $\hbar^2$, учет которых не является проблемой [6].

Таблица 1

g	$n = 0$	$n = 1$
100	0,726541 0,726534	0,726542 0,726539
10	0,72646 0,72620	0,72650 0,72639
5	0,72630 0,7255	0,72643 0,7261
1	0,72323 0,7128	0,72502 0,7206
0,5	0,71613 0,684	0,72182 0,714

Примечание: Приведены значения ξ, см (7), для первых двух уровней кубического осциллятора. Первая строка (при данных n и g) – численный расчет [4], вторая – асимптотика (3).

Анализ уравнений (8) показывает, что $\epsilon \propto F^{2/3}$, $\beta_i \propto F^{1/3}$ при $F \to \infty$. Рассмотрим два предельных случая: а) наиболее долгоживущие состояния $(n-1,0,0)$; б) короткоживущие состояния $(0,n-1,0)$. Асимптотическое разложение приведенной энергии ϵ имеет здесь более сложный вид, чем (3), и содержит, наряду со степенными поправками $\propto F^{-k/3}$, также и логарифмы [2)]:

$$\epsilon = (3\pi f)^{2/3}[1 - k_1 f^{-1/3}\ln f - k_2 f^{-1/3} + ...]. \tag{9}$$

Здесь $k_1 = 2/3(3\pi)^{-4/3} = 0,0335$, $k_2 = 0,5402$, $f = F$ в случае а) и $f = F\exp(-i\pi)$ для б). Отметим, что старший член асимптотики $\epsilon \propto F^{2/3}$ не зависит от вида потенциала, связывающего частицу на малых расстояниях, и определяется только однородным полем $\mathcal{E}$.

Решая систему (8), находим положение E_r и ширину Γ штарковских резонансов в сильном электрическом поле $\mathcal{E}$. Сравнение вычисленных значений E_r с экспериментальным положением пиков в сечении фотоионизации атомов водорода (при $\mathcal{E} = 16,8$ кВ/см [7]) дано в табл.2. Из нее видно, что квазиклассика согласуется с экспериментом в пределах точности последнего ($1 \div 2\,\text{см}^{-1}$ [7]). Имеется качественное согласие и для ширин резонансов, однако этот вопрос (так же, как сравнение асимптотики (9) с численными расчетами) требует обсуждения некоторых деталей, и мы отложим его до более подробной публикации.

Таблица 2

n_1, n_2, m	$-E_r$, см$^{-1}$		F	F_*
	теория	эксперимент [7]		
16,1,0	106,9	103,8	0,343	0,2895
15,1,0	167,8	167,9	0,273	0,2626
15,0,0	196,5	198,5	0,214	0,3077
14,2,0	212,1	210,1	0,273	0,2362
13,2,0	273,6	275,8	0,214	0,2329
12,3,0	313,3	314,8	–"–	0,2143
11,4,0	353,8	351,4	–"–	0,2001
10,4,0	418,7	419,2	0,165	0,1965

Примечание: n_1, n_2, m – параболические квантовые числа штарковского резонанса, $F = n^4\mathcal{E}$ – приведенное электрическое поле, F_* – классический порог ионизации [5,6] (случаи $F > F_*$ отвечают надбарьерным, а $F < F_*$ – подбарьерным резонансам).

Авторы благодарны Н.Б.Делоне, Б.М.Карнакову, В.П.Крайнову и А.В.Сергееву за обсуждение работы и полезные замечания.

1. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, Квантовая механика. М.: Наука, 1974.
2. C.M.Bender, K.Olaussen, and P.S.Wang, Phys. Rev. D **16**, 1740 (1977).
3. R.N.Kesarwani and Y.P.Varshni, J. Math. Phys. **21**, 90 (1980).
4. G.Alvarez, Phys. Rev. A **37**, 4079 (1988).
5. В.М.Вайнберг, В.Д.Мур, В.С.Попов и др., Письма в ЖЭТФ **46**, 178 (1987); ЖЭТФ **93**, 450 (1987).
6. V.S.Popov, V.D.Mur, A.V.Sergeev, et al., Phys. Lett. A **149**, 418, 425 (1990).
7. K.Ng, D.Yao, and M.N.Nayfeh, Phys. Rev. A **35**, 2508 (1987).

[2)]Как можно показать, это связано с кулоновской особенностью потенциала на малых расстояниях.