Письма в ЖЭТФ, том 60, вып.1, стр.64 - 67 ©1994 г. 10 июля

ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ ДЛЯ КВАЗИСТАЦИОНАРНЫХ УРОВНЕЙ

В.С.Попов, В.Д.Мур*+

*Институт теоретической и экспериментальной физики
117259 Москва, Россия

+Московский государственный инженерно-физический институт
115409 Москва, Россия

Международный институт физики
125040 Москва, Россия

Поступила в редакцию 23 мая 1994 г.

В рамках квазиклассического приближения получена формула теории возмущений для энергии квазистационарных состояний (резонансов). Результат справедлив как для подбарьерных, так и для надбарьерных резонансов и проиллюстрирован на ряде потенциалов, допускающих сравнение с точными решениями.

1. Теория возмущений для квазистационарных состояний рассматривалась рядом авторов [1-3]. Ввиду экспоненциального роста гамовской волновой функции на бесконечности, возникающие при этом интегралы расходятся и требуют регуляризации. Поэтому полученные в [2,3] формулы теории возмущений не являются вполне явными, так как содержат операцию предельного перехода (например, $\lim \exp(-\alpha r^2)$, $\alpha \to +0$ у Зельдовича [2]).

2. Мы рассмотрим этот вопрос в квазиклассическом приближении, что позволяет полностью преодолеть указанную трудность. Предполагая, что (вещественный) потенциал $U(x)$ обладает барьером и удовлетворяет условию квазиклассичности, используем модифицированное правило квантования с учетом конечной проницаемости барьера [4-6]. Варьируя это уравнение по потенциалу приходим к формуле теории возмущений (первого порядка):

$$\delta E = \frac{\int\limits_{x_0}^{x_1} \delta U(x) p^{-1} dx + \xi(a) \int\limits_{x_1}^{x_2} \delta U(x)(-p^2)^{-1/2} dx}{\int\limits_{x_0}^{x_1} p^{-1} dx + \xi(a) \int\limits_{x_1}^{x_2} (-p^2)^{-1/2} dx}, \tag{1}$$

где $\delta E = \delta E_r - \frac{i}{2}\delta\Gamma$,

$$\xi(a) = \frac{1}{2\pi}\left[\ln(ia) - \psi\left(\frac{1}{2} + ia\right)\right], \tag{2}$$

$$a = \frac{1}{\pi}\int\limits_{x_1}^{x_2} (-p^2)^{1/2} dx, \tag{3}$$

$\psi(z)$ – логарифмическая производная гамма-функции. Поясним обозначения: x_i – точки поворота, причем $x_0 < x < x_1$ – классически разрешенная, а $x_1 < x < x_2$ – запрещенная (подбарьерная) области (см. рис.1 в [5]), $p = p(x, E)$ – квазиклассический импульс. Для квазистационарных состояний энергия $E = E_r - i\Gamma/2$, точки поворота $x_i(E)$ и т.д. являются комплексными.

Рассмотрим два предельных случая формулы (1).

а) Для подбарьерных резонансов параметр $a \gg 1$ и

$$\xi(a) = \frac{1}{48\pi a^2}\left(1 + \frac{7}{40a^2} + ...\right) + \frac{i}{2}e^{-2\pi a}. \tag{4}$$

Подставляя это разложение в (1) и разделяя вещественную и мнимую части, получаем поправки к положению резонанса и его ширине. В частности,

$$\delta E_r = <\delta U> + 0(1/n^2), \tag{5}$$

где в члены порядка $1/n^2$ вносят вклад только поправки $\hbar^2, \hbar^4$ и т.д. в методе ВКБ, вычисленные по классически-разрешенной области (а вклады от подбарьерной области, связанные с функцией $\xi(a)$, взаимно сокращаются [1)]). Соответствующую формулу и ее обсуждение мы здесь опустим. Что касается ширины уровня, то для нее получаем

$$\frac{\delta\Gamma}{\Gamma} = (<\delta U> - <\delta U>')T', \tag{6}$$

где $\hbar = m = 1$ и введены обозначения

$$<f> = \frac{2}{T}\int_{x_0}^{x_1} f(x)p^{-1}dx, \qquad <f>' = \frac{2}{T'}\int_{x_1}^{x_2} f(x)|p|^{-1}dx, \tag{7}$$

$$T = 2\int_{x_0}^{x_1} p^{-1}dx, \qquad T' = 2\int_{x_1}^{x_2} |p|^{-1}dx. \tag{7a}$$

Заметим, что в (5)-(7) можно считать энергию E и точки поворота вещественными, поскольку $\mathrm{Im}E = -\Gamma/2$ экспоненциально мала. При этом T – период классических колебаний частицы между точками поворота x_0 и x_1, $<f>$ – среднее от функции $f(x)$, взятое по квазиклассической волновой функции, а T' и $<f>'$ – аналогичные величины для подбарьерного движения, рассматриваемого в рамках метода мнимого времени [7,8].

Как видно из (6), поправка $\delta\Gamma$ зависит от возмущения потенциала δU не только в подбарьерной области, но также и в пределах области классического движения, причем эти две поправки входят в (5) с разным знаком. Это можно пояснить на следующем примере. Представим себе, что возмущение $\delta U(x) > 0$ и целиком сосредоточено на достаточно малом интервале Δx. Если Δx находится в подбарьерной области, то барьер увеличивается и $\delta\Gamma < 0$. Если же Δx принадлежит интервалу (x_0, x_1), где в основном локализована частица, то возрастает энергия уровня (при фиксированном барьере), вследствие чего $\delta\Gamma > 0$. Это объясняет знаки в формуле (6).

б) Перейдем к надбарьерным ($E_r > U_m$) резонансам. Как показано в [9,10], в этом случае $\pi/2 < arg\ a < \pi$, и вместо (4) получаем $\xi(a) = i + 0(a^{-2})$. С учетом этого (1) принимает следующий вид:

$$\delta E = \oint_C \delta U(x)(p^2)^{-1/2}dx \Big/ \oint_C (p^2)^{-1/2}dx, \tag{8}$$

[1)] Можно показать, что параметр $a \sim n$, где n – квантовое число уровня. В то же время хорошо известно, что формальный параметр $\hbar$ квазиклассического разложения в окончательных формулах перерабатывается в $1/n$. Таким образом, члены порядка a^{-2} и $\hbar^2$ должны рассматриваться одновременно.

где контур интегрирования C охватывает точки поворота x_0 и x_2, лежащие в комплексной плоскости [2)], а разрез для функции $[p^2(x)]^{-1/2}$ проведен от x_0 до x_2. Тот же результат (8) следует непосредственно из полученного в [10] обобщенного условия квантования для надбарьерного резонанса, что служит независимым подтверждением уравнения (1).

3. Проиллюстрируем полученные формулы на ряде модельных потенциалов, допускающих сравнение с точными решениями.

а) Параболический барьер:

$$U(r) = -\frac{1}{2}\omega^2(r-R)^2, \qquad 0 < r < \infty. \tag{9}$$

Уравнение Шредингера с $l = 0$ имеет точное решение, удовлетворяющее при $r \to \infty$ условию излучения Зоммерфельда:

$$\chi_0(r) = \mathrm{const}\, D_{-1/2-ia}((1-i)\omega^{1/2}(r-R)).$$

В квазиклассическом приближении, используя асимптотику для функции параболического цилиндра, находим:

$$\omega R^2[(1-\epsilon)^{1/2} - \epsilon \operatorname{arth}(1-\epsilon)^{1/2}] = 2\pi(n-1/4),$$

$$\Gamma_n = \frac{\omega}{2}(\operatorname{arth}(1-\epsilon)^{1/2})^{-1}\exp(-2\pi a), \qquad a = -E_n/\omega, \tag{10}$$

где $\epsilon = -E/V_0$, $V_0 = -U(0) = \frac{1}{2}\omega^2 R^2$ (первое из этих уравнений определяет положение уровня) и $n = 1, 2, \ldots$. Здесь можно варьировать как частоту осциллятора ω, так и радиус R. Из (10) получаем:

$$\frac{\delta\Gamma}{\Gamma} = -\pi\omega R^2 \frac{(1-\epsilon)^{1/2}}{\operatorname{arth}(1-\epsilon)^{1/2}} \left(\frac{\delta\omega}{\omega} + 2\frac{\delta R}{R}\right) \tag{11}$$

(для подбарьерных резонансов $0 < \epsilon < 1$). Тот же результат следует из (6), если учесть, что $\delta U(r) = -\omega(r-R)^2\delta\omega + \omega^2(r-R)\delta R$, а точки поворота равны: $r_0 = 0$, $r_{1,2} = R(1 \mp \epsilon^{1/2})$.

б) Для потенциала

$$V(r) = -\frac{\alpha^2}{2r^2} - \frac{1}{8}\omega^2 r^2 \tag{12}$$

уравнение Шредингера решается в функциях Уиттекера для любого углового момента l. Эффективный потенциал отличается от (12) только заменой $\alpha \to g = [\alpha^2 - (l+1/2)^2]^{1/2}$ и при $\alpha > l + 1/2$ обладает барьером; этот случай мы и рассмотрим. Варьируя в (12) частоту ω, находим (как из формулы (6), так и из точного решения), что

$$\frac{\delta\Gamma}{\Gamma} = \frac{\pi g}{\ln(1+\epsilon^{-1})}\frac{\delta\omega}{\omega}, \tag{13}$$

где теперь $\epsilon = (E - U_m)/2U_m$, $U_m = -\frac{1}{2}g\omega$ – максимальное значение потенциала.

в) Аналогичные результаты были получены для потенциала

$$U(r) = -\frac{g^2}{2r^2} + \frac{\zeta}{r}, \tag{14}$$

[2)] А не точки x_0 и x_1, ограничивающие область классического движения (как в случае дискретного спектра).

который по форме совпадает с эффективным потенциалом в уравнении Дирака для электронных состояний, близких к границе нижнего континуума [11].

В рассмотренных примерах зависимость $\delta\Gamma$ от ϵ (то есть от энергии уровня) не является тривиальной, поэтому совпадение с точными решениями служит, на наш взгляд, убедительным подтверждением уравнения (6). Другой предельный случай, а именно, формула (8), был проверен на примере ангармонического осциллятора: $U(x) = \frac{1}{2}x^2 - gx^3$, когда $\delta U = -x^3\delta g$. При $g \to \infty$ имеем: $x_0 \approx -(E/g)^{1/3}$, $x_2 \approx (E/g)^{1/3}\exp(i\pi/3)$, с учетом чего интегралы, входящие в (8), сводятся к гамма-функциям. В итоге получаем $\delta E_n/E_n = \frac{2}{5}\delta g/g$,

$$\delta\Gamma_n \approx k(n+1/2)^{6/5} g^{-3/5}\delta g, \qquad n \gg 1, \tag{15}$$

где

$$k = \left(\frac{10}{27}\pi^3\right)^{1/5} [2\Gamma(5/6)/\Gamma(1/3)]^{6/5} \sin\frac{\pi}{5} \approx 0,780.$$

То же выражение следует из асимптотики для энергии $\tilde{E}_n(g) \sim g^{2/5}$ в пределе сильной связи [10,12]. Рассматривая осцилляторный член в $U(x)$ как возмущение, с помощью (8) легко вычислить также поправку $\sim g^{-4/5}$ к лидирующему члену асимптотики $\tilde{E}_n(g)$ при $g \gg 1$.

4. В общем случае (в том числе для резонансов, близких к вершине барьера, когда $E_r \approx U_m$ и $|a| \sim 1$) нужно использовать формулу теории возмущений (1), которая определяет как δE_r, так и $\delta\Gamma$. Эта формула требует несложных численных расчетов и, по-видимому, может найти применение в различных физических задачах.

Изложенный выше подход допускает обобщение на многомерный случай. Для системы с $f > 1$ степенями свободы, допускающей разделение переменных в уравнении Шредингера, можно получить формулу теории возмущений, аналогичную (1), которая, однако, потребовала бы слишком много места. Этот вопрос, так же как и включение в формулу (5) членов порядка $1/n^2$, мы отложим до более подробной публикации.

Авторы благодарны Б.М.Карнакову, Б.О.Кербикову и К.А.Тер-Мартиросяну за полезные замечания. Работа выполнена частично при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 93-02-14368) и Международного научного фонда (грант Ph 1-2292-0925).

---

1. P.Kapur and R.E.Peierls, Proc. Roy. Soc. **A166**, 277 (1938).
2. Я.Б.Зельдович, ЖЭТФ **39**, 776 (1960).
3. А.И.Базь, Приложение IX в книге Э.Ч.Титчмарш. "Разложения по собственным функциям, связанные с дифференциальными уравнениями второго порядка", т.2, М.: ИЛ, 1961, с.533.
4. J.N.L.Connor, Mol. Phys. **25**, 1469 (1973).
5. В.Д.Мур, В.С.Попов, Письма в ЖЭТФ **51**, 499 (1990).
6. В.С.Попов, В.Д.Мур, А.В.Сергеев, ЖЭТФ **100**, 20 (1991).
7. А.М.Переломов, В.С.Попов, М.В.Терентьев, ЖЭТФ **50**, 1393 (1966).
8. В.С.Попов, В.П.Кузнецов, А.М.Переломов, ЖЭТФ **53**, 331 (1967).
9. V.S.Popov, V.D.Mur, and A.V.Sergeev, Phys. Lett. A **157**, 185 (1991).
10. В.Д.Мур, В.С.Попов, Письма в ЖЭТФ **57**, 406 (1993); ЖЭТФ **104**, 2293 (1993).
11. Я.Б.Зельдович, В.С.Попов, УФН **105**, 403 (1971).
12. G.Alvarez, Phys. Rev. **A37**, 4079 (1988).