УДК 539.12.01

РЕГУЛЯРИЗОВАННОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ КОМПЛЕКСНОЙ ЭНЕРГИИ КВАЗИСТАЦИОНАРНЫХ НЕРЕЛЯТИВИСТСКИХ ФЕРМИОННЫХ СИСТЕМ ВО ВНЕШНИХ СТАЦИОНАРНЫХ ПОЛЯХ

В. Н. Родионов[*)], А. М. Мандель, Г. А. Кравцова

(*кафедра теоретической физики*)

E-mail: th180@phys.msu.su

Построены точные решения уравнений Шредингера и Паули для заряженных частиц во внешнем стационарном электромагнитном поле. Рассчитаны причинные функции Грина скалярной и спинорной частиц. С их помощью методом аналитического продолжения получено уравнение для комплексной энергии частиц, связанных короткодействующим потенциалом. Показано, что это уравнение не содержит расходимостей и позволяет корректно учесть спиновые состояния частиц.

Влияние внешних электромагнитных полей на нерелятивистские реакции с участием заряженных частиц и на поведение связанных систем (типа атомов, ионов и атомных ядер) исследуется уже достаточно давно [1–6]. Тем не менее ряд вопросов, на наш взгляд, требует дополнительного изучения. Во-первых, в рамках традиционного подхода, основанного на использовании граничных условий δ-потенциала, в уравнениях для комплексной энергии связанных квазистационарных состояний возникают физически бессмысленные расходимости. Во-вторых, энергия взаимодействия спиновых магнитных моментов с внешним магнитным полем в нерелятивистских реакциях, как правило, не учитывается. В частности, такой подход приводит к неадекватному представлению о стабилизирующей роли магнитного поля в процессах ионизации и внутреннего фотоэффекта в полупроводниках [7–9]. В настоящей работе предлагается путь устранения указанных пробелов.

Рассмотрим заряженную частицу, связанную короткодействующим потенциалом типа δ-ямы и находящуюся при этом во внешнем стационарном электромагнитном поле произвольной конфигурации. Отметим, что потенциал нулевого радиуса — достаточно распространенное в литературе приближение поля многоэлектронного атома и особенно отрицательного иона, а также поля ядерных сил [4–6]. В общем случае внешнее поле задается тремя независимыми параметрами: напряженностями магнитного H и электрического E полей и углом между ними φ.

Процесс выхода частицы из δ-ямы сводится к ее переходу с изолированного уровня энергии на уровень в сплошном спектре, т. е. к распаду связанного состояния. Внешнее электромагнитное поле влияет на этот переход двояким образом: во-первых, формируются волновые функции конечного состояния и, во-вторых, происходит сдвиг и уширение 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 комплексной энергии [4–6]

$$W = W_0 + \Delta W - i\Gamma/2, \tag{1}$$

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. Важно, что рассматривать раздельно сдвиг уровня и его ширину можно только в слабом внешнем поле. В интенсивном поле необходимо проводить совместное изучение этих величин.

Обычно, чтобы получить замкнутое уравнение для комплексной энергии, используется характерное для δ-ямы граничное условие [2, 4, 10–16]. Например, для скалярной частицы в рассматриваемой конфигурации внешнего поля такое уравнение получено в работе [15]:

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

где $\omega_H = eH/mc$ — циклотронная частота, e и m — соответственно модуль заряда и масса частицы, переменная интегрирования t имеет размерность времени и

$$S = -\frac{(eE\cos\varphi)^2 t^3}{24m} + \\ + \frac{(eE\sin\varphi)^2 t}{2m\omega_H^2}\left[\frac{\omega_H t}{2}\operatorname{ctg}\left(\frac{\omega_H t}{2}\right) - 1\right]. \tag{3}$$

[*)] Кафедра общей физики Московского государственного геологоразведочного университета.

Принимая во внимание выражение (1), легко увидеть, что интеграл в правой части (2) экспоненциально расходится. Удовлетворительной процедуры регуляризации уравнений типа (2), насколько нам известно, пока не предложено.

Главная задача предлагаемой работы — методом аналитического продолжения вывести уравнение для комплексной энергии в стационарном внешнем поле, не содержащее упомянутой расходимости. При этом мы также последовательно учтем взаимодействие спина частицы с внешним магнитным полем.

Начнем с решения нестационарного уравнения Шредингера для свободной скалярной заряженной частицы во внешнем поле. Гамильтониан такого уравнения можно представить в виде*)

$$\widehat{H}_{\mathrm{Sch}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - i\hbar\omega_H x\frac{\partial}{\partial y} + \frac{1}{2}m\omega_H^2 x^2 + \\ + eEx\sin\varphi + eEz\cos\varphi. \quad (4)$$

Здесь предполагается, что магнитное поле ориентировано вдоль оси z, а вектор напряженности электрического поля лежит в плоскости (x, z).

Уравнение Шредингера с гамильтонианом (4) можно решить стандартным методом разделения переменных. Непосредственной подстановкой легко убедиться, что волновая функция заряженной частицы в поле рассматриваемой конфигурации имеет вид

$$\psi_n(\mathbf{r}, t) = N u_n(\rho) B(\xi) \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(yp_y - t\widetilde{W}\right)\right], \quad (5)$$

где N — нормировочный коэффициент; $u_n(\rho)$ — функции Эрмита с аргументом

$$\rho(x) = \left(\frac{m\omega_H}{\hbar}\right)^{1/2}\left[x + \frac{p_y}{m\omega_H} - \frac{eE\sin\varphi}{m\omega_H^2}\right],$$

удовлетворяющие уравнению $u_n''(\rho) + (2n + 1 - \rho) \times \times u_n(\rho) = 0$; p_y — сохраняющаяся компонента поперечного импульса. В свою очередь функция $B(\xi)$ в (5) пропорциональна регулярной на бесконечности функции Эри Ai:

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

с аргументом**)

$$\xi(z) = \left(\frac{2meE\cos\varphi}{\hbar^2}\right)^{1/3}(z - z_0),$$

где z_0 характеризует константу разделения переменных в уравнении Шредингера; $\widetilde{W}$ — полная энергия скалярной частицы во внешнем поле:

$$\widetilde{W} = \hbar\omega_H\left(n + \frac{1}{2}\right) + eEz_0\cos\varphi. \quad (6)$$

Построенное таким образом решение уравнения Шредингера относится к скалярной частице. Для того чтобы учесть в рассматриваемом нерелятивистском приближении ее спиновые состояния, необходимо перейти к уравнению Паули (см., напр., [6, 17]) для спинорной волновой функции $\overline{\psi}_{n,\sigma}(\mathbf{r}, t)$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\overline{\psi}_{n,\sigma}(\mathbf{r}, t) = \left(\widehat{H}_{\mathrm{Sch}} + \frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\tau}\mathbf{H}\right)\overline{\psi}_{n,\sigma}(\mathbf{r}, t), \quad (7)$$

где гамильтониан Паули включает энергию взаимодействия спина с внешним стационарным магнитным полем $\mathbf{H}$, а $\boldsymbol{\tau}$ — матрицы Паули. Учитывая конкретную ориентацию магнитного поля в рассматриваемой задаче, этот гамильтониан легко привести к следующему матричному виду:

$$\widehat{H}_{\mathrm{P}} = \begin{pmatrix} \widetilde{H}_{\mathrm{Sch}} + \hbar\omega_H/2 & 0 \\ 0 & \widehat{H}_{\mathrm{Sch}} - \hbar\omega_H/2 \end{pmatrix}.$$

Решение уравнения Паули с таким гамильтонианом представимо в форме

$$\overline{\psi}_{n,\sigma}(\mathbf{r}, t) = \psi_n(\mathbf{r}, t)\begin{pmatrix} a_1(t)\exp(-i\omega_H t/2) \\ a_2(t)\exp(i\omega_H t/2) \end{pmatrix}, \quad (8)$$

где скалярная функция $\psi_n(\mathbf{r}, t)$ определяется формулой (5), а спиновые функции a_1 и a_2 зависят только от времени. Условие нормировки волновой функции требует, чтобы $a_1^2 + a_2^2 = 1$. Непосредственная подстановка (8) в уравнение (7) дает $a_1,\ a_2 = \mathrm{const}$. Это означает, что, во-первых, сохраняется проекция спина частицы на ось z. Такое сохранение обусловлено однородностью и стационарностью магнитного поля [17], а во-вторых, полная энергия частицы вместо выражения (6) определяется более общей формулой

$$\widetilde{W} = \hbar\omega_H\left(n + \frac{1}{2} + \sigma\right) + eEz_0\cos\varphi, \quad (9)$$

где $\sigma = 0$ для скалярной и $\sigma = \pm 1/2$ для спинорной частицы.

Построим теперь временную функцию Грина заряженной частицы в данном поле. С целью некоторого упрощения вычислений мы, не ограничивая общности, полагаем один из пространственно-временных аргументов двухточечной функции Грина нулевым. Необходимо провести свертку по параметрам p_y, z_0, n (а для частицы со спином — и по σ), задающим решения (5), (8) в данном внешнем поле. Функция Грина будет диагональной матрицей вида

$$\widehat{G}(\mathbf{r}, t; \mathbf{0}, 0) = \sum_{n=0}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}dz_0\int_{-\infty}^{\infty}dp_y\, G_{\mathrm{Sch}}(n, z_0, p_y)\times$$

*) Поскольку в подобных задачах, как правило, приходится иметь дело с электронами, в дальнейшем полагаем заряд частиц отрицательным.

**) При $z = z_0$ аргумент функции Эри меняет знак. Нетрудно видеть, что это — точка поворота для классического движения частицы по оси z.

$$\times \begin{pmatrix} \exp(-i\omega_H t/2) & 0 \\ 0 & \exp(i\omega_H t/2) \end{pmatrix}, \quad (10)$$

где скалярная функция Грина G_{Sch} относится к уравнению Шредингера

$$G_{\mathrm{Sch}}(n, z_0, p_y) \sim$$
$$\sim u_n(x) u_n(0)\,\mathrm{Ai}(z_0)\,\mathrm{Ai}(0) \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(p_y y - t\widetilde{W}\right)\right].$$

Входящий в (10) интеграл по z_0 легко вычисляется с использованием свойств функций Эри. Интеграл по p_y с функциями Эрмита аналогичен интегралу, впервые рассмотренному в работе [18]. Образующийся после этого ряд по полиномам Лагерра суммируется по n с помощью описанного в [19] алгоритма (см. также [20, 21]). В результате скалярная часть временной функции Грина в стационарном электромагнитном поле выражается в элементарных функциях:

$$G_{\mathrm{Sch}}(\mathbf{r}, t; \mathbf{0}, 0) =$$
$$= \left(\frac{m}{2\pi}\right)^{3/2} \frac{\omega_H}{2t^{1/2}} \sin^{-1}\left(\frac{\omega_H t}{2}\right) \exp\left(\frac{iS}{\hbar}\right), \quad (11)$$

где

$$S = \frac{mz^2}{2t} - \frac{eEzt}{2}\cos\varphi - \frac{(eE\cos\varphi)^2 t^3}{24m} +$$
$$+ \frac{m\omega_H}{4}\left[(x^2+y^2)\,\mathrm{ctg}\left(\frac{\omega_H t}{2}\right) - 2xy\right] + \frac{1}{2} eExt\sin\varphi +$$
$$+ \frac{eE\sin\varphi}{\omega_H}\left[\frac{\omega_H t}{2}\,\mathrm{ctg}\left(\frac{\omega_H t}{2}\right) - 1\right]\left(y + \frac{eEt\sin\varphi}{2m\omega_H}\right). \quad (12)$$

Если принять в (11), (12) массу частицы за единицу и проделать очевидные переобозначения, мы в точности воспроизведем формулы (A.7)–(A.9) из работы [15]. При $\varphi = \pi/2$ соотношения (11), (12) описывают функцию Грина скалярной частицы в скрещенном поле [14, 21, 22].

Вероятность P распада связанного состояния частицы в единицу времени в данном внешнем поле можно получить, интегрируя по времени пропагатор легкой заряженной частицы [23, 24]:

$$P = \pi\left(\frac{2}{m}\right)^{3/2}\left(\frac{|W_0|}{\hbar}\right)^{1/2}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dt\, G_{\mathrm{Sch}}(\mathbf{0}, t; \mathbf{0}, 0) \times$$
$$\times f_\sigma\left(\frac{\omega_H t}{2}\right)\exp\left(\frac{i}{\hbar}W_0 t\right) = \frac{\omega_H}{2}\left(\frac{|W_0|}{\pi\hbar}\right)^{1/2}\exp\left(-i\frac{3\pi}{4}\right) \times$$
$$\times \int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{dt}{t^{1/2}}\frac{f_\sigma(\omega_H t/2)}{\sin(\omega_H t/2)}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(S + W_0 t)\right], \quad (13)$$

где W_0 — энергия невозмущенного связанного уровня (1), а S при нулевых координатах определяется формулой (3). Полюсы подынтегральной функции в точках $t_n = 2\pi n/\omega_H$ обходятся снизу.

Функция f_σ в (13) тождественно равна единице для скалярных частиц, а для спинорных зависит от их поляризации. В общем случае

$$f_\sigma(\omega_H t/2) = a_1^2 \exp(-i\omega_H t/2) + a_2^2 \exp(i\omega_H t/2), \quad (14)$$

где a_1, a_2 — введенные в решение (8) амплитуды вероятности того, что спин частицы ориентирован по магнитному полю или против поля. Например, если не интересоваться поляризацией электронов в процессе ионизации, то $a_1^2 = a_2^2 = 1/2$ и $f_\sigma = \cos(\omega_H t/2)$.

Как известно, ширина связанного уровня пропорциональна вероятности его распада $\Gamma = \hbar P$ [6]. Для аналитического продолжения (13) перепишем это соотношение таким образом, чтобы интегрирование в нем проводилось по положительной полуоси. С этой целью следует представить экспоненту в (13) как сумму 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, совершив обход нулевой точки 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 корня из-за точки ветвления в нуле. Отметим, что наличие такой точки, обусловленное полуцелой степенью t в знаменателе, — неотъемлемый признак нерелятивистского приближения при описании пороговых явлений [6, 19, 25]. Выбор нужной ветви определяется требованием действительности вклада рассматриваемого слагаемого в вероятность.

После простых преобразований формулу для ширины уровня можно свести к виду

$$\frac{\Gamma}{4|W_0|^{1/2}} = \frac{1}{2}\left(\frac{\hbar}{\pi}\right)^{1/2}\int\limits_0^\infty \frac{dt}{t^{3/2}}\left\{\frac{\omega_H t}{2\sin(\omega_H t/2)} \times\right.$$
$$\times \sum_{k=1,2} a_k^2 \sin\left[\frac{1}{\hbar}\left(S + W_0 t + (-1)^k\frac{\hbar\omega_H}{2}t\right) - \frac{\pi}{4}\right] +$$
$$\left. + \sin\frac{\pi}{4}\right\}. \quad (15)$$

Ясно, что левая часть (15) представляет собой мнимую часть разложения (1) при $\Gamma \ll |W_0|$, $|\Delta W| \ll |W_0|$:

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

а правая является мнимой частью выражения для комплексной энергии

$$(-W)^{1/2} = \frac{1}{2}\left(\frac{\hbar}{\pi}\right)^{1/2}\int\limits_0^\infty \frac{dt}{t^{3/2}}\left\{\frac{\omega_H t}{2\sin(\omega_H t/2)} \times \right.$$
$$\times \sum_{k=1,2} a_k^2 \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(S + W_0 t + (-1)^k\frac{\hbar\omega_H}{2}t\right) - \frac{i\pi}{4}\right] -$$
$$\left. - \exp\left(-\frac{i\pi}{4}\right)\right\}. \quad (16)$$

Очевидно, что действительная часть (16) определяет сдвиг уровня внешним полем. Используя тождественное преобразование, справедливое при любом действительном W_0,

$$\int\limits_0^\infty \frac{dt}{t^{3/2}}\left[\exp\left(i\frac{tW_0}{\hbar}\right) - 1\right] =$$
$$= -2\left(\frac{\pi|W_0|}{\hbar}\right)^{1/2}\exp\left[-\frac{i\pi}{4}\operatorname{sign}(W_0)\right], \quad (17)$$

получим окончательное уравнение для комплексной энергии связанного уровня в стационарном внешнем поле общего вида

$$(-W)^{1/2} - (-W_0)^{1/2} = \frac{1}{2}\left(\frac{\hbar}{i\pi}\right)^{1/2}\int\limits_0^\infty \frac{dt}{t^{3/2}} \times$$
$$\times \exp\left(\frac{i}{\hbar}W_0 t\right)\left\{\frac{\omega_H t}{2}\frac{f_\sigma(\omega_H t/2)}{\sin(\omega_H t/2)}\exp\left(\frac{iS}{\hbar}\right) - 1\right\}, \quad (18)$$

причем S задается формулой (3).

Видно, что полученное уравнение явно разрешено относительно W. Подчеркнем, что все интегралы в используемых при выводе промежуточных соотношениях (13)–(17), как и в итоговой формуле (18), конечны. Ограничения относительной малости ширины и сдвига исходного уровня не являются недостатком описываемой схемы, ибо они заложены в самом понятии квазистационарного уровня энергии [6].

Таким образом, получено замкнутое регулярное уравнение для комплексной энергии квазистационарного уровня заряженной частицы, связанной короткодействующими силами, в стационарном внешнем электромагнитном поле общего вида. От аналогичного уравнения (2) оно отличается кроме регулярности тем, что описывает не только скалярные частицы, но и частицы со спином $1/2$. В заключение отметим, что уравнение, аналогичное (18), для скрещенного внешнего поля было получено в работе [7], а для внешнего поля конфигурации Редмонда — в работе [25]. В этих же работах приведен ряд явных решений упомянутых уравнений для различных частных случаев конфигурации внешних полей.

Работа выполнена при финансовой поддержке ведущих научных школ (грант Президента РФ НШ-5332.2006.2), а также РФФИ (грант 05-02-16535).

Литература

1. *Тернов И.М., Халилов В.Р., Родионов В.Н.* Взаимодействие заряженных частиц с сильным электромагнитным полем. М., 1982.
2. *Делоне Н.Б., Крайнов В.П.* Атом в сильном световом поле. М., 1978.
3. *Никишов А.И., Ритус В.И.* // Тр. ФИАН. 1986. **168**. С. 247.
4. *Демков Ю.Н., Островский В.Н.* Метод потенциала нулевого радиуса в атомной физике. Л., 1975.
5. *Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М.* Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М., 1971.
6. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М., 1974.
7. *Родионов В.Н., Кравцова Г.А., Мандель А.М.* // Письма в ЖЭТФ. 2002. **75**. С. 435.
8. *Родионов В.Н., Кравцова Г.А., Мандель А.М.* // Докл. РАН. 2002. **386**. С. 753.
9. *Родионов В.Н., Кравцова Г.А., Мандель А.М.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2002. № 5. С. 6 (Moscow University Phys. Bull. 2002. N 5. P. 6).
10. *Демков Ю.Н., Друкарев Г.Ф.* // ЖЭТФ. 1964. **47**. С. 918.
11. *Демков Ю.Н., Друкарев Г.Ф.* // ЖЭТФ. 1965. **49**. С. 257.
12. *Манаков Н.Л., Рапопорт Л.П.* // ЖЭТФ. 1975. **69**. С. 842.
13. *Berson I.J.* // J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 1975. **8**. P. 3078.
14. *Друкарев Г.Ф., Монозон Б.С.* // ЖЭТФ. 1971. **61**. С. 956.
15. *Попов В.С., Карнаков Б.М., Мур В.Д.* // ЖЭТФ. 1998. **113**. С. 1579.
16. *Манаков Н.П., Фролов М.В., Борка Б., Старасе А.Ф.* // Письма в ЖЭТФ. 2000. **72**. С. 426.
17. *Тернов И.М.* Введение в физику спина релятивистских частиц. М., 1997.
18. *Клепиков Н.П.* // ЖЭТФ. 1954. **26**. С. 19.
19. *Родионов В.Н.* // ЖЭТФ. 1998. **113**. С. 21.
20. *Ансельм А.И.* Введение в теорию полупроводников. М., 1978.
21. *Фейнман Р., Хибс А.* Квантовая механика и интегралы по траекториям. М., 1986.
22. *Ритус В.И.* // ЖЭТФ. 1966. **51**. С. 1544.
23. *Родионов В.Н.* // ЖЭТФ. 1997. **111**. С. 3.
24. *Никишов А.И., Ритус В.И.* // ЖЭТФ. 1983. **85**. С. 1544.
25. *Кадышевский В.Г., Родионов В.Н.* // ТМФ. 2000. **125**. С. 432.

Поступила в редакцию
25.03.05