

ЛЕКЦИЯ #04

НЕСТАЦИОНАРНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ – 3

ИОНИЗАЦИЯ

ЗОЛОТОЕ ПРАВИЛО ФЕРМИ - 2

Выражение для скорости перехода из состояния дискретного спектра во все состояния непрерывного спектра (или в область таких состояний, захватывающих конечную часть энергетической поверхности) дается золотым правилом Ферми

$$\dot{W} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{n\vec{k}}|^2 \rho(E_k) \quad (3.8)$$

Приведем примеры его использования.

§ 4.1 Однофотонная ионизация атома водорода

◆ В качестве примера рассмотрим задачу об однофотонной ионизации атома водорода, находящегося в основном состоянии. В дипольном приближении оператор возмущения возьмем в виде резонансной (отрицательно частотной) части первого слагаемого pA -формы (см. ф-лу (2.13)):

$$\hat{V}(t) = \frac{e\vec{E}}{m\omega} \hat{p} \sin \omega t \approx \frac{e\vec{E}}{2m\omega} \hat{p} e^{-i\omega t}. \quad (1)$$

Вычисления удобно вести в атомной системе единиц. ВФ начального – основного, $1s$ - состояния в атомной системе единиц есть

$$\varphi_n(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r}. \quad (2)$$

Конечное состояние опишем с помощью ВФ свободной частицы:

$$\varphi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}. \quad (3)$$

★ В кулоновском поле это *борновское приближение* (3) применимо, если скорость электрона v в конечном состоянии удовлетворяет неравенствам $\alpha c \ll v \ll c$ [ЛЛШ, §45] и, следовательно, $k \gg 1$. В этой области можно пренебречь энергией связи в сравнении с энергией фотона и считать энергию конечного состояния равной энергии фотона: $E_k = k^2/2 \approx \omega$.

Матричный элемент возмущения (где ψ - угол между направлениями \vec{E} и \vec{k})

$$V_{nk} = \frac{Ek}{2\sqrt{\pi\omega}} \cos \psi \int d\vec{r} e^{i\vec{k}\vec{r}-r} \quad (4)$$

при больших k имеет асимптотику

$$V_{nk} \approx 4\sqrt{\pi} \frac{\mathcal{E}}{\omega k^3} \cos \psi. \quad (5)$$

Подстановка этого выражения и формулы для плотности состояний (3.22)

$$\rho(E_k) d\Omega_k = L^3 \frac{\sqrt{2E}}{(2\pi)^3} \left(\frac{m}{\hbar^2}\right)^{3/2} d\Omega_k \quad (3.22)$$

в золотое правило Ферми (3.8) дает

$$\dot{W} = 2\pi \left(16\pi \frac{\mathcal{E}^2}{\omega^2 k^6} \cos^2 \psi \right) \frac{\sqrt{2E_k}}{8\pi^3} d\Omega. \quad (6)$$

Полная скорость перехода определяется интегрированием по всем углам. Она равна (в обычных единицах)

$$\dot{W} = \frac{2\sqrt{2}}{3} \omega_0 \left(\frac{\mathcal{E}}{\mathcal{E}_a}\right)^2 \left(\frac{\omega_a}{\omega}\right)^{9/2} \sim \omega_0 \xi^2 \eta^{-9/2}. \quad (7)$$

◆ Для процессов, скорость которых \dot{W} при действии поля излучения пропорциональна его интенсивности, наряду с \dot{W} принято вводить *сечение процесса* - отношение скорости перехода к плотности потока фотонов падающего излучения:

$$\sigma = \frac{\dot{W}}{J} = \frac{8\pi\hbar\omega}{c\mathcal{E}^2} \dot{W}. \quad (8)$$

Сечение однофотонной ионизации атома водорода при $\eta \gg 1$ имеет вид

$$\boxed{\sigma_i(\omega) = \frac{16\sqrt{2}\pi}{3} \alpha a_0^2 \left(\frac{\omega_a}{\omega}\right)^{7/2} \sim \alpha a_0^2 \eta^{-7/2}}. \quad (9)$$

★ Более точный расчет, использующий в качестве $\varphi_k(\vec{r})$ не плоские волны, а точные ВФ состояний непрерывного спектра в кулоновском поле [ЛЛIV, §56], добавляет к выражению (9) множитель

$$F(\omega) = \sqrt{2}\pi \left(\frac{\omega_a}{\omega}\right)^{1/2} \frac{\exp(-4\vartheta \operatorname{arctg}\vartheta)}{1 - \exp(-2\pi\vartheta)} \quad (10)$$

где

$$\vartheta = (2\omega/\omega_a - 1)^{-1/2}. \quad (11)$$

При стремлении ω к красной границе фотоэффекта ($\omega \rightarrow \omega_a/2$) сечение однофотонной ионизации атома водорода стремится **к конечному пределу**

$$\sigma_i(\omega_a/2) = \frac{512\pi^2}{3} \exp(-4) \cdot \alpha a_0^2 = 30.85 \alpha a_0^2 = 6.3 \cdot 10^{-18} \text{ см}^2. \quad (12)$$

Конечность сечения ионизации на пороге специфична для кулоновского поля и связана с тем, что граница дискретного спектра для него не является физически выделенной точкой (почему?).

☆ Вычислить время прыжка τ_J (3.11) для условий рассмотренной задачи.

§ 4.2 Однофотонная ионизация слабо связанной системы

◆ Другой удобной моделью квантовой радиофизики является модель *потенциала нулевого радиуса (ПНР)*, в которой ВФ единственного связанного состояния имеет вид

$$\varphi_n(\vec{r}) = \sqrt{\frac{\kappa}{2\pi}} \frac{e^{-\kappa r}}{r}, \quad (13)$$

где $\kappa = \sqrt{2m|E_0|/\hbar^2}$, а $|E_0|$ есть энергия связи. С формальной точки зрения можно считать, что потенциал такой системы задан граничным условием на ВФ

$$\left. \frac{d \ln(r\varphi_n)}{dr} \right|_{r \rightarrow 0} = -\kappa. \quad (14)$$

Модель ПНР есть трехмерный аналог одномерной модели δ -ямы. Ее можно применять, например, для описания фотоотрыва электрона от отрицательного иона водорода H_1^- ($|E_0| = 0.75 \text{ эВ}$) или фоторасщепления дейтрона ($|E_0| = 2.22 \text{ МэВ}$). Слабость потенциала позволяет заменять ВФ конечного состояния плоской волной $\varphi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}$ при любых E_k .

Используя оператор возмущения в форме (1), для матричного элемента перехода получаем

$$V_{nk} = \frac{e\mathcal{E}\hbar k}{2m\omega} \cos \psi \sqrt{\frac{\kappa}{2\pi}} \int \frac{e^{-\kappa r + i\vec{k}\vec{r}}}{r} d\vec{r} \quad (15)$$

Входящий в (15) интеграл J вычисляется элементарно:

$$J = \frac{4\pi}{\kappa^2 + k^2}. \quad (16)$$

В итоге интегрирования по углам для скорости перехода получаем

$$\dot{W} = \frac{2}{3} \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{m\hbar\omega^2} \frac{\kappa k^3}{(\kappa^2 + k^2)^2}. \quad (17)$$

Для полного сечения ионизации (ср. (8)) получаем

$$\sigma_I = \frac{16\pi}{3} \frac{e^2}{mc\omega} \frac{\kappa k^3}{(\kappa^2 + k^2)^2}. \quad (18)$$

Введем безразмерную переменную $\varepsilon = \hbar\omega/|E_0|$, равную отношению энергии фотона излучения к энергии связи. Тогда (18) можно переписать в виде

$$\sigma_I = \frac{32\pi}{3} \alpha \kappa^{-2} \frac{(\varepsilon - 1)^{3/2}}{\varepsilon^3}. \quad (19)$$

Величина κ^{-1} есть радиус локализации системы в основном состоянии = эффективный поперечник системы.



Максимум сечения достигается при $\varepsilon = 2$ и равен $(4\pi/3)\alpha\kappa^{-2}$.

★ Формула (19) дает хорошее согласие с экспериментальными значениями сечения фотоотрыва электрона от отрицательного иона водорода [SB59], **будучи умноженной на 3.0.**

📖 [SB59] S.J. Smith, D.S. Birch

Photodetachment cross section of the negative hydrogen ion
Phys. Rev. Lett., 1959, vol. 2, no. 4, pp. 165 – 166.

★ При использовании (19) для описания фоторасщепления дейтрона надо в качестве m взять приведенную массу частицы $\approx m_p/2$, а заряд частицы взять равным $e/2$.

При этом формула (19) даст хорошее согласие с экспериментальными данными [M67, K07], **будучи умноженной на 1.5 – 1.7.**

📖 [M67] В.В. Маляров

Основы теории атомного ядра.

М.: Наука, 1967. – с.435

📖 [K07] И.М. Капитонов.

Слайды к лекциям "Взаимодействие электронов и фотонов с атомными ядрами"
<http://nuclphys.sinp.msu.ru/el/lec/el22.htm>

Объединяя (9) и (19), резюмируем:

Типичная (максимальная) величина сечения однофотонной ионизации порядка $\sigma_I \sim \alpha a^2$, где a - поперечник системы.

§ 4.3 Переходы в шумовом поле

◆ До сих пор мы пользовались моделью монохроматического внешнего поля, $\hat{V}(t) = \hat{V} \cos \omega t$. В ряде случаев необходим учет флуктуаций внешнего поля излучения, делающих его спектр непрерывным. Обычной моделью шумового поля служит *стационарный случайный процесс* [АДЧ81, с.38].

📖 [АДЧ81] - С.А. Ахманов, Ю.Е. Дьяков, А.С. Чиркин
Введение в статистическую радиофизику и оптику.
М.: Наука, 1981. - 640 с.

Запишем возмущение в виде $\hat{V}(t) = \hat{V} \xi(t)$, где безразмерная случайная функция $\xi(t)$ нормирована условием $\langle \xi^2(t) \rangle = 1$; предположим также, что $\langle \xi(t) \rangle = 0$. Здесь и в дальнейшем угловые скобки означают усреднение по реализациям. Скорость перехода в данной реализации дается выражением

$$\dot{W}_k = \frac{|V_{nk}|^2}{\hbar^2} \left[\xi(t) e^{i\omega_{kn}t} \int_{-\infty}^t \xi^*(t') e^{-i\omega_{kn}t'} dt' + \text{к.с.} \right]. \quad (20)$$

Усредняя это выражение по реализациям с использованием определения корреляционной функции,

$$B(\tau) = \langle \xi(t) \xi^*(t - \tau) \rangle, \quad (21)$$

получаем

$$\langle \dot{W}_k \rangle = \frac{|V_{nk}|^2}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} B(\tau) e^{i\omega_{kn}\tau} d\tau. \quad (22)$$

Используя связь между корреляционной функцией и спектральной плотностью (*теорема Винера - Хинчина*, [АДЧ81, с.44]),

$$B(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} S(\omega) e^{i\omega\tau} d\omega, \quad (23)$$

представим ответ в виде

$$\boxed{\langle \dot{W}_k \rangle = \frac{2\pi}{\hbar^2} |V_{nk}|^2 S(-\omega_{kn})} \quad (24)$$

Соотношение (24) также называется *золотым правилом Ферми*.

★ **Примером** стационарного шумового поля является тепловое излучение внешнего источника. Форма спектра теплового излучения в модели абсолютно черного тела описывается функцией

$$S_T(\omega) = \frac{15}{2\pi^4} \cdot \frac{\omega^3}{\omega_T^4} (e^{\omega/\omega_T} - 1)^{-1}, \quad (25)$$

где $\omega_T = kT/\hbar$, а T есть температура источника. Солнечному свету соответствуют интенсивность $I_\circ = 0.135 \text{ Вт см}^{-2}$ и характерная частота $\omega_{T_\circ} = 7.6 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$, что дает значения матричного элемента $V_{nk} = ea_0 \sqrt{8\pi I_\circ/c} = 8.53 \cdot 10^{-20} \text{ эрг}$ и спектральной плотности на стандартной частоте $S_{T_\circ}(\omega_s) = 1.38 \cdot 10^{-16} \text{ с}$. В итоге для средней скорости перехода имеем оценку $\langle \dot{W} \rangle = 5.7 \text{ с}^{-1}$.

◆ Формулы (3.8) и (24) служат источником еще одной формы выражения для скорости перехода, часто встречающейся в литературе,

$$\dot{W} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{nk}|^2 \delta(E_n + \hbar\omega - E_k), \quad (26)$$

которую также принято называть золотым правилом Ферми. Правая часть выражения (26) равна либо нулю, либо бесконечности, и не может быть непосредственно соотнесена с результатами измерений. При умножении (26) на плотность состояний $\rho(E)$ и интегрировании по dE из нее получаются формула (3.8), а при умножении (26) на спектральную плотность шумового излучения $S(\omega)$ и интегрировании по $d\omega$ из нее получается формула (24).

Выражение (26) полезно тем, что подчеркивает симметрию случаев «непрерывный частотный спектр системы + дискретный спектр поля» и «дискретный частотный спектр системы + непрерывный спектр поля», и тем, что подчеркивает заложенное в первый порядок теории возмущений представление о резонансном характере переходов.

§ 4.4 Переходы в поле с квазинепрерывным спектром

◆ Модель шумового поля может быть применена и в том случае, когда спектр излучения является *квазинепрерывным*. Таким спектром обладает *многомодовая модель* случайного процесса [АДЧ81, с. 199-214], описывающая суперпозицию гармонических колебаний (мод), амплитуды и фазы которых случайны:

$$\xi(t) = \sum_{n=1}^N a_n \cos(\omega_n t + \varphi_n). \quad (27)$$

В простейшей версии считают, что все амплитуды мод одинаковы, ($a_n \equiv a$), частоты мод эквидистантны ($\omega_n = \omega_0 + n\delta$), а фазы φ_n равномерно распределены на интервале $[0, 2\pi]$.

◆ Введем среднюю величину напряженности поля как ее среднеквадратичное значение, $\bar{\mathcal{E}} = \sqrt{\langle \mathcal{E}^2 \rangle}$; среднюю частоту Раби определим формулой $\bar{\Omega} = d\bar{\mathcal{E}}/\hbar$. Для того, чтобы частотный спектр поля можно было считать непрерывным, должно быть выполнено условие возникновения квазиконтинуума: частота Раби для **одной моды** поля должна быть много больше спектрального расстояния между модами,

$$\Omega_1 = \bar{\Omega} \sqrt{\frac{2}{N}} \gg \delta. \quad (28)$$

При этом скорость перехода может быть описана формулой (24)

$$\langle \dot{W}_{nk} \rangle = \frac{2\pi}{\hbar^2} |V_{nk}|^2 S(-\omega_{kn}) \quad (24)$$

где эффективная спектральная интенсивность есть

$$S(-\omega_{kn}) \approx \frac{1}{N\delta}. \quad (30)$$

Подразумевается, что частота перехода ω_{kn} лежит внутри полосы спектра многомодового излучения.

★ **Пример.** Пусть рабочий переход лазера имеет ширину линии (полосы) $\Delta\omega = 1 \text{ см}^{-1} = 1.88 \cdot 10^{11} \text{ с}^{-1}$. Положим, что генерация идет на всех продольных модах резонатора длиной $L = 50 \text{ см}$ с частотами, лежащими в полосе рабочего перехода. Тогда спектральное расстояние между модами $\delta = \pi c/L = 10^{-2} \text{ см}^{-1} = 1.88 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$ и $N = 100$. Квазиконтинуум возникнет при условии

$$\bar{\mathcal{E}} \gg \frac{\hbar\delta}{d_s} \sqrt{\frac{N}{2}} \equiv \mathcal{E}_{qc}. \quad (31)$$

Для условий нашего примера $\mathcal{E}_{qc} = 5.5 \text{ Гс}$, что соответствует интенсивности излучения $I_{qc} = 7.2 \cdot 10^3 \text{ Вт см}^{-2}$. Скорость перехода $\langle \dot{W} \rangle$ оказывается **много больше** спектрального расстояния между модами: $\langle \dot{W} \rangle \gg \langle \dot{W} \rangle_{qc} \approx 2\pi\delta$.

☆ При заданных значениях средней частоты Раби $\bar{\Omega}$ и межмодовом расстоянии δ найти область значений числа мод N , допускающих применение формулы (24).