ЛЕКЦИЯ #03
НЕСТАЦИОНАРНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ - 2
ЗОЛОТОЕ ПРАВИЛО ФЕРМИ

§ 3.0 Разминка

✧ **P03** Атом водорода в основном состоянии облучается стандартным лазером. Оценить (параметрически и численно) вероятность того, что атом во время действия импульса находится в состояниях непрерывного спектра.

✧ **P04** В экспериментах Бэйфилда и Коха [BK74] при воздействии на атомы водорода в состоянии с $n_0 = 66 \pm 3$ электромагнитного поля с частотой $\omega = 6.2 \cdot 10^{10}\ \text{с}^{-1}$ была обнаружена ионизация, имевшая пороговый по амплитуде поля характер с порогом $\mathcal{E}_c \approx 3.3 \cdot 10^{-2}$ Гс (см. NLD L07±01). Оценить значение параметра β квантовой нестационарной теории возмущений в условиях этого опыта при пороговой амплитуде поля.

§ 3.1 Резонансные переходы

◆ Вероятности переходов между уровнями дискретного спектра под действием гармонического поля даются выражением

$$W_\sigma = \frac{|V_{kn}|^2}{4\hbar^2}\left[\begin{array}{l} \dfrac{1-2\sigma\cos\Sigma t+\sigma^2}{\Sigma^2} + \dfrac{1-2\sigma\cos\Delta t+\sigma^2}{\Delta^2} + \\ +2\dfrac{\cos 2\omega t - \sigma(\cos\Sigma t+\cos\Delta t)+\sigma^2}{\Sigma\Delta} \end{array}\right], \qquad (1)$$

где $\sigma = 0$ или 1 для адиабатического и внезапного включений соответственно. При любой заданной величине напряженности поля неравенство $\beta << 1\beta << 1$ нарушается при $\Delta \to 0$ - в *резонансном случае*. При этом выражением (1) можно пользоваться для случая внезапного включения поля при достаточно малых временах t. При $\Delta << \Omega << \omega$ главным является второй член в (1); при $\Delta t << 1$ получаем

$$W_1 = \frac{\Omega^2}{4} \cdot \frac{2-2\cos\Delta t}{\Delta^2} \approx \frac{\Omega^2}{4} t^2. \qquad (2)$$

Вероятность перехода между уровнями дискретного спектра под действием гармонического возмущения с частотой, близкой к резонансу, квадратично растет со временем.

☆ Почему можно пренебречь первым и третьим членами в (1), хотя при $t \to 0$ их вклады в вероятность перехода имеют примерно ту же величину, что и вклад второго члена?

◆ Современные возможности управления частотой сильного поля невелики. Однако условия резонанса между частотами перехода и поля будут выполнены при любой частоте поля, если конечное состояние принадлежит *непрерывному* спектру или дискретному спектру с большой плотностью уровней - *квазинепрерывному* спектру. Суммарная вероятность перехода в резонансные состояния $W_\Sigma \sim N_r(t)\Omega^2 t^2$, где $N_r(t)$ - число состояний, остающихся в резонансе к моменту t. Если δ - среднее спектральное расстояние между уровнями, то $N_r(t) \sim (\delta t)^{-1}$. В итоге $W_\Sigma \sim \Omega^2\delta^{-1}t$. Скорость перехода в резонансные состояния $\dot{W}_\Sigma \sim \Omega^2\delta^{-1}$ постоянна. Ее расчет будет нашей ближайшей задачей.

§ 3.2 Переходы в непрерывный спектр

◆ Вычислим скорость резонансных переходов в состояния непрерывного спектра в первом порядке теории возмущений. Будем считать ВФ $\varphi_\nu(\vec{r})$ состояний $|\nu\rangle$ непрерывного спектра невозмущенного гамильтониана $\hat{H}_0$ ортонормированными:

$$\int \varphi_\mu^*(\vec{r})\varphi_\nu(\vec{r})d\vec{r} = \delta(\nu-\mu), \qquad (3)$$

где $\delta(z)$ есть дельта-функция Дирака. Измеряемой в эксперименте величиной является *интегральная вероятность* перехода в определенную область $D\nu$ состояний непрерывного спектра. Вычислим ее, приняв адиабатическое включение поля (§2.3) и взяв зависимость возмущения от времени в виде $\hat{V}(t) = \hat{V}e^{-i\omega t}$. Из общей формулы (2.15) находится вероятность перехода в состояние $|\nu\rangle$:

$$W_{n\nu}(t) = \frac{|V_{n\nu}|^2}{\hbar^2}\left|\int_{-\infty}^{t} e^{-i\omega t' + i\omega_{\nu n}t'}dt'\right|^2. \qquad (4)$$

Наблюдаемой является величина

$$W_{nD}(t) = \int_{D\nu} d\nu\, W_{n\nu}(t). \qquad (5)$$

Удобнее вычислять скорость ее изменения - *скорость перехода* в данную область состояний непрерывного спектра:

$$\dot{W}_{nD}(t) = \int_{D\nu} d\nu \frac{|V_{n\nu}|^2}{\hbar^2}\left\{\frac{d}{dt}\left|\int_{-\infty}^{t} e^{-i\omega t' + i\omega_{\nu n}t'}dt'\right|^2\right\}. \qquad (6)$$

Элементарные преобразования выражения в фигурных скобках дают

$$\dot{W}_{nD}(t) = \int\limits_{D\nu} d\nu \frac{|V_{n\nu}|^2}{\hbar^2} 2\pi\delta[\omega(\nu) - \omega_n - \omega]. \tag{7}$$

Величина интеграла определяется значениями матричного элемента возмущения только между резонансными состояниями.

◆ Выбор нормировки ВФ непрерывного спектра (3) неоднозначен: он зависит от выбора индекса ν. Пусть индексом состояний непрерывного спектра является волновой вектор $\vec{k} = \vec{p}/\hbar$ асимптотически свободной частицы. Нормированные ВФ имеют асимптотику

$$\varphi_k(\vec{r}) \approx (2\pi)^{-3/2} \exp(i\vec{k}\vec{r}). \tag{8}$$

Энергия частицы в конечном состоянии зависит только от величины волнового числа $k = |\vec{k}|$, поэтому удобно перейти к сферическим координатам:

$$\dot{W} = \int\limits_{\Omega_0} d\Omega \frac{2\pi}{\hbar^2} |V_{n\vec{k}}|^2 \int k^2 \delta[\omega(k) - \omega - \omega_n] dk. \tag{9}$$

Для частиц конечной массы $\omega(k) = \hbar k^2/2m$, и вычисление внутреннего интеграла дает

$$\int k^2 \delta[\omega(k) - \omega - \omega_n] dk = \sqrt{2\omega_k} \left(\frac{m}{\hbar}\right)^{3/2}, \tag{10}$$

где величина ω_k пропорциональна энергии системы в конечном состоянии: $\omega_k = \omega + \omega_n = \hbar^{-1} E_k$. Для скорости перехода в состояния с направлениями импульсов (асимптотически свободной частицы), лежащих внутри телесного угла $d\Omega$, получаем

$$\dot{W} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{n\vec{k}}|^2 \left[\sqrt{2E_k} \left(\frac{m}{\hbar^2}\right)^{3/2} d\Omega \right]. \tag{11}$$

Часто используют нормировку $\varphi_k(\vec{r}) \approx \exp(i\vec{k}\vec{r})$, а множитель $(2\pi)^{-3}$ присоединяют к стоящему в квадратных скобках выражению, которое называют *плотностью* конечных *состояний*:

$$\rho(E) = \frac{\sqrt{2E}}{(2\pi)^3} \cdot \left(\frac{m}{\hbar^2}\right)^{3/2} d\Omega. \tag{12}$$

Выражение для скорости перехода принимает вид

$$\boxed{\dot{W} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{n\vec{k}}|^2 \rho(E_k)} \tag{13}$$

Это соотношение называется *золотым правилом Ферми* (ЗПФ); мы будем ссылаться на него как на GR_1.

◆ Выражение (GR_1) получено в первом порядке теории возмущений - в предположении, что населенность начального состояния $w_n = |a_n|^2$ остается неизменной, $w_n \equiv 1$. Более последовательное описание должно учитывать изменение населенности основного состояния. Скорость перехода в состояния непрерывного спектра пропорциональна населенности начального состояния. Считая скорость перехода малой, можно записать *балансное уравнение*

$$\frac{dw_n}{dt} = -\dot{W} w_n. \tag{14}$$

Решение этого уравнения с начальным условием $w_n(0) = 1$ есть

$$w_n(t) = \exp\left(-\dot{W}t\right). \tag{15}$$

При переходах в непрерывный спектр под действием монохроматического поля населенность начального состояния убывает со временем по экспоненциальному закону.

☆ По сравнению с чем должна быть мала скорость перехода $\dot{W}$ для применимости балансного уравнения (14)?

★ Заметим, что решение (15) показывает, что при учете необратимого процесса перехода в непрерывный спектр начальное состояние (дискретного спектра) из стационарного превращается в квазистационарное, не имеющее **точно** определенной энергии - а потому позволяющее резонансные переходы в **полосу** конечной ширины. Этот эффект, носящий в теории ионизации название *ионизационного уширения уровней*, и связанные с ним поправки к скорости перехода мы рассмотрим позже.

§ 3.3 Однофотонная ионизация

◆ В качестве физического 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 (2.5)):

$$\hat{V}(t) = \frac{e\vec{E}}{m\omega}\hat{\vec{p}}\sin\omega t \approx \frac{e\vec{E}}{2m\omega}\hat{\vec{p}}e^{-i\omega t}. \tag{16}$$

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

$$\varphi_n(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-r}. \tag{17}$$

ВФ конечного состояния возьмем в виде ВФ свободной частицы:

$$\varphi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}. \tag{18}$$

★ В кулоновском поле это *борновское приближение* (18) применимо, если скорость электрона v в конечном состоянии удовлетворяет неравенствам $\alpha c << v << c$ [ЛЛIII, §45] и, следовательно, $k >> 1$. 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 (ψ - угол между направлениями $\vec{E}$ и $\vec{k}$)

$$V_{nk} = \frac{\mathcal{E}k}{2\sqrt{\pi\omega}}\cos\psi\int d\vec{r}e^{i\vec{k}\vec{r}-r} \tag{19}$$

при больших k имеет асимптотику

$$V_{nk} \approx 4\sqrt{\pi}\frac{\mathcal{E}}{\omega k^3}\cos\psi. \tag{20}$$

Подстановка этого выражения в (11) дает

$$\dot{W} = 2\pi\left(16\pi\frac{\mathcal{E}^2}{\omega^2 k^6}\cos^2\psi\right)\frac{\sqrt{2E_k}}{8\pi^3}d\Omega. \tag{21}$$

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

$$\dot{W} = \frac{2\sqrt{2}}{3}\omega_0\left(\frac{\mathcal{E}}{\mathcal{E}_a}\right)^2\left(\frac{\omega_a}{\omega}\right)^{9/2} \sim \omega_0\xi^2\eta^{-9/2}. \tag{22}$$

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

$$\sigma = \frac{\dot{W}}{J} = \frac{8\pi\hbar\omega}{c\mathcal{E}^2}\dot{W}. \tag{23}$$

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

$$\boxed{\sigma_i(\omega) = \frac{16\sqrt{2}\pi}{3}\alpha a_0^2\left(\frac{\omega_a}{\omega}\right)^{7/2} \sim \alpha a_0^2\eta^{-7/2}}. \tag{24}$$

★ 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 (24) множитель

$$F(\omega) = \sqrt{2}\pi\left(\frac{\omega_a}{\omega}\right)^{1/2}\frac{\exp(-4\vartheta\,\mathrm{arcctg}\vartheta)}{1-\exp(-2\pi\vartheta)} \tag{25}$$

где

$$\vartheta = (2\omega/\omega_a - 1)^{-1/2}. \tag{26}$$

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

$$\sigma_i(\omega_a/2) = \frac{512\pi^2}{3}\exp(-4)\cdot\alpha a_0^2 = 30.85\ \alpha a_0^2 = 6.3\cdot 10^{-18}\ \text{см}^2. \qquad (27)$$

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 сечение ионизации в модели потенциала нулевого радиуса:

$$\varphi_n(\vec{r}) = \sqrt{\frac{\kappa}{2\pi}}\frac{e^{-\kappa r}}{r}, \quad \varphi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}. \qquad (28)$$

Такая модель описывает фотоионизацию (фоторасщепление) системы с **единственным** связанным состоянием с энергией связи $E_0 = \hbar^2\kappa^2/2m$. Ее можно применить к отрицательному иону водорода H_1^- $(E_0 = 0.7\ \text{эВ})$ или к дейтрону $(E_0 = 2.2\ \text{МэВ})$. Слабость потенциала позволяет заменять ВФ конечного состояния плоской волной при **любых** E_k. Построить график $\sigma(E_k)$ и оценить максимальную величину сечения.

EOL ☯