

и его решение, удовлетворяющее граничным условиям: $f = -ir^2/2\kappa$. Вычисление по формуле (1) приводит к результату:

$$\alpha = \frac{me^2}{4\hbar^2\kappa^4}.$$

§ 77. Атом водорода в электрическом поле

Уровни атома водорода, в отличие от уровней других атомов, в однородном электрическом поле испытывают расщепление, пропорциональное первой степени поля (*линейный эффект Штарка*). Это связано с наличием у водородных термов случайного вырождения, в силу которого состояния с различными значениями l (при заданном главном квантовом числе n) обладают одинаковыми энергиями. Матричные элементы дипольного момента для переходов между этими состояниями отнюдь не равны нулю, а потому секулярное уравнение дает уже в первом приближении отличное от нуля смещение уровней¹⁾.

Для вычисления удобно выбрать невозмущенные волновые функции таким образом, чтобы матрица возмущения была диагональна по отношению к каждой группе взаимно вырожденных состояний. Оказывается, что это осуществляется путем квантования атома водорода в параболических координатах. Волновые функции $\psi_{n,n_z,m}$ стационарных состояний атома водорода в параболических координатах определяются формулами (37,15), (37,16).

Оператор возмущения (энергия электрона в поле \mathcal{E}) есть $\mathcal{E}z = \mathcal{E}(\xi - \eta)/2$ (поле направлено в положительном, а действующая на электрон сила — в отрицательном направлении оси z)²⁾. Нас интересуют матричные элементы для переходов $n_1 n_2 m \rightarrow n'_1 n'_2 m'$, при которых энергия (т. е. главное квантовое число n) не меняется. Легко видеть, что из них оказываются отличными от нуля только диагональные матричные элементы

$$\begin{aligned} \int |\psi_{n_1 n_2 m}|^2 \mathcal{E}z dV &= \frac{\mathcal{E}}{8} \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^{2\pi} (\xi^2 - \eta^2) |\psi_{n_1 n_2 m}|^2 d\varphi d\xi d\eta = \\ &= \frac{\mathcal{E}}{4} \int_0^\infty \int_0^\infty f_{n_1 m}^2(\rho_1) f_{n_2 m}^2(\rho_2) (\rho_1^2 - \rho_2^2) d\rho_1 d\rho_2 \quad (77,1) \end{aligned}$$

¹⁾ В нижеследующих вычислениях мы не учитываем тонкой структуры водородных уровней. Поэтому поле должно быть хотя и не сильным (условие применимости теории возмущений), но в то же время таким, чтобы штарковское расщепление было велико по сравнению с тонкой структурой. Обратный случай — см. задачу 1 в IV, § 52.

²⁾ В этом параграфе мы пользуемся атомными единицами.

(мы произвели подстановку $\xi = nr_1$, $\eta = nr_2$). В отношении числа m диагональность рассматриваемой матрицы очевидна; что касается чисел n_1 , n_2 , то диагональность по отношению к ним следует из взаимной ортогональности функций $f_{n_1 m}$ с различными n_1 и одинаковыми m (см. ниже). Интегрирования по dr_1 и по dr_2 в (77,1) разделяются; получающиеся интегралы вычислены в § 1 математического дополнения (интеграл (f, 6)). После простого вычисления получим в результате для поправки первого приближения к уровням энергии ¹⁾

$$E^{(1)} = \frac{3}{2} \mathcal{E} n (n_1 - n_2) \quad (77,2)$$

или в обычных единицах

$$E^{(1)} = \frac{3}{2} n (n_1 - n_2) |e| \mathcal{E} \frac{\hbar^2}{me^2}.$$

Две крайние компоненты расщепившегося уровня соответствуют $n_1 = n - 1$, $n_2 = 0$ и $n_1 = 0$, $n_2 = n - 1$. Расстояние между этими двумя крайними уровнями есть, согласно (77,2),

$$3\mathcal{E} n (n - 1),$$

т. е. общее расщепление уровня при эффекте Штарка примерно пропорционально n^2 . Увеличение расщепления с главным квантовым числом естественно: чем дальше от ядра находятся электроны, тем больше дипольный момент атома.

Наличие линейного эффекта означает, что в невозмущенном состоянии атом обладает дипольным моментом со средним значением

$$d_z = - \frac{3}{2} n (n_1 - n_2). \quad (77,3)$$

Это находится в согласии с тем, что в состоянии, определяемом параболическими квантовыми числами, распределение зарядов в атоме не симметрично относительно плоскости $z = 0$ (см. § 37). Так, при $n_1 > n_2$ электрон находится преимущественно на стороне положительных z , а потому дипольный момент атома противоположен внешнему полю (заряд электрона отрицателен!).

В предыдущем параграфе было указано, что снятие вырождения однородным электрическим полем не может быть полным — остается во всяком случае двукратное вырождение состояний, отличающихся знаком проекции момента на направление поля (в данном случае — состояний с проекциями момента, равными $\pm m$). Однако из формулы (77,2) видно, что в линейном штарк-эффекте у водорода даже такое снятие вырождения не дости-

¹⁾ Этот результат был получен Шварцшильдом и Эпштейном (K. Schwarzschild, P. Epstein, 1916) на основании старой квантовой теории и Паули и Шредингером (1926) с помощью квантовой механики.

гается, — смещение уровней (при данных n и $n_1 - n_2$) вообще не зависит от m и n_2 . Дальнейшее снятие вырождения происходит в эффекте второго приближения; вычисление этого эффекта представляет интерес тем более, что в состояниях с $n_1 = n_2$ линейный эффект Штарка вообще отсутствует.

Для вычисления квадратичного эффекта неудобно пользоваться обычной теорией возмущений, так как при этом пришлось бы иметь дело с бесконечными суммами сложного вида. Вместо этого воспользуемся следующим несколько видоизмененным методом.

Уравнение Шредингера для атома водорода в однородном электрическом поле имеет вид

$$\left(\frac{1}{2}\Delta + E + \frac{1}{r} - \mathcal{E}z\right)\psi = 0.$$

Как и уравнение с $\mathcal{E} = 0$, оно допускает разделение переменных в параболических координатах. Та же подстановка (37,7), что и в § 37, приводит к двум уравнениям

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\xi} \left(\xi \frac{df_1}{d\xi} \right) + \left(\frac{E}{2} \xi - \frac{m^2}{4\xi} - \frac{\mathcal{E}}{4} \xi^2 \right) f_1 &= -\beta_1 f_1, \quad \beta_1 + \beta_2 = 1, \\ \frac{d}{d\eta} \left(\eta \frac{df_2}{d\eta} \right) + \left(\frac{E}{2} \eta - \frac{m^2}{4\eta} + \frac{\mathcal{E}}{4} \eta^2 \right) f_2 &= -\beta_2 f_2, \end{aligned} \quad (77,4)$$

отличающимся от (37,8) наличием членов с \mathcal{E} . Будем рассматривать в этих уравнениях энергию E как параметр, имеющий данное определенное значение, а величины β_1, β_2 — как собственные значения соответствующих операторов (легко убедиться в том, что эти операторы самосопряженные). Эти величины определяются при решении уравнений как функции от E и \mathcal{E} , после чего условие $\beta_1 + \beta_2 = 1$ определит энергию как функцию внешнего поля.

При приближенном решении уравнений (77,4) рассматриваем члены, содержащие поле \mathcal{E} , как малое возмущение. В нулевом приближении ($\mathcal{E} = 0$) уравнения имеют известные уже нам решения

$$f_1 = \sqrt{\varepsilon} f_{n_1 m}(\xi \varepsilon), \quad f_2 = \sqrt{\varepsilon} f_{n_2 m}(\eta \varepsilon), \quad (77,5)$$

где функции $f_{n,m}$ те же, что в (37,16), а вместо энергии введен параметр

$$\varepsilon = \sqrt{-2E}. \quad (77,6)$$

Соответствующими значениями величин β_1, β_2 (согласно равенствам (37,12), в которых надо заменить n на $1/\varepsilon$) будут

$$\beta_1^{(0)} = \left(n_1 + \frac{|m|+1}{2} \right) \varepsilon, \quad \beta_2^{(0)} = \left(n_2 + \frac{|m|+1}{2} \right) \varepsilon. \quad (77,7)$$

Функции f_1 с различными значениями n_1 при заданном ε взаимно ортогональны, как собственные функции всякого самосопряжен-

ного оператора (мы пользовались уже этим фактом выше при рассмотрении линейного эффекта); в (77,5) они нормированы условиями

$$\int_0^{\infty} f_1^2 d\xi = 1, \quad \int_0^{\infty} f_2^2 d\eta = 1.$$

Поправки первого приближения для β_1 и β_2 определяются диагональными матричными элементами возмущения

$$\beta_1^{(1)} = \frac{\mathcal{E}}{4} \int_0^{\infty} \xi^2 f_1^2 d\xi, \quad \beta_2^{(1)} = -\frac{\mathcal{E}}{4} \int_0^{\infty} \eta^2 f_2^2 d\eta.$$

Вычисление дает

$$\beta_1^{(1)} = \frac{\mathcal{E}}{4e^2} (6n_1^2 + 6n_1 |m| + m^2 + 6n_1 + 3|m| + 2).$$

Выражение для $\beta_2^{(1)}$ отличается заменой n_1 на n_2 и переменной знака.

Во втором приближении имеем, согласно общим формулам теории возмущений,

$$\beta_1^{(2)} = \frac{\mathcal{E}^2}{16} \sum_{n'_1 \neq n_1} \frac{|(\xi^2)_{n_1 n'_1}|^2}{\beta_1^{(0)}(n_1) - \beta_1^{(0)}(n'_1)}.$$

Интегралы, входящие в матричные элементы $(\xi^2)_{n_1 n'_1}$, вычислены в § I математического дополнения. Отличны от нуля только элементы

$$(\xi^2)_{n_1, n_1-1} = (\xi^2)_{n_1-1, n_1} = -\frac{2}{e^2} (2n_1 + |m|) \sqrt{n_1(n_1 + |m|)},$$

$$(\xi^2)_{n_1, n_1-2} = (\xi^2)_{n_1-2, n_1} = \frac{1}{e^2} \sqrt{n_1(n_1-1)(n_1 + |m|)(n_1 + |m| - 1)}.$$

Стоящие в знаменателях разности равны

$$\beta_1^{(0)}(n_1) - \beta_1^{(0)}(n'_1) = e(n_1 - n'_1).$$

В результате вычисления получается

$$\beta_1^{(2)} = -\frac{\mathcal{E}^2}{16e^5} (|m| + 2n_1 + 1) [4m^2 + 17(2|m|n_1 + \\ + 2n_1^2 + |m| + 2n_1) + 18]$$

(выражение для $\beta_2^{(2)}$ отличается заменой n_1 на n_2). Собирая полученные выражения и подставляя в соотношение $\beta_1 + \beta_2 = 1$, получим уравнение

$$en - \frac{\mathcal{E}^2 n}{16e^5} [17n^2 + 51(n_1 - n_2)^2 - 9m^2 + 19] + \\ + \frac{3}{2} \mathcal{E} \frac{n}{e^3} (n_1 - n_2) = 1.$$

Решая его последовательными приближениями, получим во втором приближении для энергии $E = -\frac{\mathcal{E}^2}{2}$ выражение

$$E = -\frac{1}{2n^2} + \frac{3}{2} \mathcal{E} n (n_1 - n_2) - \frac{\mathcal{E}^2}{16} n^4 [17n^2 - 3(n_1 - n_2)^2 - 9m^2 + 19]. \quad (77,8)$$

Второй член представляет собой известный уже нам линейный эффект Штарка, а третий — искомый квадратичный эффект (G. Wentzel, I. Waller, P. Epstein, 1926). Отметим, что эта величина всегда отрицательна, т. е. благодаря квадратичному эффекту термы всегда смещаются вниз. Среднее значение дипольного момента получается дифференцированием (77,8) по полю; в состояниях с $n_1 = n_2$ оно равно

$$d_z = \frac{n^4}{8} (17n^2 - 9m^2 + 19) \mathcal{E}. \quad (77,9)$$

Так, поляризуемость атома водорода в нормальном состоянии ($n = 1, m = 0$) равна $9/2$ (см. также задачу 4 § 76).

Абсолютное значение энергии водородных термов быстро падает с увеличением главного квантового числа n , а штарковское расщепление возрастает. В связи с этим представляет интерес рассмотрение штарк-эффекта сильно возбужденных уровней в полях настолько сильных, что произведенное ими расщепление сравнимо по величине с энергией самого уровня и потому теория возмущений неприменима¹⁾: Это можно сделать, воспользовавшись квазиклассичностью состояний с большими значениями n .

Подстановкой

$$f_1 = \frac{\chi_1}{\sqrt{\xi}}, \quad f_2 = \frac{\chi_2}{\sqrt{\eta}} \quad (77,10)$$

уравнения (77,4) приводятся к виду

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \chi_1}{d\xi^2} + \left(\frac{E}{2} + \frac{\beta_1}{\xi} - \frac{m^2 - 1}{4\xi^2} - \frac{\mathcal{E}}{4} \xi \right) \chi_1 &= 0, \\ \frac{d^2 \chi_2}{d\eta^2} + \left(\frac{E}{2} + \frac{\beta_2}{\eta} - \frac{m^2 - 1}{4\eta^2} + \frac{\mathcal{E}}{4} \eta \right) \chi_2 &= 0. \end{aligned} \quad (77,11)$$

Но каждое из этих уравнений имеет вид одномерного уравнения Шредингера, причем роль полной энергии частицы играет $E/4$,

¹⁾ Применимость теории возмущений к высоким уровням требует малости возмущения лишь по сравнению с энергией самого уровня (энергией связи электрона), а не с интервалами между уровнями. Действительно, в квазиклассическом случае (который как раз представляют сильно возбужденные состояния) возмущение может считаться малым, если вызываемая им сила мала по сравнению с силами, действующими на частицу в невозмущенной системе; но это условие эквивалентно указанному выше.

а роль потенциальной энергии — соответственно функции

$$U_1(\xi) = -\frac{\beta_1}{2\xi} + \frac{m^2 - 1}{8\xi^2} + \frac{\mathcal{E}}{8}\xi, \quad (77,12)$$

$$U_2(\eta) = -\frac{\beta_2}{2\eta} + \frac{m^2 - 1}{8\eta^2} - \frac{\mathcal{E}}{8}\eta.$$

На рис. 25 и 26 изображен примерный вид этих функций (для $m > 1$). Согласно правилу квантования Бора—Зоммерфельда (48,2) пишем

$$\int_{\xi_1}^{\xi_2} \sqrt{2 \left[\frac{E}{4} - U_1(\xi) \right]} d\xi = \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) \pi, \quad (77,13)$$

$$\int_{\eta_1}^{\eta_2} \sqrt{2 \left[\frac{E}{4} - U_2(\eta) \right]} d\eta = \left(n_2 + \frac{1}{2} \right) \pi$$

(n_1, n_2 — целые числа)¹⁾. Эти уравнения определяют в неявном виде зависимость параметров β_1, β_2 от E . Вместе с равенством $\beta_1 + \beta_2 = 1$ они определяют, следовательно, энергии смещенных

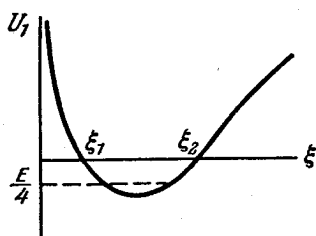


Рис. 25

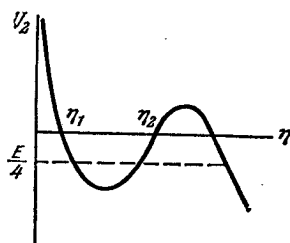


Рис. 26

электрическим полем уровней. Интегралы в уравнениях (77,13) могут быть приведены к эллиптическим; решение этих уравнений возможно лишь в численном виде.

Штарк-эффект в сильных полях осложняется еще и другим явлением — ионизацией атома электрическим полем (С. Lanczos, 1931). Потенциальная энергия электрона во внешнем поле $\mathcal{E}z$ принимает при $z \rightarrow -\infty$ сколь угодно большие отрицательные значения. Накладываясь на потенциальную энергию электрона внутри атома, она приводит к тому, что область возможного движения электрона (полная энергия E которого отрицательна) становится, наряду с областью внутри атома, также и область больших расстояний от ядра по направлению к аноду. Эти две области разделены потенциальным барьером, ширина которого

¹⁾ Подробное исследование показывает, что более точный результат получается, если писать m^2 вместо $m^2 - 1$ в выражениях для U_1, U_2 . Целые числа n_1, n_2 совпадают тогда с параболическими квантовыми числами.

уменьшается с увеличением поля. Но в квантовой механике всегда существует некоторая отличная от нуля вероятность частице пройти через потенциальный барьер. В данном случае выход электрона из области внутри атома через барьер наружу представляет собой не что иное, как ионизацию атома. В слабых полях вероятность такой ионизации исчезающе мала. Она, однако, экспоненциально растет с полем и в достаточно сильных полях становится значительной¹⁾.

Задачи

1. Определить вероятность (в единицу времени) ионизации атома водорода (в основном состоянии) в электрическом поле, удовлетворяющем условию $\mathcal{E} \ll 1$ ($\mathcal{E} \ll m^2 |e| \hbar^2$ в обычных единицах).

Решение²⁾. В параболических координатах потенциальный барьер имеется «вдоль координаты η » (рис. 26); вытягиванию электрона из атома в направлении $x \rightarrow -\infty$ соответствует его переход в область больших η . Для определения вероятности ионизации надо исследовать вид волновой функции при больших η (и небольших ξ ; мы увидим ниже, что в интеграле, определяющем полный поток вероятности выходящего электрона, играют роль малые ξ). Волновая функция электрона в нормальном состоянии (в отсутствие поля) есть

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{\xi+\eta}{2}}. \quad (1)$$

При наличии поля зависимость ψ от ξ в интересующей нас области можно считать той же, что в (1), а для определения зависимости от η имеем уравнение

$$\frac{\partial^2 \chi}{\partial \eta^2} + \left(-\frac{1}{4} + \frac{1}{2\eta} + \frac{1}{4\eta^2} + \frac{\mathcal{E}\eta}{4} \right) \chi = 0, \quad (2)$$

где $\chi = \sqrt{\eta} \psi$ (это — второе из уравнений (77,11), в котором положено $E = -1/2$, $m = 0$, $\beta_2 = 1/2$). Пусть η_0 — некоторое значение η (расположенное внутри барьера) такое, что $1 \ll \eta_0 \ll 1/\mathcal{E}$. При $\eta \geq \eta_0$ волновая функция квазиклассична. Поскольку, с другой стороны, уравнение (2) имеет вид одномерного

¹⁾ Описываемое явление может служить иллюстрацией того, как малое возмущение может изменить характер энергетического спектра. Уже слабое поле \mathcal{E} достаточно для того, чтобы создать потенциальный барьер и сделать область вдали от ядра принципиально доступной для электрона. В результате движение электрона становится, строго говоря, инфинитным, и потому энергетический спектр из дискретного превращается в непрерывный. Тем не менее формальное решение, получаемое по методу теории возмущений, имеет физический смысл: оно определяет уровни состояний, которые если и не вполне, то «почти стационарны». Атом, находящийся в таком состоянии в некоторый начальный момент времени, останется в нем в течение длительного промежутка времени.

В то же время весь ряд теории возмущений для штарковского расщепления уровней не может быть сходящимся в строгом смысле слова, а является лишь асимптотическим: начиная с определенного места в ряде (тем более далекого, чем меньше величина возмущения) дальнейшие его члены возрастают, а не убывают.

²⁾ В этой задаче пользуемся атомными единицами.

уравнения Шредингера, то можно воспользоваться формулами (50,2). Потребовав, в качестве граничного условия, совпадения ψ с волновой функцией (1) при $\eta = \eta_0$, получим в области вне барьера выражение

$$\chi = \left(\frac{\eta_0 |\rho_0|}{\pi \rho} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{\xi + \eta_0}{2} + i \int_{\eta_0}^{\eta} \rho d\eta + \frac{i\pi}{4} \right),$$

где

$$\rho(\eta) = \sqrt{-\frac{1}{4} + \frac{1}{2\eta} + \frac{1}{4\eta^2} + \frac{\mathcal{E}\eta}{4}}.$$

Нас интересует ниже только квадрат $|\chi|^2$. Поэтому мнимая часть экспоненты несущественна. Обозначив посредством η_1 корень уравнения $\rho(\eta) = 0$, имеем

$$|\chi|^2 = \frac{\eta_0 |\rho_0|}{\pi \rho} \exp \left(-\xi - 2 \int_{\eta_0}^{\eta_1} |\rho| d\eta - \eta_0 \right). \quad (3)$$

В предэкспоненциальном множителе полагаем при $\eta \gg 1$

$$|\rho_0| \approx \frac{1}{2}, \quad \rho \approx \frac{1}{2} \sqrt{\mathcal{E}\eta - 1};$$

в экспоненте же надо сохранить также и следующий член разложения функции $\rho(\eta)$:

$$|\chi|^2 = \frac{\eta_0}{\pi \sqrt{\mathcal{E}\eta - 1}} \exp \left(-\xi - \int_{\eta_0}^{\eta_1} \sqrt{1 - \mathcal{E}\eta} d\eta + \int_{\eta_0}^{\eta_1} \frac{d\eta}{\eta \sqrt{1 - \mathcal{E}\eta}} - \eta_0 \right),$$

причем $\eta_1 = 1/\mathcal{E}$. Произведя интегрирование и пренебрегая везде, где это возможно, $\eta_0 \mathcal{E}$ по сравнению с единицей, получим

$$|\chi|^2 = \frac{4}{\pi \mathcal{E} \sqrt{\mathcal{E}\eta - 1}} \exp \left(-\xi - \frac{2}{3\mathcal{E}} \right). \quad (4)$$

Полный поток вероятности через плоскость, перпендикулярную к оси z , т. е. искомая вероятность ионизации ω , есть

$$\omega = \int_0^{\infty} |\chi|^2 v_2 2\pi \rho d\rho$$

(ρ — цилиндрический радиус в указанной плоскости). При больших η и малых ξ можно положить

$$d\rho = d \sqrt{\xi\eta} \approx \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\eta}{\xi}} d\xi.$$

Подставив также для скорости электрона

$$v_2 \approx \sqrt{2 \left(-\frac{1}{2} + \frac{\mathcal{E}\eta}{2} \right)} = \sqrt{\mathcal{E}\eta - 1},$$

получим

$$\omega = \int_0^{\infty} |\chi|^2 \pi \sqrt{\mathcal{E}\eta - 1} d\xi,$$

откуда окончательно

$$\omega = \frac{4}{\mathcal{E}} \exp\left(-\frac{2}{3\mathcal{E}}\right) \quad (5)$$

или, в обычных единицах,

$$\omega = \frac{4m^3 |e|^9}{\mathcal{E} \hbar^7} \exp\left(-\frac{2m^2 |e|^5}{3\mathcal{E} \hbar^4}\right).$$

2. Определить вероятность вырывания электрона электрическим полем из потенциальной ямы короткодействующих сил, в которой электрон находится в связанном s -состоянии. Электрическое поле предполагается слабым в том смысле, что $|e| \mathcal{E} \ll \hbar^2 \kappa^3 / m$, где $\kappa = \sqrt{2m|E|/\hbar}$, $|E|$ — энергия связи электрона в яме, m — его масса (Ю. Н. Демков, Г. Ф. Друкарев, 1964).

Решение. Как и в задаче 1, в случае слабого электрического поля существенны большие расстояния от центра ($\kappa r \gg 1$). На этих расстояниях волновая функция связанного состояния электрона в яме (без поля \mathcal{E}) имеет асимптотический вид

$$\psi = \frac{A \sqrt{\kappa}}{r} e^{-\kappa r},$$

где A — безразмерная постоянная, зависящая от конкретного вида ямы¹⁾. В параболических координатах имеем $r = (\xi + \eta)/2$, и в области $\eta \gg \xi$ волновая функция принимает вид

$$\psi \approx \frac{2A \sqrt{\kappa}}{\eta} \exp\left[-\frac{\kappa}{2}(\xi + \eta)\right]. \quad (6)$$

Ниже в этой задаче массы, длины и времена будут измеряться соответственно в единицах m , $1/\kappa$ и $m/\hbar \kappa^2$.

Функция (6) распадается на произведение функций от ξ и η . При наличии электрического поля зависимость ψ от ξ можно считать (как и в задаче 1) той же, что и в (6). Для определения же ее зависимости от η обращаемся к уравнению Шредингера в параболических координатах. При этом (в отличие от случая кулонова поля), ввиду быстрого убывания поля ямы, на существенных для задачи больших расстояниях этим полем можно вообще пренебречь. Разделение переменных в уравнении Шредингера приводит тогда снова к уравнениям (77,11), в которых надо положить $E = -1/2$, $m = 0$, а параметры разделения удовлетворяют теперь условию

$$\beta_1 + \beta_2 = 0.$$

Параметр β_1 надо положить равным $1/2$ (так, чтобы зависимость $\psi \sim e^{-\xi/2}$ удовлетворяла первому из уравнений (77,11) — приближенно, при малых $\xi \mathcal{E}$); тогда $\beta_2 = -1/2$ и для определения зависимости ψ от η имеем уравнение

$$\frac{\partial^2 \chi}{\partial \eta^2} + \left(-\frac{1}{4} - \frac{1}{2\eta} + \frac{1}{4\eta^2} + \frac{\mathcal{E}}{4} \eta\right) \chi = 0, \quad \chi = \psi \sqrt{\eta}.$$

Решая его так же, как решалось уравнение (2), получим теперь вместо (3)

$$|\chi|^2 = \frac{4A^2 |\rho_0|}{\eta_0 \rho} \exp\left(-\xi - 2 \int_{\eta_0}^{\eta_1} |\rho| d\eta - \eta_0\right),$$

причем

$$\rho(\eta) = \sqrt{-\frac{1}{4} - \frac{1}{2\eta} + \frac{1}{4\eta^2} + \frac{\mathcal{E}\eta}{4}}.$$

¹⁾ Так, если радиус ямы a настолько мал, что $a\kappa \ll 1$, то $A = (2\pi)^{-1/2}$; см. подробнее в § 133.

Далее, вместо (4) получается

$$|\chi|^2 = \frac{A^2 \mathcal{E}}{\sqrt{\mathcal{E}\eta - 1}} \exp\left(-\xi - \frac{2}{3\mathcal{E}}\right),$$

и, наконец, вместо (5)

$$\omega = \pi A^2 \mathcal{E} \exp\left(-\frac{2}{3\mathcal{E}}\right)$$

или, в обычных единицах,

$$\omega = \frac{\pi |e| \mathcal{E} A^2}{\hbar \kappa} \exp\left(-\frac{2\hbar^2 \kappa^3}{3m |e| \mathcal{E}}\right).$$

3. Оценить с экспоненциальной точностью вероятность вырывания электрона из потенциальной ямы под действием однородного переменного электрического поля $\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 \cos \omega t$; предполагается, что частота и амплитуда поля удовлетворяют условиям

$$\hbar \omega \ll |E|, \quad |e| \mathcal{E}_0 \ll \hbar^2 \kappa^3 / m,$$

где $\kappa = \sqrt{2m|E|}/\hbar$, $|E|$ — энергия связи электрона в яме (Л. В. Келдыш, 1964)¹⁾.

Решение. При поставленных условиях вероятность вырывания ω экспоненциально мала. Для вычисления одного лишь показателя экспоненты (без предэкспоненциального множителя) достаточно рассматривать движение как одномерное — в направлении поля, ось z .

Здесь будет удобным описывать электрическое поле не скалярным, а векторным потенциалом: $A_z = A = -(c\mathcal{E}_0/\omega) \sin \omega t$. Тогда гамильтониан электрона в области вне ямы примет вид

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(-\hbar \frac{\partial}{\partial z} + \frac{|e| \mathcal{E}_0}{\omega} \sin \omega t \right)^2$$

(см. ниже (111,3)) и не содержит координаты z . Введя безразмерные переменные и безразмерные параметры

$$\tau = \frac{\hbar \kappa^2}{2m} t, \quad \eta = 2\kappa z, \quad \Omega = \frac{2m\omega}{\hbar \kappa^2} = \frac{\hbar \omega}{|E|}, \quad F = \frac{|e| m \mathcal{E}_0}{\hbar^2 \kappa^3},$$

напишем уравнение Шредингера в виде

$$\frac{i}{4} \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = - \left(\frac{\partial}{\partial \eta} + \frac{iF}{\Omega} \sin \Omega \tau \right)^2 \Psi.$$

Граничное условие к этому уравнению состоит в требовании, чтобы при $\eta \rightarrow 0$ его решение $\Psi(\eta, \tau)$ совпадало с невозмущенной полем волновой функцией электрона (с энергией $E = -|E|$) в яме:

$$\Psi \rightarrow e^{i\tau} \quad \text{при} \quad \eta \rightarrow 0. \quad (7)$$

Ввиду квазиклассичности задачи ищем решение (с экспоненциальной точностью) в виде $\Psi = \exp iS$, где $S(\eta, \tau)$ — классическое действие. Так как гамильтониан не зависит от координаты η , обобщенный импульс $p_\eta = p$ сохраняется вдоль классической траектории, так что

$$S = - \int_{\tau_0}^{\tau} H(p, \tau') d\tau' + \eta p + A, \quad H(p, \tau) = 4 \left(p + \frac{F}{\Omega} \sin \Omega \tau \right)^2, \quad (8)$$

¹⁾ Речь может идти, например, об ионизации однозарядного отрицательного иона сильной световой волной; потенциальная яма создается в этом случае взаимодействием электрона с нейтральным атомным остатком. Условие $\hbar \omega \ll |E|$ обеспечивает при этом допустимость классического рассмотрения поля электромагнитной волны.

где A , τ_0 — постоянные. При этом, по смыслу действия как функции координат (см. I, § 43), надо под ρ понимать значение, приводящее траекторию в заданную точку η в момент τ , т. е. считать ρ функцией от η и τ , определяемой уравнением движения $\partial S/\partial \rho = \text{const}$, т. е.

$$\eta = \int_{\tau_0}^{\tau} \frac{\partial H(\rho, \tau')}{\partial \rho} d\tau' \quad (9)$$

(постоянная выбрана так, что $\eta = 0$ при $\tau = \tau_0$). Формулы (8), (9) дают действие, зависящее от двух постоянных: τ_0 и A . Чтобы получить решение, удовлетворяющее условию (1), надо (как при нахождении общего интеграла уравнения Гамильтона—Якоби — см. I, § 47, примечание на стр. 191) считать A функцией от τ_0 , а τ_0 — функцией координаты и времени, определяемой условием

$$\frac{\partial S}{\partial \tau_0} = 0. \quad (10)$$

Очевидно, что надо положить $A(\tau_0) = \tau_0$; тогда при $\eta = 0$ вместе с $\tau = \tau_0$ будет и $S = \tau_0$, т. е. $S = \tau$ в согласии с условием (7). Равенство (10) теперь переписывается как

$$H(\rho, \tau_0) + 1 = 0. \quad (11)$$

Уравнения (9) и (11) совместно определяют функции $\tau_0(\eta, \tau)$ и $\rho(\eta, \tau)$, а тем самым (после подстановки в (8)) и волновую функцию $\Psi(\eta, \tau)$.

Искомая вероятность w пропорциональна плотности потока вдоль оси z . В классически доступной области эта плотность есть $v_z |\Psi|^2$. Начало этой области определяется точкой, где перестает возрастать $\text{Im } S$. В этой точке $(\partial \text{Im } S/\partial \eta)_{\tau} = 0$, а поскольку $\partial S/\partial \eta = \rho$, то $\text{Im } \rho = 0$; из (9), (11) следует тогда, что здесь же и $\text{Re } \rho = 0$. Из этого условия определяется значение τ_0 : положив в (11) $\rho = 0$, получим

$$\frac{4F^2}{\Omega^2} \sin^2 \Omega \tau_0 = -1,$$

откуда

$$\Omega \tau_0 = i \text{Arsh } \gamma, \quad \gamma = \frac{\Omega}{2F} = \frac{\sqrt{2m|E|}}{|e|\mathcal{E}_0} \omega$$

(мнимость «момента времени» τ_0 выражает собой классическую неосуществимость процесса). Окончательно

$$w \sim \exp \left\{ -2 \text{Im} \left[\int_{\tau}^{\tau_0} \frac{4F^2}{\Omega^2} \sin^2 \Omega \tau' d\tau' + \tau_0 \right] \right\},$$

причем в качестве τ можно взять любое вещественное значение (мнимая часть интеграла от него не зависит). Вычислив интеграл, получим

$$w \sim \exp \left\{ -\frac{2|E|}{\hbar\omega} f(\gamma) \right\}, \quad f(\gamma) = \left(1 + \frac{1}{2\gamma^2} \right) \text{Arsh } \gamma - \frac{\sqrt{1+\gamma^2}}{2\gamma}. \quad (12)$$

Предельные выражения функции $f(\gamma)$:

$$f(\gamma) \approx \frac{2\gamma}{3} \text{ при } \gamma \ll 1, \quad f(\gamma) \approx \ln 2\gamma - \frac{1}{2} \text{ при } \gamma \gg 1.$$

Предельное выражение w при $\gamma \rightarrow 0$ отвечает вероятности вырывания частицы из потенциальной ямы постоянным полем.

Формула (12) применима, если показатель экспоненты велик. Для этого во всяком случае должно быть $\hbar\omega \ll |E|$.