Использование метода перевала в нестационарных задачах квантовой механики

Махно Артем

Воронежский государственный университет

Руководитель Флегель А В

Содержание

В квантовой механике одноэлектронная математическая модель атома, подверженного воздействию лазерного импульса, описывается нестационарным уравнением Шредингера для электронной волновой функции

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2-U(r)-V(\mathbf{r},t)\right]\Psi(\mathbf{r},t)=0$$

Волновая функция при $r \to \infty$

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{2\pi}{k} \int_{-\infty}^{t} e^{-i\epsilon t'} G(\mathbf{r}, t; 0, t') f(t') dt', \tag{1}$$

где $G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$ - функция Грина, имеющая вид

$$G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = -\theta(t - t') \frac{i}{\hbar} \left[\frac{m}{2\pi i \hbar (t - t')} \right]^{3/2} e^{iS(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')/\hbar},$$

Граниченое условие при $r \to 0$

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \sim \left(B(\epsilon) + \frac{1}{r} \right) f(t) e^{-i\epsilon t} \tag{2}$$

Переходя в атомную систему единиц ($|e| = m_e = \hbar = 1$), и сшивая уравнения (1) и (2), получаем систему:

$$\sum_{n=-\infty}^{0} [B(\epsilon + n\omega) - i(2(\epsilon + n\omega))^{1/2}] f_n e^{-in\omega t} =$$

$$= \sum_{m=-\infty}^{0} \mathcal{M}(\epsilon + m\omega, t) f_m e^{im\omega t}, \tag{3}$$

где для расчета образа фурье функции f (f_i), потребуется вычислять матричный элемент

$$\mathcal{M}(\epsilon, t) = \sqrt{\frac{1}{2\pi i}} \int_0^\infty \frac{e^{i\epsilon\tau}}{\tau^{3/2}} \left[e^{iS(t,t-\tau)} - 1 \right]. \tag{4}$$

Метод перевала применяется для оценки при больших значениях параметра λ интегралов вида

$$I(\lambda) = \int_a^b \phi(t) e^{\lambda f(t)} dt$$

Преобразуя их к виду

$$I(\lambda) \sim e^{\lambda f(z_0)} \sqrt{\frac{2\pi}{|f''(z_0)|}} \phi(z_0) e^{i\theta} \frac{1}{\sqrt{\lambda}},$$

где z_0 - корни уравнения $f'(t) = 0$.

Итоговая формула, полученная методом перевала

$$\mathcal{M}(\epsilon, t) \simeq \sum_{t_0} \frac{e^{i\widetilde{S}(t,t_0)}}{\sqrt{D}(t-t_0)^{3/2}}, \tag{5}$$

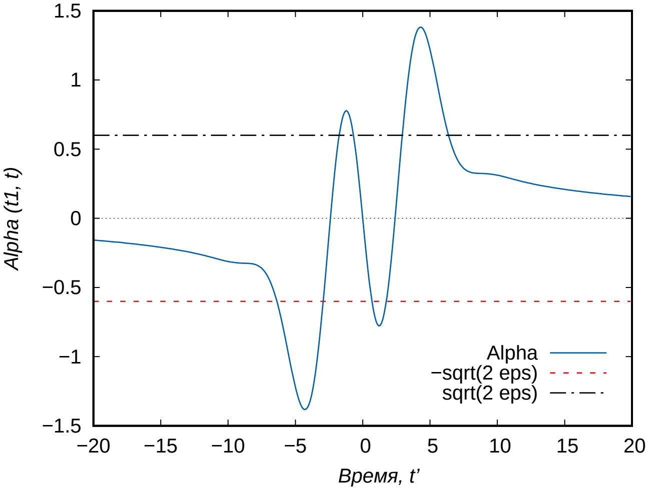
где $\widetilde{S} = \epsilon(t-t_0) + S(t, t_0)$,

$$D = \alpha(t_0, t, t_0)\left[F(t_0) - \frac{1}{(t-t_0)^2}\int_{t_0}^{t} A(\tau)d\tau + \frac{A(t_0)}{t-t_0}\right]$$

и t_0 - корни уравнения $\alpha^2(t_0, t, t_0) = 2\epsilon$.

Аналитическое ршение

Рассмотрим решение уравнения $\alpha^2(t_0, t, t_0) = 2\epsilon$. для $t = 0$



Использование метода перевала в нестационарных задачах квантовой механики

Махно Артем

Воронежский государственный университет

Руководитель Флегель А В