

Простая конечномерная модель метастабильного уровня

А. И. Дубиковский,^{1,*} П. К. Силаев^{2,†}¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра квантовой статистики и теории поля.²Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра квантовой теории и физики высоких энергий
Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2

(Поступила в редакцию 18.10.2024; после доработки 26.11.2024; подписана в печать 28.11.2024)

Мы построили приближенное аналитическое решение спектральной задачи для конечномерной матрицы специального вида, которое оказывается очень простой и достаточно удовлетворительной моделью метастабильного состояния. При этом воспроизводится большинство характерных свойств метастабильного уровня: форма линии, динамика распада и плотность состояний. Корректность приближенного аналитического решения была проверена посредством непосредственного численного счета. Предложенная модель представляет собой конечномерный аналог формализма Фано.

PACS: 03.65.-w. УДК: 530.145.

Ключевые слова: квантовая теория, метастабильное состояние, спектральная задача, формализм Фано.

DOI: [10.55959/MSU0579-9392.80.2520101](https://doi.org/10.55959/MSU0579-9392.80.2520101)

ВВЕДЕНИЕ

Построенная в работе модель является простым конечномерным аналогом формализма Фано [1, 2]. В формализме Фано рассматривается задача, в которой уровень дискретного спектра, соответствующий невозмущенному гамильтониану H_0 , является «погруженным» (embedded) в непрерывный спектр. Далее рассматривается гамильтониан возмущения H_I , из-за которого исходный дискретный уровень превращается в метастабильный, т. е. становится линейной комбинацией обобщенных собственных векторов гамильтониана $H_0 + H_I$. При этом с неизбежностью возникает необходимость решать интегральные уравнения, причем решения содержат сингулярные конструкции типа δ -функций и выражений вида $1/x$, понимаемых в смысле главного значения. В результате оказывается возможным получить, во-первых, форму линии для метастабильного уровня, во-вторых, плотность состояний в окрестности метастабильного уровня, в-третьих, экспоненциальный закон распада этого метастабильного уровня. Здесь, впрочем, следует заметить, что в некоторых случаях закон распада может отклоняться от экспоненциального (см. [3]). Первоначально этот формализм использовался при решении задач об автоионизации, но впоследствии он оказался полезным и при решении других задач. В частности, этот формализм оказался полезным при описании захвата медленных нейтронов ядрами [4]. Впрочем, для описания многоканальных процессов («многоканальные резонансы») его пришлось несколько обобщить [5].

Поскольку собственно формализм является достаточно универсальным, он находит применение при описании самых разных физических систем. Он позволяет объяснить спектры рассеяния, поглощения, пропускания и т. п. В частности, он применялся при изучении поляризационных эффектов для фотоэлектронов [6], при изучении сверхпроводников [7, 8] и полупроводников [9, 10], магнитных эффектов [11].

Формализм Фано находит широкое применение при описании рассеяния света на фотонных структурах. В работе [12] исследован узкий асимметричный резонанс в волноводах с дефектами, в [13] рассматривается теория резонансов Фано в оптических резонаторах, в [14] рассматриваются резонансы при рассеянии на диэлектрических сферах с большой диэлектрической проницаемостью. Было показано, что резонансы Фано наблюдаются в том числе при рассеянии на одиночном фотонно-кристаллическом резонаторе [15]. Формализм Фано также применяется при описании эффекта прозрачности, индуцированной связанными резонаторами [16–19]. Еще его применяют при описании процессов переноса заряда через квантовую точку [20], [21]. Его также применяют в задачах квантовой электродинамики в присутствии сильных полей [22–25].

Вообще говоря, формализм Фано — это не единственная возможность получить форму линии, плотность состояний и закон распада метастабильного уровня. Можно воспользоваться, например, золотым правилом Ферми (см., например, [26]) для вычисления скорости распада метастабильного состояния. После этого форму линии легко получить исходя из того, что закон распада и форма линии связаны преобразованием Фурье. Этот подход не является вполне последовательным, поскольку,

* E-mail: dubikovs@physics.msu.ru† E-mail: silaev314@yandex.ru

строого говоря, золотое правило Ферми можно применять только при временах $t \ll \tau$, где τ — время жизни метастабильного состояния.

Альтернативным и гораздо более последовательным является подход с использованием формализма функций Грина. Превосходное изложение этого формализма можно найти, например, в [27]. Этот формализм позволяет либо построить замкнутую систему уравнений для матричных элементов функции Грина, либо в рамках теории возмущений получить явные выражения для матричных элементов функции Грина. В системе с невозмущенным гамильтонианом H_0 дискретные уровни соответствуют полюсам функции Грина, лежащим на вещественной оси. Можно показать, что если есть дискретный уровень, погруженный в непрерывный спектр, то учет возмущения H_I может привести к сдвигу соответствующего полюса с вещественной оси вниз, т. е. в направлении вдоль мнимой оси. Тем самым соответствующее состояние перестает быть собственным вектором гамильтониана, а становится метастабильным уровнем, т. е. линейной комбинацией обобщенных собственных векторов гамильтониана $H_0 + H_I$. Поскольку матричные элементы оператора эволюции выражаются через матричные элементы функции Грина, то возникает возможность получить закон распада этого метастабильного уровня, причем сделать это не только для времен $t \ll \tau$. Кроме того, в рамках формализма функций Грина можно получить форму линии не косвенным образом (через закон распада), а непосредственным вычислением.

Однако изложенные выше подходы (формализм Фано, формализм функций Грина) связаны с довольно громоздкими вычислениями, причем эти вычисления как правило ведутся на физическом уровне строгости. В настоящей работе мы построим весьма примитивную модель метастабильного уровня на основе приближенного аналитического решения спектральной задачи для эрмитовой матрицы конечного размера.

Структура работы следующая: в разделе 2 мы построим приближенное аналитическое решение спектральной задачи, в разделе 3 получим форму линии для построенной модели метастабильного уровня, в разделе 4 проведем сравнение приближенного решения с «точным» численным ответом для спектральной задачи, в разделе 5 обсудим закон распада построенной нами модели метастабильного уровня.

1. ПОСТРОЕНИЕ РЕШЕНИЯ

Рассмотрим диагональный H_0 размера $N \times N$ с четным N . Требование четности не является принципиальным, оно накладывается только из соображений удобства. Мы будем рассматривать первый по счету базисный вектор как исходный дискретный уровень. Поскольку энергия определена с точностью до константы, мы можем, не ограничи-

вая общности, положить соответствующее собственное значение равным нулю: $(H_0)_{11} = 0$. Остальные базисные вектора мы будем рассматривать как имитацию непрерывного спектра. Для превращения исходного дискретного уровня в метастабильный необходимо, чтобы дискретный уровень лежал внутри отрезка непрерывного спектра, поэтому мы положим

$$(H_0)_{nn} \equiv E_n^{(0)} = dE(n - N/2 - 1),$$

где $n = 2 \dots N$. Тем самым энергия дискретного уровня лежит в середине спектра: при $n_0 = N/2 + 1$ энергия $E_{n_0} = 0$. Для удовлетворительной имитации непрерывного спектра необходимо выполнение двух условий: достаточно малое dE и достаточно большая длина отрезка, на котором лежат собственные значения, имитирующие непрерывный спектр, т. е. достаточно большое $N \cdot dE$. Второе условие необходимо для того, чтобы в этот отрезок укладывались все векторы, на которые существенным образом влияет взаимодействие с дискретным уровнем. Оба условия будут уточнены в ходе построения решения.

Когда мы решим задачу для возмущенного гамильтониана, мы будем нумеровать собственные вектора и собственные значения в порядке возрастания энергии. Чтобы было удобнее сравнивать результат с невозмущенным спектром, последний необходимо упорядочить. В упорядоченном невозмущенном спектре нижний уровень $E_{min}^{(0)} = -dE(N/2 - 1)$ является первым, $E_{max}^{(0)} = dE(N/2 - 1)$ — последним. При этом посередине упорядоченного спектра лежит двукратно вырожденный уровень с $E^{(0)} = 0$.

Возмущение H_I должно описывать переходы с уровня $(i = 1)$ на уровень « f » при $f \geq 2$. Положим, что соответствующий недиагональный матричный элемент не зависит от индекса « f »:

$$(H_I)_{1f} = (H_I)_{f1} = W$$

при $f = 2 \dots N$. Константа W всегда может быть сделана вещественной за счет произвола в выборе фазы базисных векторов со 2-го по N -й. А то обстоятельство, что матричные элементы не зависят от « f », соответствует условию, что матричный элемент $\langle \psi_f | H_I | \psi_i \rangle$ не должен слишком сильно меняться для тех состояний непрерывного спектра « f », энергии которых E_f лежат в малой окрестности энергии исходного состояния E_i . Поскольку H_I — это возмущение, то константа W должна быть небольшой.

Построим для гамильтониана $H = H_0 + H_I$ приближенное аналитическое решение — как для собственных векторов, так и для собственных значений.

Если известно собственное значение E_k , то легко найти соответствующий собственный вектор. Действительно, возьмем стационарное уравнение Шредингера

$$H|\psi^{(k)}\rangle = E_k|\psi^{(k)}\rangle$$

и используем строчки со 2-й по N -ю. Тогда получим:

$$\psi_n^{(k)} = -\psi_1^{(k)} \cdot \frac{W}{E_n^{(0)} - E_k} \quad \text{при } n = 2 \dots N. \quad (1)$$

Соответственно $\psi_1^{(k)}$ может быть найдено из условия нормировки:

$$1 = \sum_{n=1}^N \left(\psi_n^{(k)}\right)^2 = \left(\psi_1^{(k)}\right)^2 \cdot \left(1 + \sum_{n=2}^N \frac{W^2}{(E_n^{(0)} - E_k)^2}\right).$$

Это точное равенство. Однако сумма $\sum_{n=2}^N$ может быть вычислена приближенно:

$$\sum_{n=2}^N \frac{W^2}{(E_n^{(0)} - E_k)^2} \approx \frac{W^2}{dE^2} \cdot \left(\frac{\pi^2}{\sin^2(\pi E_k/dE)} - \frac{1}{N/2 - 1/2 - E_k/dE} + \frac{1}{1/2 - N/2 - E_k/dE} \right). \quad (2)$$

Эта приближенная формула является следствием точной формулы

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(n-a)^2} = \frac{\pi^2}{\sin^2(\pi a)}.$$

Разница между этой бесконечной суммой и суммой от «2» до « N » — это две «полубесконечные» суммы (от « $-\infty$ » до «1» и от « $N+1$ » до « $+\infty$ »). Поскольку dE мало, то их можно рассматривать как интегральные суммы. Причем целесообразно использовать формулу 2-го порядка точности, в которой значение функции берется в средней точке каждого интервала dE . Таким образом, обе полубесконечные суммы мы оцениваем интегралами, которые и дают второе и третье слагаемые в скобках в соотношении (2).

Может возникнуть впечатление, что замена интегральной суммы на интеграл для функции вида $1/(x-a)^2$ будет приводить к значительным ошибкам в тех случаях, когда особенность « a » располагается недалеко от области интегрирования. То есть можно ожидать большого отклонения приближенного ответа (2) от точной суммы для собственных значений, лежащих на концах интервала, т.е. при $k \sim 1$ и при $k \sim N$. Это рассуждение в целом является правильным. Однако, как мы позже увидим, величина E_k не слишком сильно отличается от $E_k^{(0)}$. Более того, на краях интервала энергий это отличие минимально. Этого и следовало ожидать, ведь чем больше разница между энергией уровня $E_k^{(0)}$ и энергией дискретного уровня $E = 0$, тем меньше возмущение вносит гамильтониан возмущения H_I в энергию $E_k^{(0)}$.

В результате на краях интервала (при $k \sim 1$ и $k \sim N$) разность $E_k - E_k^{(0)}$ крайне мала и основной вклад в сумму дает слагаемое с $n = k$. Соответственно в приближенном выражении (2) основной вклад дает первое слагаемое в скобках, а второе слагаемое и третье слагаемые особой роли не

играют. И наоборот, в середине интервала ($k \sim N/2$) разность $E_k - E_k^{(0)}$ не слишком мала, но как раз посередине интервала заменять интегральную сумму на интеграл можно. Поэтому приближенное выражение (2) можно применять во всем диапазоне индексов k . Эти рассуждения были проверены непосредственным численным счетом и оказались правильными.

Итак, при данном собственном значении E_k собственный вектор дается выражением (1), причем

$$\psi_1^{(k)} \approx \left\{ 1 + \frac{W^2}{dE^2} \cdot \left(\frac{\pi^2}{\sin^2(\pi E_k/dE)} - \frac{1}{N/2 - 1/2 - E_k/dE} + \frac{1}{1/2 - N/2 - E_k/dE} \right) \right\}^{(-1/2)}. \quad (3)$$

Теперь необходимо найти энергии E_k . Воспользуемся первой строчкой в стационарном уравнении Шредингера:

$$E_k \cdot \psi_1^{(k)} = \sum_{n=1}^N H_{1n} \cdot \psi_n^{(k)} = \sum_{n=2}^N W \cdot \left(-\psi_1^{(k)} \frac{W}{(E_n^{(0)} - E_k)} \right).$$

Отсюда следует уравнение на E_k :

$$E_k = - \sum_{n=2}^N \frac{W^2}{(E_n^{(0)} - E_k)}.$$

Сумма в правой части может быть вычислена приближенно:

$$- \sum_{n=2}^N \frac{W^2}{(E_n^{(0)} - E_k)} \approx \frac{W^2}{dE} \cdot \left\{ \pi \cot(\pi E_k/dE) - \log \left(\frac{N - k + 1/2}{k - 1/2} \right) \right\}.$$

Эта оценка для суммы получается в точности таким же образом, как и предыдущая, только в качестве основной формулы надо взять точное выражение для бесконечной суммы

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{n-a} = \frac{\pi \cos(\pi a)}{\sin(\pi a)}.$$

Таким образом, нам надо решить приближенное уравнение:

$$E_k = \frac{W^2}{dE} \cdot \left\{ \pi \cot(\pi E_k/dE) - \log \left(\frac{N - k + 1/2}{k - 1/2} \right) \right\}. \quad (4)$$

Определим следующие величины:

$$\begin{aligned} \Gamma &\equiv 2\pi W^2/dE, \\ E_k^{(I)} &= dE(k - N/2 - 1/2), \\ E_k^{(II)} &= -\frac{dE}{\pi} \arctan\left(\frac{dE(k - N/2 - 1/2)}{\Gamma/2}\right), \\ E_k^{(III)} &= -\frac{dE}{\pi} \arctan\left(\frac{dE(k - N/2 - 1/2) + E_k^{(II)}}{\Gamma/2}\right), \\ E_k^{(IV)} &= -dE \log\left(\frac{N - k + 1/2}{k - 1/2}\right) \times \\ &\quad \times \frac{1}{\pi^2 + \left((E_k^{(I)} + E_k^{(III)})dE/W^2\right)^2}. \end{aligned}$$

Будем решать уравнение (4) методом последовательных приближений. Нулевым приближением к решению является

$$E_k \approx E_k^{(I)} + E_k^{(II)}. \quad (5)$$

В этом приближении мы не учитываем слагаемое с логарифмом, а в левой части остается ничем не скомпенсированное слагаемое, пропорциональное $E_k^{(II)}$.

Замена $E_k^{(II)}$ на $E_k^{(III)}$ позволяет это слагаемое скомпенсировать. Вообще говоря, может показаться, что для еще большей самосогласованности решения следовало бы в определении $E_k^{(III)}$ заменить то $E_k^{(II)}$, которое стоит в аргументе арктангенса, в свою очередь, на $E_k^{(III)}$. Однако это было бы превышением точности. Численный эксперимент показывает, что такая замена практически не изменяет разницы между приближенным аналитическим решением и «точным» численным.

И наконец, следует найти поправку, связанную с логарифмическим слагаемым. Полагая

$$E_k \approx E_k^{(I)} + E_k^{(III)} + \delta E_k,$$

получаем, что $\delta E_k = E_k^{(IV)}$. Окончательно получаем:

$$E_k \approx E_k^{(I)} + E_k^{(III)} + E_k^{(IV)}. \quad (6)$$

Полученное приближенное аналитическое решение было проверено непосредственным численным счетом. Оказалось, что его точность достаточно высокая.

Следует заметить, что теперь мы обосновали утверждение про разницу между E_k и $E_k^{(0)}$. При $k \sim 1$ и при $k \sim N$ значение функции «arctan» в $E_k^{(d)}$ оказывается порядка $\mp\pi/2$, так что добавка $\pm dE/2$ сокращает то слагаемое « $-dE/2$ », которое присутствует в $E_k^{(I)}$. Тем самым мы получаем $E_1 \approx -dE(N/2 - 1) = E_{min}^{(0)}$ и $E_N \approx dE(N/2 - 1) = E_{max}^{(0)}$. Так что, как и должно быть, возмущение H_I очень мало меняет энергию самых верхних и самых нижних уровней. Это

связано с тем, что их невозмущенная энергия сильно отличается от энергии исходного дискретного уровня, с которым они «взаимодействуют». Заметно меняется энергия только у тех уровней, энергия которых близка к нулю, т. е. у уровней с индексами $k \sim N/2$. А именно вокруг индекса $k = N/2$ существует окрестность размером порядка Γ/dE . В этой окрестности поправка к энергии меняется от приблизительно $dE/2$ до приблизительно $-dE/2$. Это соответствует увеличению плотности состояний вокруг метастабильного уровня с увеличением количества уровней на единицу. Первоначально в интервале энергий $[E_{min}^{(0)}, E_{max}^{(0)}]$ присутствовали $(N - 1)$ уровней, причем уровень $E = 0$ был двукратно вырожден. А в результате действия возмущения в тот же интервал укладывается N невырожденных уровней.

«Уплотнение» уровней описывается формулой для плотности состояний при данной энергии $\rho(E_k) = dk/dE_k$. В данном случае

$$\frac{1}{\rho(E_k)} = \frac{dE_k}{dk} \approx dE - \frac{dE^2}{\pi} \frac{\Gamma/2}{\left(E_k^{(I)}\right)^2 + \Gamma^2/4}. \quad (7)$$

В этом выражении мы использовали нулевое приближение для энергии (5). Тут необходимо подчеркнуть, что в действительности величина $E_k^{(I)}$ в знаменателе — это не абсолютное значение энергии, а отклонение энергии от энергии исходного дискретного уровня, т. е. от нуля. В этом легко убедиться, если повторить все выкладки, положив $E_1^{(0)} = \mathcal{E}_0$ и $E_n^{(0)} = \mathcal{E}_0 + dE(n - N/2 - 1)$.

Видно, что уменьшение интервала между соседними уровнями описывается лоренцевой кривой. Это характерное свойство всех метастабильных уровней. Скажем, метастабильные уровни, связанные с резонансами в рассеянии («квазинормальные моды»), обладают тем же свойством. Действительно, при наличии резонанса решение радиального уравнения Шредингера должно иметь асимптотику:

$$\psi_\ell(r \rightarrow \infty) = D \cos\left(pr + \delta_\ell^{(0)} - \arctan\left(\frac{p_1}{p - p_0}\right)\right),$$

где $\delta_\ell^{(0)}$ — фоновая фаза рассеяния, p_0 определяет положение резонанса, а p_1 — его ширину. Такое поведение фазы рассеяния возникает, когда полюс амплитуды рассеяния на комплексной плоскости волнового числа « p » лежит в точке $p = p_0 - ip_1$. Перейдем от непрерывного спектра к дискретному, наложив условие Дирихле при $r = L$ (здесь $L \rightarrow \infty$). При этом следует учесть, что мы рассматриваем небольшую окрестность вокруг резонанса $p = p_0$. Тогда получим, что интервал между уровнями вдали от резонанса равен

$$dE = \frac{\hbar^2 p_0}{m} \frac{\pi}{L},$$

а $dE_k/dk = \frac{\hbar^2 p_0}{m} dp_k/dk$. Кроме того, необходимо использовать связь между p_1 и Γ :

$$\frac{\hbar^2 k_0}{m} k_1 = \frac{\Gamma}{2}.$$

Тогда окончательно получим

$$\frac{dE_k}{dk} = dE - \frac{dE^2}{\pi} \frac{\Gamma/2}{(E_k - E_0)^2 + \Gamma^2/4},$$

что, действительно, в точности совпадает с (7).

2. ФОРМА ЛИНИИ

Используем в (3) совсем грубое приближение:

$$\psi_1^{(k)} \approx \left\{ \frac{W^2}{dE^2} \cdot \left(\frac{\pi^2}{\sin^2(\pi E_k/dE)} \right) \right\}^{(-1/2)}.$$

Мы пренебрегли единицей по сравнению со слагаемым, содержащим множитель W^2/dE^2 , и отбросили поправки, связанные с тем, что при вычислении нормы сумма идет не от « $-\infty$ » до « $+\infty$ », а от «2» до « N ».

Подставим в это приближенное выражение нулевое приближение для энергии $E_k \approx E_k^{(I)} + E_k^{(II)}$. Тогда получим:

$$\left| \psi_1^{(k)} \right|^2 \approx \frac{W^2}{(E_k^{(I)})^2 + \Gamma^2/4} = dE \cdot \frac{\Gamma}{2\pi} \frac{1}{(E_k^{(I)})^2 + \Gamma^2/4}. \quad (8)$$

Еще раз подчеркнем, что в действительности в знаменателе стоит не абсолютное значение энергии, а

$$\left(E_k^{(I)} \right) = \left(E_k^{(I)} - 0 \right) = \left(E_k^{(I)} - \mathcal{E}_0 \right),$$

т.е. отклонение энергии $E_k^{(I)}$ от энергии исходного дискретного уровня $\mathcal{E}_0 = 0$. А это значит, что наша модель в некотором приближении воспроизводит ответ для формы линии.

Действительно, величина $\left| \psi_1^{(k)} \right|^2$ — это коэффициент разложения исходного дискретного уровня, который, благодаря возмущению H_I , стал метастабильным, по собственным векторам гамильтониана $H_0 + H_I$, которые имитируют непрерывный спектр. Тем самым это выражение моделирует плотность вероятности иметь энергию E_k , т.е. форму линии. Как и должно быть для метастабильного уровня, форма линии оказывается лоренцевой кривой. Более того, введенная нами величина Γ согласуется с формулой для скорости перехода, т.е. с золотым правилом Ферми:

$$\Gamma = 2\pi \sum_f |\langle \psi_f | H_I | \psi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i) = 2\pi W^2/dE,$$

поскольку при переходе от дискретного спектра к непрерывному мы должны полагать, что $\delta(0) = 1/dE$.

3. СРАВНЕНИЕ ПРИБЛИЖЕННОГО АНАЛИТИЧЕСКОГО РЕШЕНИЯ С ЧИСЛЕННЫМ

Спектральная задача для матрицы конечного размера с легкостью может быть решена численно, причем с весьма высокой точностью. Это позволяет оценить ошибки построенного нами приближенного аналитического решения. Численный эксперимент показывает, что эти ошибки бывают двух типов.

Ошибки первого типа являются краевыми. И в выражении для энергии (6), и в выражении для нормы (3) они достигают максимума на концах интервала, т.е. при $k \sim 1$ и $k \sim N$. Краевые ошибки возникают в том случае, когда значение N оказывается недостаточно большим, т.е. когда мы рассматриваем слишком короткий отрезок «непрерывного спектра» вокруг «дискретного уровня». Иначе говоря, возникает ситуация, когда для минимальной энергии $E_{min}^{(0)}$ и максимальной энергии $E_{max}^{(0)}$ влияние возмущения еще является заметным. А при построении приближенного решения мы уже указывали, что наши приближенные оценки для сумм применимы только в том случае, когда на концах интервала энергии (т.е. при $k \sim 1$ и $k \sim N$) величина $\left| E_k - E_k^{(0)} \right|$, т.е. разница между возмущенным и невозмущенным спектром, достаточно мала. Размеры той области, в которой возмущение оказывает заметное влияние на спектр, характеризуется безразмерным параметром $R \equiv \Gamma/dE \sim W^2/dE^2$. Чтобы краевые ошибки были невелики, должно выполняться условие $N \gg R$. Из сказанного очевидно, что при фиксированном R краевые ошибки уменьшаются с увеличением N . И наоборот, при фиксированном N краевые ошибки увеличиваются с ростом R .

Ошибки второго типа, «серединные» ошибки, напротив, возникают в середине интервала энергий, т.е. при $k \sim N/2$. Они локализованы в окрестности размером порядка $R = \Gamma/dE$. Это ошибки возникают там, где влияние возмущения максимально. И связаны они с тем, что по ходу вычислений мы заменяли интегральные суммы на интегралы. Тем самым они должны убывать с уменьшением dE , т.е. с ростом безразмерного параметра R . Численный эксперимент подтверждает этот вывод.

Для наглядности мы привели графики зависимости ошибок от параметра R при трех фиксированных N : при $N = 2000$, $N = 4000$ и $N = 8000$.

Ошибкой выражения для энергии Δ_1 мы называем максимальное по всем k отклонение выражения (6) от соответствующего «точного» численного значения.

Поскольку непосредственный физический смысл имеет не само $\psi_1^{(k)}$, а его квадрат, то ошибкой выражения для нормы Δ_2 мы называем максимальное по всем k отклонение величины $\left| \psi_1^{(k)} \right|^2$ (при этом величину $\psi_1^{(k)}$ мы берем из (3)) от соответствующего численного значения.

И наконец, третья ошибка Δ_3 характеризует не качество построенного нами приближенного аналитического решения, а качество нашей модели. Мы определяем Δ_3 как максимальное по всем k отклонение лоренцевой кривой (8) от точного численного значения для $|\psi_1^{(k)}|^2$. Очевидно, что модель можно считать удовлетворительной только в том случае, когда лоренцева форма линии для метастабильного уровня воспроизводится с достаточной точностью.

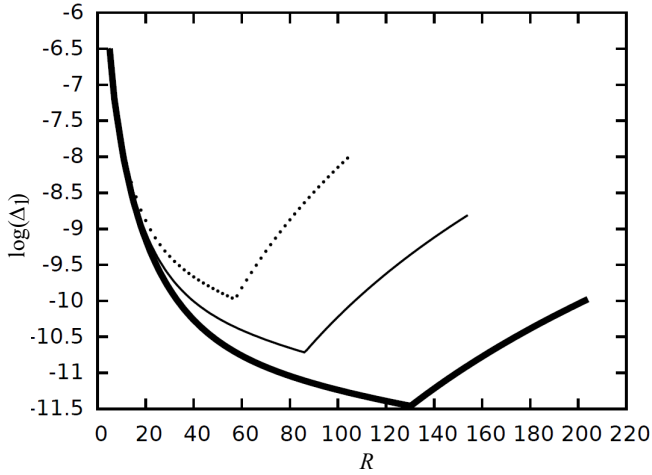


Рис. 1. Логарифм ошибки Δ_1 как функция параметра R . Жирная линия — при $N = 8000$, тонкая линия — при $N = 4000$, точечная линия — при $N = 2000$

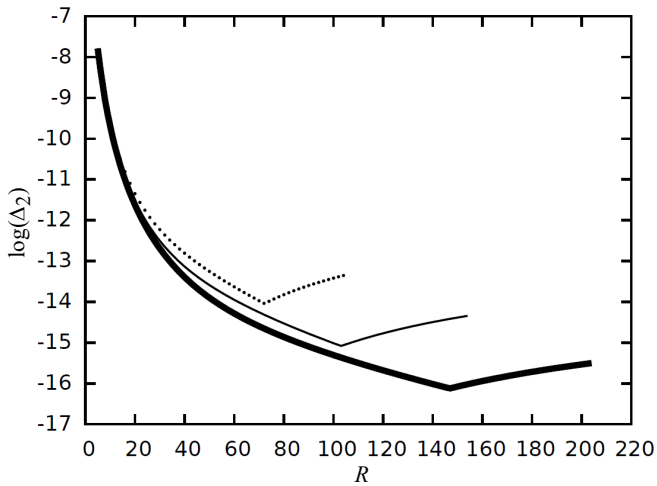


Рис. 2. Логарифм ошибки Δ_2 как функция параметра R . Жирная линия — при $N = 8000$, тонкая линия — при $N = 4000$, точечная линия — при $N = 2000$

Из рис. 1–3 видно, что зависимость ошибок от параметра R при фиксированном N практически однотипная. Сначала, т. е. при относительно небольших R , с ростом R все три ошибки убывают. При этом ошибки на краях интервала энергий, т. е. при $k \sim 1$ и $k \sim N$ гораздо меньше, чем ошибки в середине интервала, т. е. при $k \sim N/2$. Однако, как мы уже упоминали, с ростом R убывают именно «серединные» ошибки, в то время как краевые растут.

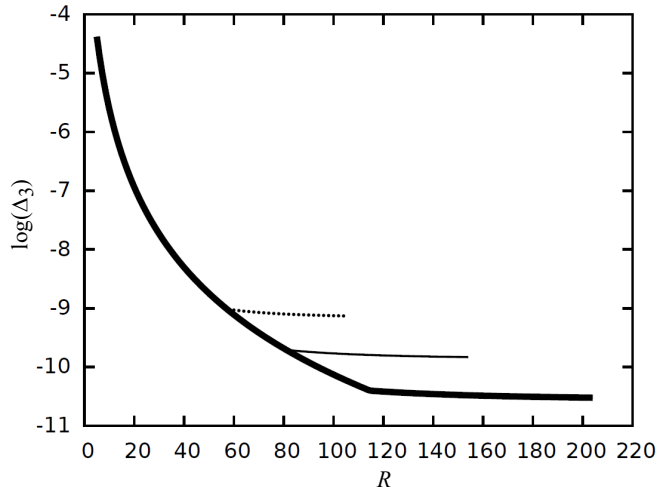


Рис. 3. Логарифм ошибки Δ_3 как функция параметра R . Жирная линия — при $N = 8000$, тонкая линия — при $N = 4000$, точечная линия — при $N = 2000$

Поэтому при некотором значении $R = R_0$ краевые ошибки становятся равны серединным. С дальнейшим ростом R максимальная ошибка достигается уже на краях интервала и начинает расти. Так что в своего рода «точке поворота» $R = R_0$ достигается минимальная ошибка. Следует заметить, что значение R_0 , как и следовало ожидать, растет с ростом N . Ведь чем больше N , тем позднее могут проявиться краевые эффекты. На рис. 1,2 хорошо видны точки поворота и их зависимость от N . Что касается ошибки Δ_3 (см. рис. 3), то точки поворота для нее тоже хорошо видны, но после каждой из точек поворота Δ_3 не начинает расти, а просто перестает заметно убывать.

Что касается зависимости ошибок от N при фиксированном R , то хорошо видно, что они сначала уменьшаются с ростом N , а при дальнейшем росте N убывать перестают, т. е. происходит своего рода насыщение. Этого также следовало ожидать, ведь при фиксированном R размеры области, в которой возмущение влияет на спектр также фиксировано. Пока хоть как-то сказываются краевые эффекты, рост N вызывает уменьшение ошибок. Но дальнейшее увеличение N приводит к тому, что добавляются состояния, на которых возмущение H_I не сказывается вовсе. Максимальные ошибки при этом остаются «серединными» и потому перестают зависеть от N .

Поскольку все три графика по необходимости выполнены в логарифмической шкале, приведем в таблице для наглядности еще и абсолютные значения ошибок в точках поворота, т. е. минимальные значения ошибок для каждого из N .

Итак, как ошибки собственно приближенного решения Δ_1 и Δ_2 , так и ошибка построенной модели Δ_3 даже при умеренном $N = 2000$ достаточно малы. Кроме того, они достаточно быстро убывают при одновременном росте R и N .

Таблица. Абсолютные значения ошибок в точках поворота

N	$R_0^{(1)}$	Δ_1	$R_0^{(2)}$	Δ_2	$R_0^{(3)}$	Δ_3
2000	57.2	4.6×10^{-5}	72.2	8.0×10^{-7}	56	1.2×10^{-4}
4000	86.2	2.2×10^{-5}	103.2	2.8×10^{-7}	81	6.1×10^{-5}
8000	130.3	1.1×10^{-5}	147.0	9.9×10^{-8}	126	2.9×10^{-5}

4. ДИНАМИКА РАСПАДА МЕТАСТАБИЛЬНОГО УРОВНЯ

Что касается динамики распада построенного нами состояния $|1\rangle$, которое моделирует метастабильный уровень, то отличие от обычного экспоненциального закона распада вызвано теми же самыми обстоятельствами, которые приводят к появлению краевых и срединных ошибок в приближенном решении.

Конечномерность модели приводит, во-первых, к тому, что спектр существует на конечном интервале энергий $E_{min}^{(0)} < E < E_{max}^{(0)}$. В результате при временах $t < T_{min} \sim \hbar/E_{max}^{(0)}$ не может быть достигнута постоянная скорость распада Γ/\hbar . Кроме того, в законе распада будут наблюдаться небольшие колебания с частотой $\sim 2\pi\hbar/E_{max}^{(0)}$. Для постоянной скорости распада необходимо, чтобы распределение по энергиям тянулось до бесконечности и убывало как $\sim 1/E^2$.

Во-вторых, конечномерность модели приводит к тому, что спектр модели является дискретным с характерным зазором между уровнями dE . Поэтому динамика конечномерной модели может успешно моделировать динамику системы с непрерывным спектром только при временах $t \ll T_{max} \sim \hbar/dE$. В частности, динамика невозмущенной системы является в точности периодической с периодом $T_0 = 2\pi\hbar/dE$.

Получим закон распада модели метастабильного уровня $|1\rangle$. Если $|\psi(0)\rangle = |1\rangle$, то

$$a(t) = \langle 1|\psi(t)\rangle = \sum_k \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_k t\right) \left|\psi_1^{(k)}\right|^2.$$

Соответственно вероятность оставаться в состоянии $|1\rangle$ в момент времени t равна $P(t) = |a(t)|^2$. График этой функции для случая $N = 2000$, $dE = 10^{-4}$, $W = 1/3000$, $\hbar = 1$ приведен на рис. 4. А на рис. 5 изображено отклонение $P(t)$ от экспоненциального закона $\exp(-\Gamma t/\hbar)$.

На рис. 4 хорошо видно, что при $t \rightarrow 0$ скорость распада нулевая и только с течением времени $P(t)$ приближается к «правильному» экспоненциальному закону. Из рис. 5 следует, что максимальное отклонение $P(t)$ от экспоненты составляет около 4% и достигается при $t \sim 20$, что хорошо согласуется с нашей оценкой для T_{min} , которое при выбранных нами параметрах равно $T_{min} = 10$. Кроме того, на этом рисунке хорошо видны те колебания, о кото-

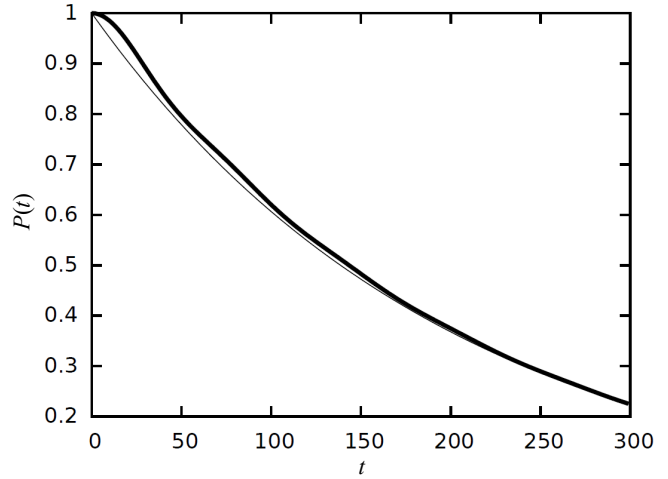


Рис. 4. Закон распада $P(t)$ для модели метастабильного уровня $|1\rangle$ как функция времени t . Жирная линия — $P(t)$, тонкая линия — экспонента $\exp(-\Gamma t/\hbar)$

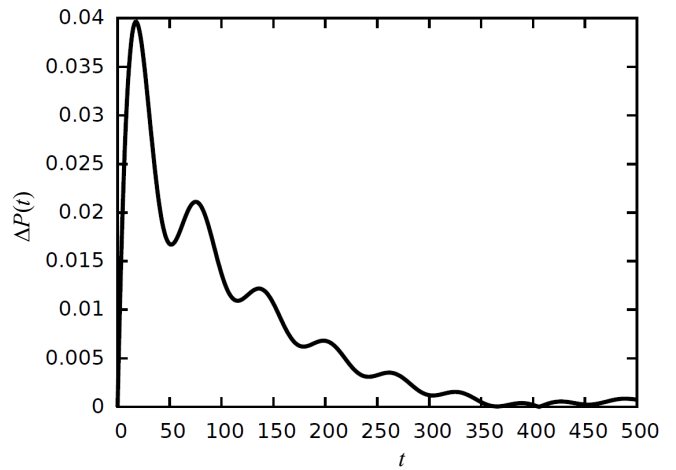


Рис. 5. Отклонение закона распада $P(t)$ от экспоненты $\exp(-\Gamma t/\hbar)$ как функция времени t

рых мы говорили ранее.

Если увеличивать N при фиксированном R , то отклонение от экспоненциального закона убывает приблизительно как $1/N$. Это хорошо видно на рис. 6, где приведены графики величины $\Delta P(t) \equiv P(t) - \exp(-\Gamma t/\hbar)$ при $N = 2000$, $N = 4000$ и $N = 8000$.

В то же время T_{min} так же убывает, как $1/N$. В результате и максимальное отклонение, и разме-

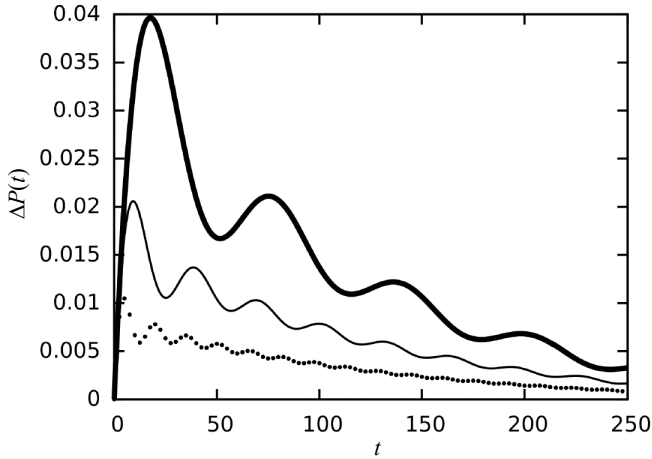


Рис. 6. Зависимость величины $\Delta P(t)$ от времени t . Жирная линия — при $N = 2000$, тонкая линия — при $N = 4000$, точечная линия — при $N = 8000$

ры той области, в которой наблюдается заметное отклонение от экспоненциального закона, убывают с ростом N . На рис. 7 изображены те же самые графики $\Delta P(t)$, что и на рис. 6, но на меньшем интервале времени. Хорошо видно, что при $N = 2000$ максимальное отклонение достигается при $t \sim 20$ и составляет около 4%; при $N = 4000$ максимальное отклонение достигается при $t \sim 10$ и составляет около 2%; при $N = 8000$ максимальное отклонение достигается при $t \sim 5$ и составляет около 1%.

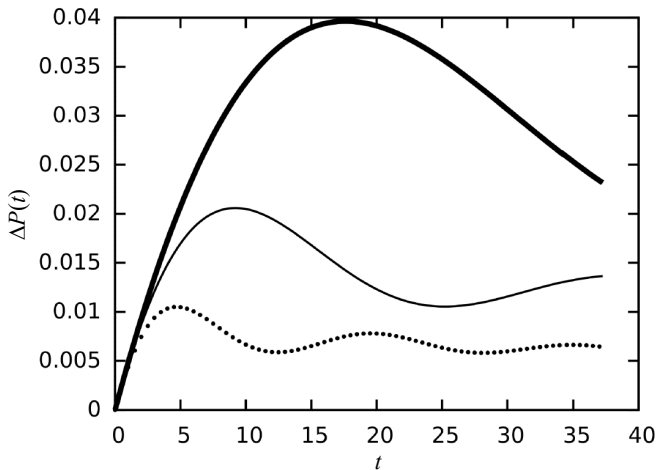


Рис. 7. Зависимость величины $\Delta P(t)$ от времени при небольших t . Жирная линия — при $N = 2000$, тонкая линия — при $N = 4000$, точечная линия — при $N = 8000$

Что касается ограничения сверху на время эволюции, то, как и следовало ожидать, при $t \sim T_{max}$ наблюдается частичное восстановление состояния. Поскольку из-за возмущения H_I спектр гамильтониана $H_0 + H_I$ перестает быть эквидистантным, то полного восстановления исходного состояния при $t = T_0 = 2\pi\hbar/dE \approx 62831.9$ не происходит. Однако же при $t = T_0 + 400$ исходное состояние восстанавливается приблизительно на 55%.

С дальнейшим ростом времени при временах, кратных T_0 , максимумы функции $P(t)$ становятся все меньше и меньше и затем выходят на своего рода «уровень насыщения» порядка 10%. Довольно ясно, что, найдя наименьшее общее кратное величин $[10^M \cdot E_k/dE]$ (здесь квадратные скобки обозначают операцию взятия целой части), можно указать то время \mathcal{T} , при котором исходное состояние восстановится с любой наперед заданной точностью (эта точность определяется целым числом M). Однако даже при $N = 2000$ и $M = 1$ это время \mathcal{T} (ввиду ограниченности объема статьи мы не можем его здесь привести) уже не имеет никакого физического смысла, его следует рассматривать как бесконечное.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложенная конечномерная модель метастабильного уровня обладает следующими свойствами: во-первых, точность построенного приближенного аналитического решения растет при одновременном росте размерности модели N и безразмерного параметра $R = \Gamma/dE$, который равен отношению ширины линии Γ к зазору между дискретными уровнями dE . Во-вторых, при одновременном росте N и R возрастает точность воспроизведения формы линии метастабильного уровня, т.е. лоренцевой кривой. В-третьих, с ростом N при фиксированном Γ возрастает точность воспроизведения экспоненциального закона распада (впрочем, разумеется, при $t \ll T_{max}$).

Как нам представляется, основным достоинством предложенной модели является ее простота. Если в формализме Фано мы вынуждены решать интегральные уравнения с сингулярными функциями, то в предложенной нами модели всё сводится к явному аналитическому решению спектральной задачи для конечномерной матрицы.

Предложенная модель может быть, в частности, применена к задаче о квантованном фермионном поле в присутствии сильного электрического поля. В этой задаче дискретный спектр располагается в энергетической щели между электронными и позитронными состояниями. Но при достаточно большой величине поля дискретный уровень погружается в континуум и возникает резонанс. Для слабых электрических полей можно было бы использовать в качестве непрерывного спектра свободные решения, но наличие сильного поля вынуждает использовать в качестве непрерывного спектра непертурбативные решения, т.е. решения, полученные в присутствии внешнего поля. Общепринятым подходом к перенормировке в этой задаче является использование контрчленов, соответствующих свободным полям, для перенормировки величин, вычисленных с помощью непертурбативных решений [28], [29]. Самосогласованность такого подхода вызывает некоторые сомнения. Поскольку конечномерная модель является, с одной стороны, из-

начально регуляризованной, а с другой стороны, некоторые ее ответы имеют гладкий предел при $N \rightarrow \infty$, то не исключено, что с ее помощью удастся

уточнить, является ли обычная процедура перенормировки физически обоснованной или в нее следует внести некоторые коррективы.

-
- [1] Fano U. // *Nuovo Cim.* **12**. 154 (1935).
 [2] Fano U. // *Phys. Rev.* **124**. 1866 (1961).
 [3] Fonda L. et al. // *Rep. Prog. Phys.* **41**. 587 (1978).
 [4] Feshbach H., Porter C.E., Weisskopf V.F. // *Phys. Rev.* **96**. 448 (1954).
 [5] Feshbach H. // *Ann. Phys.* **5**. 357 (1958).
 [6] Kabachnik N. M., Sazhina I. // *J. Phys. B.* **9**. 1681 (1976).
 [7] Limonov M.F. et al. // *Phys. Rev. Lett.* **80**. 825 (1998).
 [8] Limonov M.F. et al. // *Phys. Rev. B.* **66**. 054509 (2002).
 [9] Hopfield J.J., Dean J., Thomas D.G. // *Phys. Rev.* **158**. 748 (1967).
 [10] Cerdeira F., Fjeldly T. A., Cardona M. // *Phys. Rev. B.* **8**. 4734 (1973).
 [11] Madhavan V. et al. // *Science*. **280**. 567 (1998).
 [12] Fan S. // *Appl. Phys. Lett.* **80**. 908 (2002).
 [13] Fan S., Suh W., Joannopoulos J. D. // *J. Opt. Soc. Am. A.* **20**. 569 (2003).
 [14] Kong X., Xiao G. // *J. Opt. Soc. Am. A.* **33**. 707 (2016).
 [15] Galli M. et al. // *Appl. Phys. Lett.* **94**. 071101 (2009).
 [16] Smith D. D. et al. // *Phys. Rev. A.* **69**. 063804 (2004).
 [17] Verslegers L. et al. // *Phys. Rev. Lett.* **108**. 083902 (2012).
 [18] Yang Y. et al. // *Nature Commun.* **5**. 5753 (2014).
 [19] Peng B. et al. // *Nature Commun.* **5**. 5082 (2014).
 [20] Gores J. et al. // *Phys. Rev. B.* **62**. 2188 (2000).
 [21] Johnson A. C. et al. // *Phys. Rev. Lett.* **93**. 106803 (2004).
 [22] Grenier W. et al. // *Z. Physik.* **257**. 62 (1972).
 [23] Grenier W. et al. // *Z. Physik.* **257**. 183 (1972).
 [24] Krasnov A., Sveshnikov K. // *Mod. Phys. Lett. A.* **37**. 2250136 (2022).
 [25] Grashin P., Sveshnikov K. // *Int. J. Mod. Phys. A.* **38**. 2350125 (2023).
 [26] Ферми Э. Лекции по квантовой механике. Ижевск, 2000.
 [27] Хрусталева О.А., Луцев Ф.А., Свешников К.А. и др. Введение в квантовую теорию. М., 1985.
 [28] Gyulassy M. // *Nucl. Phys. A.* **244**. 497 (1975).
 [29] Mohr J., Plunien G., Soff G. // *Phys. Rep.* **293**. 227 (1998).

Simple finite-dimensional model of the metastable state

A. I. Dubikovskiy^{1a}, P. K. Silaev^{2b}

¹Department of Quantum Statistics and Field Theory, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University
 Moscow 119991, Russia

²Department of Quantum Theory and High Energy Physics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University
 Moscow 119991, Russia

E-mail: ^adubikovs@physics.msu.ru, ^bsilae314@yandex.ru

We have constructed an approximate analytical solution of the spectral problem for a finite-dimensional matrix of a special kind, which turns out to be a very simple and quite satisfactory model of the metastable state. Most of the characteristic properties of the metastable state are reproduced: line shape, decay dynamics, and density of states. The correctness of the approximate analytical solution was verified by direct numerical calculations. The proposed model is a finite-dimensional analog of the Fano formalism.

PACS: 03.65.-w.

Keywords: quantum theory, metastable state, spectral problem, Fano formalism.

Received 18 October 2024.

English version: *Moscow University Physics Bulletin.* 2025. **80**, No. . Pp. .

Сведения об авторах

- Дубиковский Андрей Игоревич — канд. физ.-мат. наук, доцент; тел.: (495) 939-12-90, e-mail: dubikovs@physics.msu.ru.
- Силаев Петр Константинович — доктор физ.-мат. наук, доцент, профессор; тел.: (495) 939-26-96, e-mail: silae314@yandex.ru.