Письма в ЖЭТФ, том 109, вып. 8, с. 516 – 520 

# Особенности Вигнеровских времен задержки медленных электронов потенциальной ямой с появляющимися в ней дискретными уровнями

*М. Я. Амусья*[+*1)], *А. С. Балтенков*[×]

[+] *Институт Физики им. Рака, Еврейский Университет, 91904 Иерусалим, Израиль*

[*] *Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе, 194021 С.-Петербург, Россия*

[×] *Институт Ионно-плазменных и лазерных технологий им. У. А. Арифова, 100125 Ташкент, Узбекистан*

Поступила в редакцию 18 марта 2019 г.
После переработки 18 марта 2019 г.
Принята к публикации 18 марта 2019 г.

Мы исследовали здесь специфические особенности в поведении Вигнеровских времен задержки медленных $s$-электронов, рассеивающихся сферически-симметричными прямоугольными потенциальными ямами. Мы рассмотрели потенциальные ямы, небольшое изменение параметров которых ведет к появлению в них связанных состояний. Было показано, что время задержки частицы мелкой потенциальной ямой, не имеющей связанных состояний, всегда положительно при малых энергиях электрона и меняет знак после появления уровня. Было установлено, что в момент появления первого и следующих $s$-уровней в яме время задержки ею медленных электронов испытывает скачки от положительных значений к отрицательным. Амплитуды этих скачков тем больше, чем меньше импульс электрона $k$.

DOI: 10.1134/S0370274X19080046

**1.** Мы описываем здесь особенности в Вигнеровском времени задержки в упругом рассеянии медленных электронов потенциальной ямой, вариация параметров которой ведет к образованию связанных $s$-состояний. А именно, мы показываем, что в момент появления в яме $s$-уровня, время задержки, как функция параметров ямы, испытывает скачок от положительной величины к отрицательной.

Айзенбуд, Вигнер и Смит (Eisenbud, Wigner and Smith (EWS)) впервые интерпретировали производную от фазы рассеяния по энергии частицы $E$, как время задержки центральным потенциалом рассеивающегося им волнового пакета [1–3]. Они ввели в рассмотрение EWS-время задержки, как квантово-динамическую наблюдаемую при резонансном рассеянии частиц. В настоящее время экспериментальное изучение этих времен стало возможно. Аттосекундные лазерные импульсы позволили экспериментально наблюдать времена задержки в процессах фотоионизации, и сейчас это быстро развивающаяся область исследований (см., например, [4–6] и ссылки там). Однако почти все внимание в этой области сосредоточено на фотоионизационных процессах. В противоположность этому, здесь мы концентрируемся на процессах упругого рассеяния электронов.

[1)]e-mail: amusia@vms.huji.ac.il

Целью настоящего Письма является исследование связи фазового сдвига $\delta_0(k)$ и EWS-времени задержки $\tau_s(k)$ с параметрами ямы, используя в качестве примера простую прямоугольную потенциальную яму $V(r)$ с радиусом $R$ и глубиной $U$.

В статье [7] мы исследовали парциальные EWS-времена задержки медленных электронов, упруго рассеивающихся на фуллеренах $C_{60}$, и нашли, что знак парциального времени задержки зависит от присутствия первого дискретного уровня с соответствующим орбитальным моментом $l$ в потенциальной яме фуллереновой оболочки. Мы обнаружили, что $l^{\text{th}}$ время задержки положительно, когда нет дискретных $l$-уровней в яме, и оно отрицательно, когда подобный уровень существует. Можно ожидать подобного же поведения времени задержки в момент появления в яме не только первого но, также и второго, третьего и т.д. дискретных уровней. Для того чтобы выяснить, носит ли эта особенность в поведении EWS-времени задержки универсальный характер, мы исследуем здесь $\tau_s(k)$ как функцию параметров ямы.

**2.** Зависимость фаз рассеяния $\delta_l(k)$ и, следовательно, EWS-времен $\tau_l(k)$ от параметров функции $V(r)$ может быть в латентной или явной форме. Полагая $V(r)$ прямоугольной ямой с радиусом $R$ и глубиной $U$, мы получим желаемые зависимости в явном виде, дополняя аналитическое рассмотрение некоторыми численными расчетами.

Парциальное EWS-время задержки [2] электрона потенциальным полем определяется следующим образом [7]

$$\tau_l(E) = 2\frac{d\delta_l(E)}{dE}. \quad (1)$$

Фаза $s$-рассеяния $\delta_0$ для прямоугольной потенциальной ямы описывается следующим выражением (для детали см. в [8] уравнение (17), где параметр $D_l \equiv 0$)

$$\tan\delta_0 = \frac{k\tan qR - q\tan kR}{q + k\tan qR\tan kR}. \quad (2)$$

Здесь вектор $q = \sqrt{2U + k^2}$ есть волновой вектор электрона внутри потенциальной ямы[2)]. Перепишем формулу (2) в тождественном виде [9]

$$q\cot qR = k\cot(kR + \delta_0) \quad (3)$$

и применим оператор $\partial/\partial k$ к обеим частям этого уравнения. Тогда мы получаем следующее выражение

$$q'\cot qR + q(\cot qR)' = \cot(kR + \delta_0) + k[\cot(kR + \delta_0)]', \quad (4)$$

где штрих обозначает дифференцирование по $k$. Производные в уравнении (4) равны

$$q' = \frac{k}{q}; \quad (\cot qR)' = -\frac{kR}{q\sin^2 qR};$$

$$[\cot(kR + \delta_0)]' = -\frac{(R + \delta_0')}{\sin^2(kR + \delta_0)}. \quad (5)$$

После простых преобразований получаем следующую общую формулу для производной $\delta_0'$

$$\delta_0' = \frac{\partial\delta_0}{\partial k} = -R + \frac{\sin 2(kR + \delta_0)}{2k} + $$

$$+ R\frac{\sin^2(kR + \delta_0)}{\sin^2 qR}\left(1 - \frac{\sin 2qR}{2qR}\right). \quad (6)$$

Сравним уравнение (6) с формулой (5a) в статье [2]

$$\delta_0' > -R + \frac{\sin 2(kR + \delta_0)}{2k}, \quad (7)$$

согласно которой, существует общее ограничение на поведение фазовых производных, обусловленное принципом причинности. Последний утверждает, что "рассеянная волна не может покинуть рассеиватель до того, как падающая волна достигает его" [2]. Далее мы будем использовать формулы (1), (6) и (7) в наших численных расчетах.

Парциальное EWS-время задержки связано с производной $\delta_0'$ следующим образом:

$$\tau_s(k, U, R) = 2\frac{d\delta_0}{dE} = 2\frac{d\delta_0}{dk}\frac{dk}{dE} = \frac{2}{k}\delta_0'(k, U, R). \quad (8)$$

Мы ввели глубину потенциальной ямы $U$ и ее радиус $R$ как аргументы в формуле (8), чтобы подчеркнуть, что производная (6) и время задержки (8) есть функции трех переменных, а именно $k$, $U$ и $R$. Для малых энергий электрона $E = k^2/2$, согласно Вигнеровскому пороговому закону [10], $s$-фазовый сдвиг пропорционален $k$, $\delta_0(k \to 0) \sim k$. Поэтому $s$-тое EWS-время задержки (8) вблизи порога стремится к бесконечности, как $\tau_s(k, U, R)_{k\to 0} \propto \pm 1/k$. Далее мы будем рассматривать функции (6) и (7) при малых, но конечных величинах электронных энергий.

**3.** Начнем с численного исследования поведения $s$-парциального EWS-времени задержки, полагая, что глубина потенциальной ямы $U$ переменна, тогда как ее радиус $R$ постоянен, и равен двум атомным единицам, $R = 2$. Условие появления в яме дискретного $s$-уровня описывается следующим выражением (см. уравнение (12) в [8]):

$$U^{(n)} = \frac{(2n-1)^2\pi^2}{8R^2}. \quad (9)$$

Здесь $n$ – номер $s$-уровня в яме. Величины первых трех критических глубин в потенциальной яме с $R = 2$ есть, соответственно

$$U^{(1)} = \frac{\pi^2}{32} \approx 0.308; \; U^{(2)} = \frac{9\pi^2}{32} \approx 2.776;$$

$$U^{(3)} = \frac{25\pi^2}{32} \approx 7.711. \quad (10)$$

Рисунок 1 представляет EWS-время задержки $\tau_s(U)$ как функцию $U$ для трех малых величин электронного волнового вектора $k$. Для потенциальных ям с отсутствием связанных уровней (интервал $0 < U < U^{(1)}$) время задержки положительно и меняет знак после появления первого $s$-уровня в яме с ростом ее глубины $U$. Итак, малые изменения параметров потенциальной ямы (в данном случае это глубина ямы $U$) в окрестности критического значения $U^{(1)}$, ведут к скачку функции $\tau_s(U)$. Эта специфическая особенность в поведении EWS-времени задержки имеет универсальный характер, поскольку мы можем наблюдать такую же картину в окрестностях других критических величин переменной $U$. Амплитуды резонансов кривых, представленных на рис. 1, быстро убывают с ростом величины $k$. Когда волновой вектор увеличивается в два раза от $k = 0.1$

[2)] В статье мы используем атомную систему единиц (at. un.).

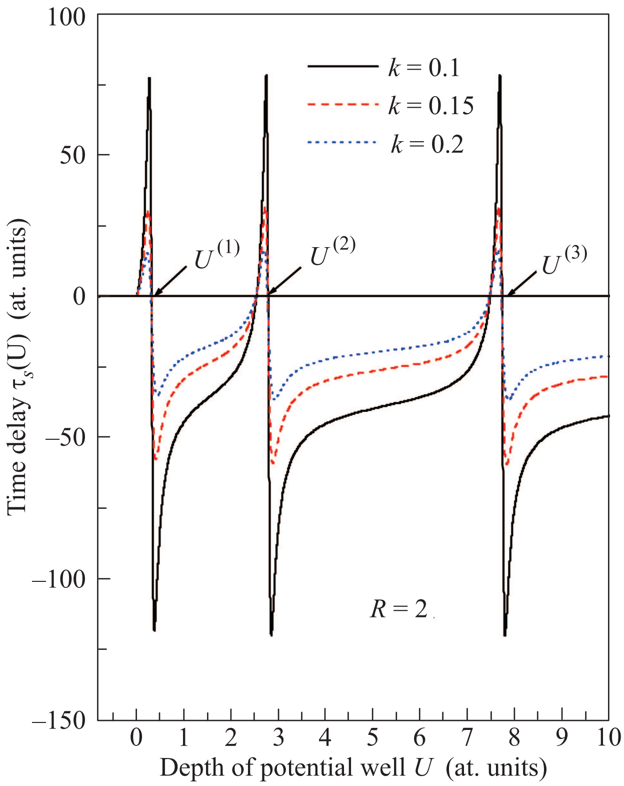


Рис. 1. (Цветной онлайн) Время задержки $\tau_s(U)$ из уравнений (1), (6), как функция параметра $U$ при малых волновых векторах электронов $k = 0.1$, 0.15 и 0.2. Величины первых критических глубин потенциальной ямы с радиусом $R = 2$ есть: $U^{(1)} \approx 0.308$; $U^{(2)} \approx 2.776$; $U^{(3)} \approx 7.711$

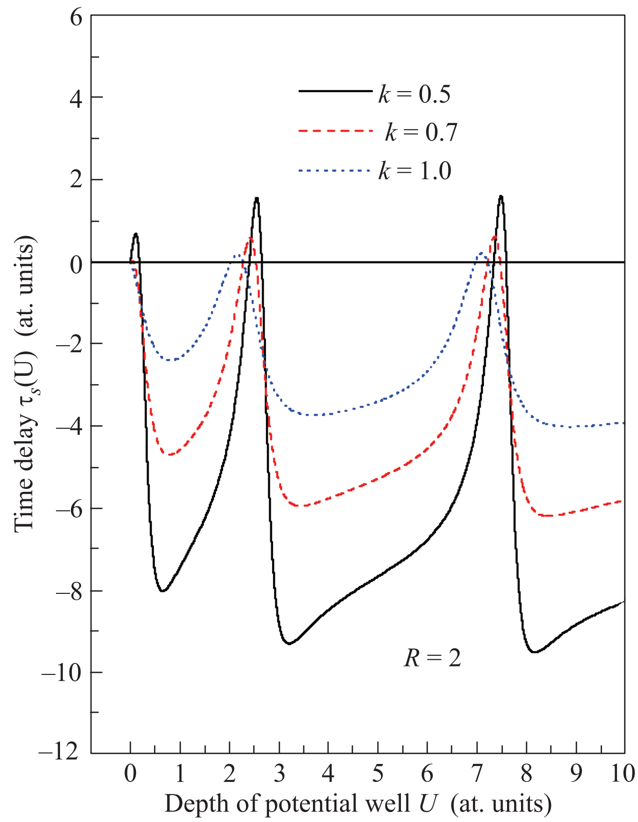


Рис. 2. (Цветной онлайн) Время задержки $\tau_s(U)$ из уравнений (1), (6), как функция $U$ для электронных волновых векторов $k = 0.5$, 0.7 и 1.0. Радиус потенциальной ямы по-прежнему $R = 2$

до 0.2, амплитуды соответствующих кривых в первой рассчитанной точке после критического значения $U^{(1)}$ отличаются более, чем на порядок.

Относительно простое резонансное поведение функции $\tau_s(U)$ для очень малых волновых чисел $k$ меняется с ростом импульса электрона, что иллюстрируется рис. 2, где представлены результаты расчета функции $\tau_s(U)$ при $k = 0.5$, 0.7 и 1.0. Мы наблюдаем здесь значительно более сложную картину. Обратим внимание на существенно различный масштаб осцилляций кривых на рис. 1 и 2. В первом случае интервал вариаций времен задержки порядка от $\sim -100$ до $+100$ ат. ед., тогда как на втором рисунке этот интервал много меньше: от $\sim -4$ до $+2$ ат. ед. Это есть иллюстрация следующего общего поведения производной от фазового сдвига [11]

$$\delta_0'(k \to \infty) \to 0. \tag{11}$$

Исследуем теперь поведение $s$-парциального EWS-времени, предполагая, что радиус потенциальной ямы $R$ является переменной, в то время как глубина потенциальной ямы $U$ постоянна. Условие появления $s$-дискретных уровней в потенциальной яме $V(r)$ определяется следующим соотношением (см. уравнение (12) в [8])

$$R^{(n)} = \frac{(2n-1)\pi}{2\sqrt{2U}}. \tag{12}$$

Здесь $n$, как и выше, является номером $s$-уровня в яме. На рисунке 3 изображены производные фазового сдвига и EWS-времена задержки, как функции $R$ для фиксированных электронных волновых чисел $k$ и глубин ямы $U$. На верхней панели этого рисунка представлена сумма $\delta_0'(R) + R$. Согласно общему ограничению $\delta_0'(R) + R > 0$ (см. уравнение (2) в [2]), кривые на этой панели не должны "проникать" через ось $R$ в нижнюю отрицательную полуплоскость, поскольку центр рассеяния имеет конечный радиус, так что условие причинности может быть применено. Но согласно [2], волновая природа частиц допускает некоторые нарушения этого ограничения, и мы можем видеть это в начале кривых. Эти нарушения исчезают с ростом $R$.

Как и на рисунках 1 и 2, время задержки $\tau_s(R)$ представляет собой знакопеременную функцию, по крайней мере, вблизи порога при малых энергиях электронов. Однако если в случае $U$-зависимости критические значения глубин потенциальной ямы $U^{(i)}$ совпадают с нулями кривых на рис. 1, то на рис. 3 мы видим близость, а не совпадение нулей кривых с критическими значениями $R^{(i)}$. Это иллюстрируется табл. 1, где корреляция между позициями нулей кривых на оси $R$ и значениями $R^{(i)}$ несомненна.

**Таблица 1.** Сравнение позиций нулей кривых при изменениях параметров $U$ и $R$. Критические величины радиусов $R^{(i)}$ взяты из уравнения (12). Положения нулей кривых на рис. 3 даются в скобках. Все параметры даны в атомных единицах

| $U$ | $R^{(1)}$ | $R^{(2)}$ | $R^{(3)}$ | $R^{(4)}$ |
|---|---|---|---|---|
| 0.05 | 4.967 (4.72) | 14.902 (14.22) | 24.836 (–) | 34.771 (–) |
| 0.1 | 3.512 (3.42) | 10.537 (10.27) | 17.562 (17.15) | 24.587 (–) |
| 0.15 | 2.868 (2.82) | 8.604 (8.45) | 14.339 (14.10) | 20.075 (19.74) |

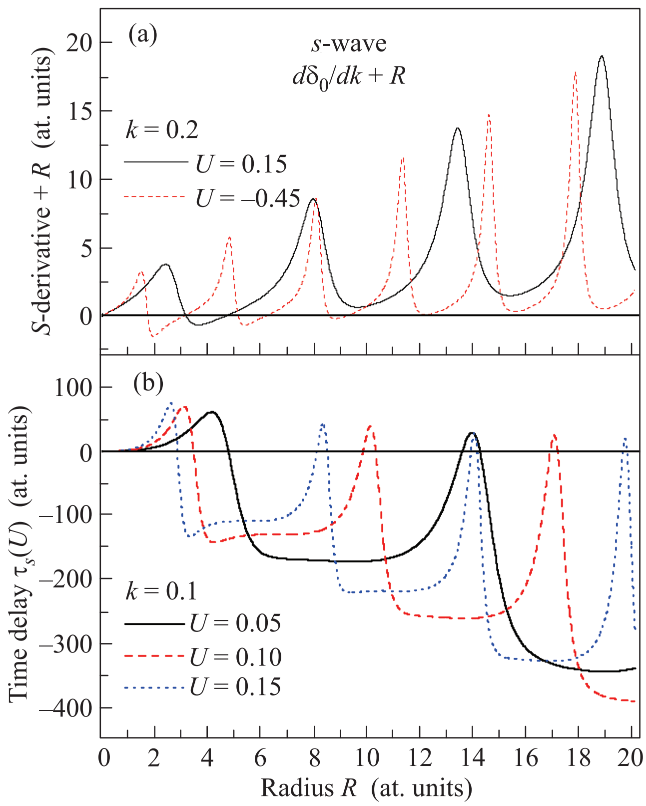


Рис. 3. (Цветной онлайн) $R$-зависимость производной $s$-того фазового сдвига (уравнение (6)) и времена задержки (1), (6) для электронных импульсов $k = 0.1$ и 0.2 при следующих глубинах потенциальных ям: $U = 0.05$, 0.1, 0.15 и 0.45. Верхняя панель есть сумма $d\delta_0/dk + R$, тогда как нижняя – EWS-время задержки $\tau_s(R)$. Все параметры на рисунке даны в атомных единицах

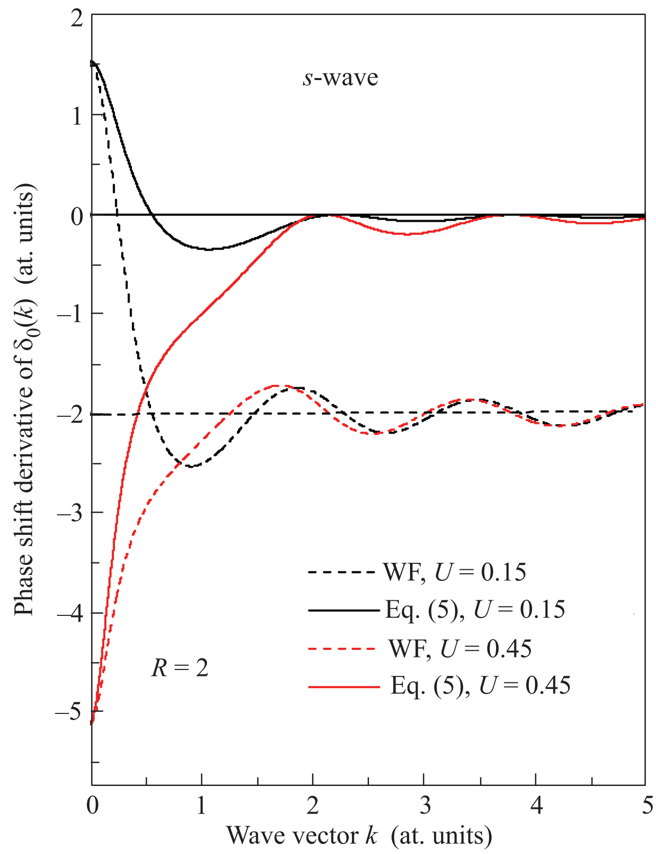


Рис. 4. (Цветной онлайн) Производные $s$-тых фазовых сдвигов при рассеянии электрона потенциальной ямой с глубиной $U$ до появления в ней первого $s$-уровня ($U = 0.15$) и после появления этого уровня ($U = 0.45$). Критическое значение для глубины ямы $U^{(1)}$ при $R = 2$ – это $U^{(1)} = 0.308$. Сплошные линии – результат расчета с уравнением (6); пунктирные линии – результат расчета с уравнением (5а) из статьи Вигнера [2]

На рисунке 4 представлено EWS-время задержки $\tau_s(k)$, как функция волнового вектора $k$. На этом рисунке две пары кривых. Первая из них, с глубиной ямы $U = 0.15$ и радиусом $R = 2$, соответствует случаю, когда в яме нет дискретных уровней. Вторая пара соответствует потенциальной яме с первым появившимся $s$-уровнем ($U = 0.45$ при $R = 2$). В дополнение к этим кривым, рассчитанным по формуле (6) (сплошные линии) есть также функции Вигнера (WF), рассчитанные по формуле (7) (пунктирные линии). Производная фазового сдвига для рассеяния медленных электронов на потенциальной яме без связанного $s$-уровня положительна, и меняет знак после появления первого дискретного уровня в яме [8]. Как и на рис. 3, отрицательные части пунктирных кривых есть проявления волновой природы рассеивающей частицы. Тем не менее, ограничение $\delta_0'(R)+R > 0$ сохраняется и в квантовой теории. Это справедливо, в частности, для больших импульсов $k$ [2].

Суммируя результаты численных расчетов, можно сделать вывод, что EWS-задержка времени $\tau_s(k, U, R)$ является знакопеременной функцией относительно всех трех аргументов с очень интересным поведением.

**4.** Мы исследовали EWS-времена задержки для медленного $s$-рассеяния электрона на прямоугольных потенциалах притяжения в зависимости от их параметров: глубины ямы $U$ и ее радиуса $R$. Мы сосредоточились на таких параметрах потенциальных ям, которые близки к их критическим значениям, при которых в них появляются $s$-состояния с нулевой энергией связи. Мы рассмотрели глубины и радиусы ям, при которых потенциал поддерживает произвольное количество $s$-уровней.

Представленный выше анализ позволяет отметить некоторые специфические особенности в поведении времени задержки, которые являются универсальными, а именно: i) функции $\tau_s(U)$, $\tau_s(R)$ и $\tau_s(k)$ при медленном рассеянии электронов мелкой потенциальной ямой без связанного $s$-уровня всегда положительны; они меняют свой знак после появления первого дискретного уровня, ii) небольшие изменения параметров потенциальной ямы в окрестностях появления первого и любых других $s$-уровней приводят к мгновенным скачкам функции $\tau_s(U)$ с положительного значения на отрицательное. Амплитуда этих скачков увеличивается с уменьшением волнового числа электронов $k$ (см. также рис. 1 в [8]). Это специфическое поведение функции $\tau_s(U)$, соответствующей нулевому орбитальному моменту $l = 0$, и оно связано с расходимостью $s$-времени вблизи порога (см. рис. 1 в [8]). Для орбитальных моментов $l > 0$ EWS-задержка времени стремится к нулю вблизи порога как $\tau_l(k) \propto k^{2l-1}$, и поэтому функции $\tau_l(U)$ плавно меняют знак вблизи критических точек на оси $U$, как показано на рис. 2 в [8]. Функции $\tau_s(R)$ меняют знак также как и функции $\tau_s(U)$, но перемены знака происходят без скачков.

Отдельной и важной проблемой является оценка фазовых сдвигов и времен задержки не для простой модели, а для определения временной задержки в процессах рассеяния электронов на атомах. Многое известно о фазах рассеяния. Для них существуют относительно надежные результаты *ab-initio* расчетов [12], включающие также рассеяние при низких энергиях электронов. В ряде случаев добавление притягивающего поляризационного взаимодействия изменяет при малой энергии электрона производную $s$-фазы от отрицательных Хартри–Фоковских значений до положительных. Это изменение приводит к появлению широко известных минимумов Рамзауэра в сечении рассеяния медленных электронов атомами благородных газов. Этот эффект, однако, не связан с образованием дополнительного дискретного электронного уровня. Было бы очень интересно, и это является одним из текущих направлений нашей деятельности, раскрыть возможную связь между модификациями атомного поля и переходами на пути от благородного атома к его ближайшему соседу, который способен образовывать отрицательной ион.

Интересно было бы измерить временную задержку в процессах рассеяния. В настоящее время экспериментальная деятельность в этой области, как упомянуто в начале Письма, сосредоточена на исследовании временной картины фотоионизации атомов и молекул с помощью высокоинтенсивных аттосекундных импульсов. В этом случае кратковременность светового импульса из-за принципа неопределенности приводит к большому разбросу энергии фотонов. Отметим, что описанные в этом Письме эффекты требуют для своего наблюдения высокого разрешения для энергии рассеивающихся электронов, таким образом, накладывая сильное ограничение на точность измерений временной задержки.

А. С. Балтенков благодарен за поддержку Грант фонда Узбекистана ОТ-Ф2-46.


1. L. E. Eisenbud, *Ph. D. thesis*, Princeton University, Princeton, USA (1948).
2. E. P. Wigner, Phys. Rev. **98**, 145 (1955).
3. F. T. Smith, Phys. Rev. **118**, 349 (1960).
4. R. Pazourek, S. Nagele, and J. Burgdörfer, Rev. Mod. Phys. **87**, 765 (2015).
5. A. S. Kheifets, Phys. Rev. A **87**, 063404 (2013).
6. P. Hockett, E. Frumker, D. M. Villeneuve, and P. B. Corkum, J. Phys. B **49**, 095602 (2016).
7. M. Ya. Amusia and A. S. Baltenkov, J. Phys. B **52**, 015101 (2019).
8. M. Ya. Amusia and A. S. Baltenkov, e-print ArXive 1901.00411 (2019).
9. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics, Non-Relativistic Theory*, Pergamon Press, Oxford (1965).
10. E. P. Wigner, Phys. Rev. **73**, 1002 (1948).
11. M. Wellner, Am. J. Phys. **32**, 787 (1964).
12. M. Ya. Amusia, L. V. Chernysheva, and V. G. Yarzhemsky, *Handbook of theoretical Atomic Physics, Data for photon absorption, electron scattering, and vacancies decay*, Springer, Berlin (2012), 812 p.