

ЛЕКЦИЯ 15

Явление Стокса

Рассмотрим еще одно применение асимптотических методов — квазиклассическое приближение. Если рассматривать его в комплексной плоскости, то построение равномерного разложения становится непростой задачей. Ниже рассмотрено несколько примеров, поясняющих, как строить равномерные разложения. Более подробное изложение правил обхода простой точки поворота и решения задачи о подбарьерном прохождении можно найти в конспекте [49]. Другие примеры из квантовой механики приведены в учебнике [50]. Общий математический подход с полной классификацией матриц перехода изложен в книге [51], примеры из теории специальных функций см. в [42].

15.1 Квазиклассическое приближение

Одномерное уравнение Шредингера

$$\psi'' + k^2\psi = 0, \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - U) \quad (15.1)$$

для частицы с энергией E в потенциале $U(x)$ чаще всего не решается точно, но можно построить асимптотическое разложение решения при $k \rightarrow \infty$. Вместо

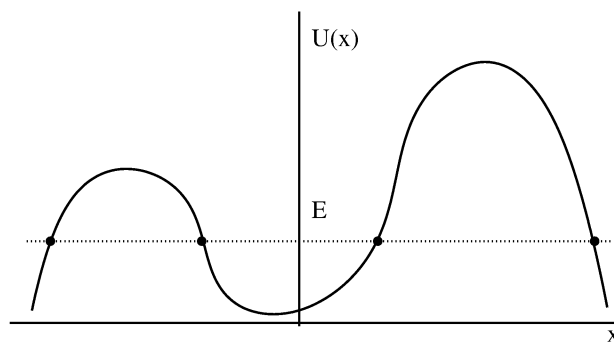


Рис. 15.1: Потенциальная энергия U как функция координаты x .

больших k можно формально также рассматривать малые $\hbar \rightarrow 0$, поэтому полученное разложение называется *квазиклассическим приближением*. Разложение, особенно его старшие порядки, удобнее всего строить, если ввести новую неизвестную функцию $w(x) = \psi'/\psi$. Дифференцируя w , получаем из (15.1) уравнение Рикатти

$$w' + k^2(x) + w^2 = 0. \quad (15.2)$$

Ищем теперь решение в виде ряда по степеням $1/k$:

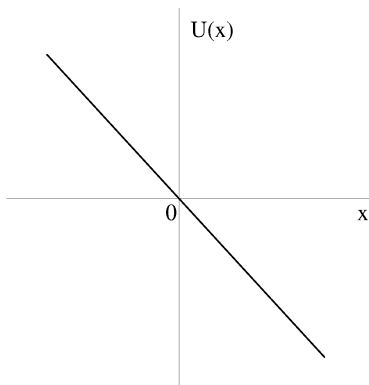
$$w = w_0 + w_1 + w_2 + \dots,$$

где $w_0 \sim k$, $w_1 \sim 1$, $w_2 \sim 1/k$, и т.д. Подставляя ряд в (15.2) и приравнивая члены равного порядка, найдем последовательно $w_0 = \pm ik$, $w_1 = k'/2k$ и т.д. Остальными членами можно пренебречь, если $k'/k \ll k$, т.е. длина волны де Бройля $\lambda = 2\pi/k$ медленно меняется с координатой $d\lambda/dk \ll 1$. Фундаментальная система решений получается интегрированием

$$\psi_{\pm} = \frac{e^{\pm iS}}{\sqrt{k}}, \quad S = \int k(x) dx. \quad (15.3)$$

Условие применимости нарушается в окрестности классических *точек поворота*, где $k^2 = 0$, т.е. потенциальная энергия равна полной. На рисунке 15.1 показан пример потенциальной кривой, а уровень энергии изображен точками. Всего в примере 4 классических точки поворота, три классически доступные ($E > U$) и две классически запрещенные области ($E < U$). Чтобы гладко сшить решения в разрешенных и запрещенных областях, точку поворота обходят в комплексной плоскости. Надо выбрать контур обхода достаточно далеко от точки поворота, чтобы выполнялось квазиклассическое приближение, но достаточно близко, чтобы можно было пользоваться линейным членом разложения потенциала в окрестности точки поворота [4]. Для обхода точки поворота пользуются методом эталонных уравнений, простейшее из которых мы сейчас рассмотрим.

15.2 Простая точка поворота



Простой точкой поворота x_0 (или точкой поворота порядка $q = 1$) называется такая, в которой $k(x_0) = 0, U'(x_0) \neq 0$. Если разложить $k^2(x) \approx -2mU'(x_0)(x - x_0)/\hbar^2$, отсчитывать координату x от точки поворота, а вместо x писать комплексную переменную z , уравнение Шредингера в окрестности простой точки поворота сведется к эталонному уравнению

$$\psi'' + cz\psi = 0, \quad (15.4)$$

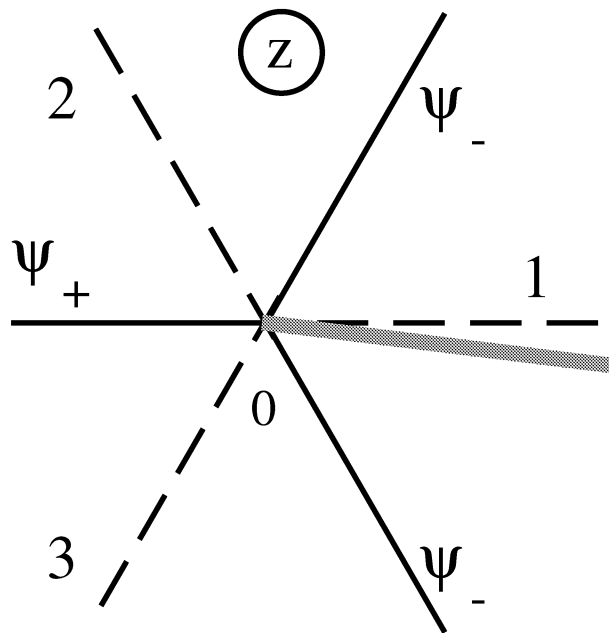


Рис. 15.2: Стоксовы (пунктир) и антистоксовы (сплошные) линии в окрестности простой точки поворота.

где c постоянная. Точное решение уравнения выражается через функцию Эйри. Нас, однако, интересует приближенное решение

$$\psi = A\psi_+ + B\psi_-, \quad \psi_{\pm} = z^{-1/4}e^{\pm iS}, \quad S = Cz^{3/2},$$

где $C = 2\sqrt{c}/3$, A, B — постоянные. Обратим внимание, что в приближенном решении получились дробные степени z . Чтобы использовать приближение, надо разрезать комплексную плоскость по лучу $(0, \infty)$, тогда как точное решение является аналитической функцией. Разрез проведем для определенности чуть ниже положительной действительной полуоси и изобразим на рис. 15.2 серой полосой.

Нарисуем также линии, на которых обращается в нуль вещественная и мнимая части фазы S . Будем называть здесь *стоксовыми линиями* такие, на которых $\text{Im } S = 0$, и изображать их пунктиром. *Антистоксовыми линиями* назовем такие кривые, на которых $\text{Re } S = 0$, и изобразим их сплошными линиями. На стоксовых линиях оба решения ψ_{\pm} осциллируют, как в классически разрешенной области, и имеют один и тот же порядок величины. На антистоксовых линиях одно из решений растет при увеличении $|z|$ (назовем его *доминантным*), а другое экспоненциально убывает (*субдоминантное*). Аналогично, решение состоит из двух действительных экспонент в классически запрещенной области, причем одной из них мы обязаны пренебречь, потому что учет экспоненциально малых членов в асимптотическом разложении был бы превышением точности.

Только на линиях Стокса мы должны учитывать оба решения.

В нашем случае, если обозначить $\rho = |z|$, $\theta = \arg z$, получится

$$S = C\rho^{3/2}e^{3i\theta/2} = C\rho^{3/2} \left(\cos \frac{3\theta}{2} + i \sin \frac{3\theta}{2} \right).$$

Три стоксовы линии пройдут при $\theta = 0, \pm 2\pi/3$, а три антистоксовы — при $\theta = \pm \pi/3, \pi$. В общем случае из точки поворота порядка q ($U' = U'' = \dots = 0, U^{(q)} \neq 0$) выходит $q + 2$ линии Стокса, а углы между соседними линиями составляют $2\pi/(q + 2)$. Линии Стокса могут начинаться и кончаться только в точках поворота или на бесконечности. Совокупность всех точек поворота и линий Стокса назовем *графом Стокса*. Антистоксовы линии пройдут между стоксовыми. Если граф Стокса известен, антистоксовы линии всегда можно дорисовать.

В каждом секторе между линиями Стокса при $\rho \rightarrow \infty$ доминирует свое решение: в секторе 1–2 $|\psi_-| \gg |\psi_+|$, в секторе, наоборот, 2–3 $|\psi_+| \gg |\psi_-|$, в секторе снова 3–1 $|\psi_-| \gg |\psi_+|$. На рисунке 15.2 доминантное решение подписано в середине каждого сектора возле антистоксовых линий. Если мы поступим по правилам и отбросим субдоминантные решения, разложение получится неравномерным по аргументу θ . Попробуем сделать иначе, удержим экспоненциально малое решение, которое не испортит асимптотического разложения в своем секторе. Зато при этом решение можно будет продолжить в соседний сектор, где субдоминантное решение становится доминантным. Впрочем, продолжить можно не далее, чем до ближайшей антистоксовой линии в середине следующего сектора, где оба решения одного порядка, удержанное решение перестанет быть малым и приведет к ошибке. Чтобы можно было продолжить решение дальше в смежный сектор, надо после пересечения линии Стокса выбрать другую линейную комбинацию фундаментальных решений. Коэффициенты разложения в различных секторах связаны линейным преобразованием.

Ищем решение в секторе 1–2 в виде $\psi = A_1\psi_+ + B_1\psi_-$, в секторе 2–3 $\psi = A_2\psi_+ + B_2\psi_-$, а в секторе 3–1 $\psi = A_3\psi_+ + B_3\psi_-$. При переходе из сектора в следующий сектор коэффициенты умножаются на *матрицу перехода*

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \Omega_{21} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \Omega_{32} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \Omega_{13} \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix}.$$

Свойства матрицы перехода

1. Коэффициент при доминантном решении сохраняется.
2. Если бы доминантного решения не было, сохранялся бы коэффициент при субдоминантном.
3. К коэффициенту при субдоминантном решению добавляется коэффициент при доминантном, умноженный на константу.

Свойства 1, 2 непосредственно следуют из нашего рассмотрения, а свойство 3 из 1, 2. Из свойств можно получить вид матрицы перехода. В частности, $B_2 = B_1$ (по свойству 1). Коэффициент A_2 в секторе 2–3 дается линейной комбинацией $A_2 = A_1 + \alpha B_1$, потому что в первом секторе доминирует решение ψ_- , а значит коэффициент A_1 при субдоминантном решении сохранялся бы при $B_1 = 0$ (по свойству 2). Скачок коэффициентов на линиях Стокса называется *явлением Стокса*, а неопределенный пока коэффициент α — *константой Стокса*.

В соответствии со свойствами матрицы перехода имеют вид

$$\Omega_{21} = \begin{pmatrix} 1 & \alpha \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \Omega_{32} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \alpha & 1 \end{pmatrix}, \quad \Omega_{13} = \begin{pmatrix} 1 & \alpha \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (15.5)$$

При полном обходе точки поворота мы пересечем разрез. Вычислим скачок на разрезе при переходе с нижнего берега на верхний. Вместо пересечения разреза можно изменить аргумент числа $z \rightarrow ze^{-2\pi i}$, тогда множитель перед экспонентами умножится на $-i$: $z^{1/4} \rightarrow z^{1/4}e^{-\pi i/2}$. Показатели экспонент сменяют знаки: $z^{3/2} \rightarrow z^{3/2}e^{3\pi i} = -z^{3/2}$. Тогда после полного обхода в положительном направлении решения перейдут друг в друга с точностью до множителя i

$$\psi_+ \rightarrow i\psi_-, \quad \psi_- \rightarrow i\psi_+.$$

Значит произведение всех трех матриц перехода должно быть равно

$$\Omega_{13}\Omega_{32}\Omega_{21} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

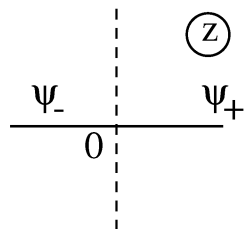
Перемножая матрицы (15.5), получим систему 4 уравнений на α , из которой находится константа Стокса $\alpha = i$.

Упражнение 15.1. Показать, что в общем случае точки поворота порядка q константа Стокса равна

$$\alpha = 2i \cos \frac{\pi}{q+2}. \quad (15.6)$$

Рассмотрим два примера

1. Точка нулевого порядка ($q = 0$):



$$\psi'' - \kappa^2 \psi = 0, \quad \kappa = \text{const} \neq 0.$$

Решения $\psi_+ = e^{\kappa z}$, $\psi_- = e^{-\kappa z}$, линии Стокса — мнимая ось $\text{Re } z = 0$. Если оставлять только доминирующее решение, то в правой полуплоскости $\psi \sim \psi_+$, а в левой $\psi \sim \psi_-$.

Оба решения теряют применимость на мнимой оси. Для

построения равномерного по $\arg z$ решения надо найти константу Стокса. В левой полуплоскости обозначим $\psi_1 = A_1\psi_+ + B_1\psi_-$, в правой: $\psi_2 = A_2\psi_+ + B_2\psi_-$. Матрицы перехода

$$\Omega_{21} = \begin{pmatrix} 1 & \alpha \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \Omega_{12} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \alpha & 1 \end{pmatrix}$$

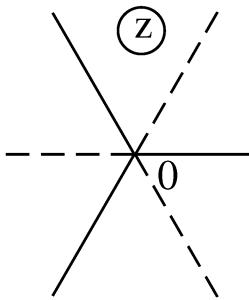
при перемножении должны давать единичную матрицу, откуда

$$\begin{pmatrix} 1 & \alpha \\ \alpha & 1 + \alpha^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \alpha = 0.$$

Из формулы (15.6) константа Стокса тоже получается нулевой.

2. Уравнение Эйри с точкой поворота первого порядка ($q = 1$):

$$\psi'' - z\psi = 0.$$



Классически доступная область, где проходит линия Стокса, находится при $z = x < 0$, так что граф Стокса рис. 15.2 получится повернутым на 180° . Мы уже находили асимптотику функции Эйри (13.7) в классически запрещенной области

$$\text{Ai}(z) \approx \frac{e^{-\frac{2}{3}z^{3/2}}}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}}, \quad |z| \rightarrow +\infty, \quad |\arg z| < \frac{2\pi}{3}.$$

Вместо того, чтобы отдельно находить асимптотику в классически разрешенной области $z = -|x| \rightarrow -\infty$, мы теперь, зная константу Стокса, можем продолжить асимптотику (13.7) в соседний сектор

$$\begin{aligned} \text{Ai}(z) &\approx \frac{e^{-i\pi/4}}{2\sqrt{\pi}|x|^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}|x|^{3/2}e^{3\pi i/2}\right) + i\frac{e^{-i\pi/4}}{2\sqrt{\pi}|x|^{1/4}} \exp\left(\frac{2}{3}|x|^{3/2}e^{3\pi i/2}\right) = \\ &= \frac{1}{2\sqrt{\pi}|x|^{1/4}} \left[\exp\left(\frac{2}{3}i|x|^{3/2}\right) + \exp\left(-\frac{2}{3}i|x|^{3/2}\right) \right] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}|x|^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}|x|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right), \quad |x| \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

Полученная асимптотика, естественно, совпадает с результатами метода перевала (13.8) и метода стационарной фазы из примера 12.4.

Отсюда следует правило перехода из классически запрещенной в разрешенную область: затухающая экспонента заменяется удвоенным косинусом

$$\frac{A}{2k^{1/2}} \exp\left(-\int k(x) dx\right) \longrightarrow \frac{A}{k^{1/2}} \cos\left(\int k(x) dx - \frac{\pi}{4}\right).$$

Когда ответ уже известен, можно сформулировать это правило и по-другому: следует обойти простую точку поворота сверху и снизу и сложить ответы. Действительно, при таких обходах $z \rightarrow ze^{\pm i\pi}$, $z^{3/2} \rightarrow z^{3/2}e^{\pm 3i\pi/2} = \mp iz^{3/2}$, откуда

$$\text{Ai}(-x) \approx \frac{1}{2\sqrt{\pi}|x|^{1/4}} \left[\exp\left(\frac{2}{3}i|x|^{3/2} - i\frac{\pi}{4}\right) + \exp\left(-\frac{2}{3}i|x|^{3/2} + i\frac{\pi}{4}\right) \right].$$

В квантовой механике встречаются задачи с различным числом точек поворота. Квазиклассическое приближение в комплексной плоскости строится, если сначала изобразить соответствующий граф Стокса. В следующем разделе мы рассмотрим две задачи с двумя точками поворота: о прохождении через барьер и об уровнях энергии в потенциальной яме.

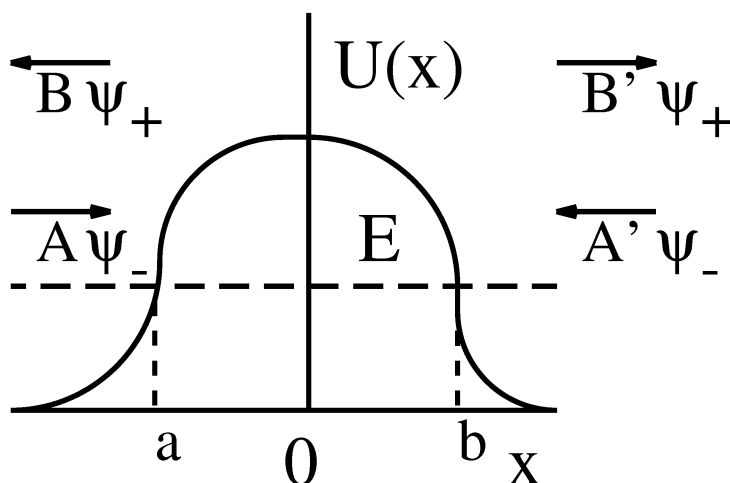


Рис. 15.3: Потенциальный барьер. Пунктирная горизонтальная линия обозначает полную энергию, стрелками показаны сходящаяся и расходящаяся волна.

15.3 Две простых точки поворота

1. В одномерной задаче рассеяния предполагается, что на бесконечности, где $U \rightarrow 0$. Фундаментальная система решений уравнения Шредингера

$$\psi_{\pm} = \frac{e^{\pm i \int k(x') dx'}}{\sqrt{k(x)}}$$

состоит из сходящейся волны $\psi_{-} \rightarrow e^{-ik_0|x|}$ и расходящейся $\psi_{+} \rightarrow e^{+ik_0|x|}$, $k_0 = \sqrt{2mE/\hbar^2}$. На рисунке 15.3 показаны две точки поворота a, b . Слева от барьера $\psi(x \rightarrow -\infty) = A\psi_{-} + B\psi_{+}$, справа $\psi(x \rightarrow +\infty) = A'\psi_{-} + B'\psi_{+}$. Если волна падает слева, то $A' = 0$. Тогда коэффициенты отражения R и прохождения T определяются через отношение коэффициентов разложения волновой функции

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2, \quad T = \left| \frac{B'}{A} \right|^2.$$

Построение равномерного разложения начнем с графа Стокса. Для изображения качественной картины (рис. 15.1) достаточно симметричных соображений. Вблизи каждой точки поворота картина должна выглядеть, как при $q = 1$, т.е. три линии Стокса должны выходить под углом 120° друг к другу. Вдали, когда $|z| \gg b - a$, картина должна быть с четырьмя линиями Стокса под углом 90° , как от точки порядка $q = 2$. Базисные волновые функции для точки с $q = 2$ имеют вид

$$\psi_{\pm} = z^{-1/2} e^{\pm iz^2}.$$

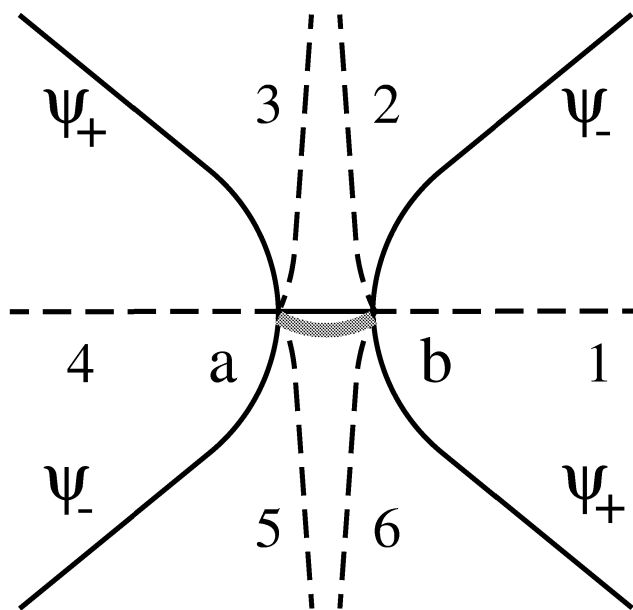


Рис. 15.4: Граф Стокса для задачи о прохождении через потенциальный барьер. Серой полосой обозначен разрез.

Стартуя с линии Стокса 1, обойдем разрез в положительном направлении. В секторе 1–2 доминирует решение ψ_- , поэтому

$$\Omega_{21} = \begin{pmatrix} 1 & \alpha \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

В секторе 2–3 матрица перехода единичная, потому что, проходя этот сектор, мы не пересекаем антистоксову линию. Чтобы продолжить обход, надо сменить начало отсчета — перейти от точки b к точке a . Волновая функция умножится на экспоненту

$$\psi_{\pm} \rightarrow \psi_{\pm} \exp \left[\pm i \int_b^a k(x') dx' \right] = \psi_{\pm} e^{\pm \Phi}, \quad \Phi = \int_a^b \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U(x) - E)} dx,$$

где Φ — *фазовый интеграл*. Иногда и сам метод построения равномерной квазиклассической асимптотики называют методом фазовых интегралов. Значит, матрица перехода будет

$$\Omega_{32} = \begin{pmatrix} e^{\Phi} & 0 \\ 0 & e^{-\Phi} \end{pmatrix}.$$

В секторе 3–4 доминирует решение ψ_+ . Поэтому матрица перехода

$$\Omega_{43} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \alpha & 1 \end{pmatrix}.$$

Мы уже обошли половину окружности и получили

$$\Omega_{41} = \Omega_{43}\Omega_{32}\Omega_{21} = \begin{pmatrix} e^\Phi & \alpha e^\Phi \\ \alpha e^\Phi & \alpha^2 e^\Phi + e^{-\Phi} \end{pmatrix}.$$

Чтобы замкнуть контур и вернуться на линию Стокса 1, надо возвести матрицу Ω_{41} в квадрат. С другой стороны, предэкспонента при обходе изменит знак: $z^{-1/2} \rightarrow z^{-1/2}e^{-i\pi}$, значит

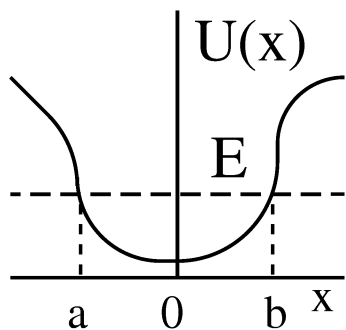
$$\Omega_{41}^2 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Из получившейся системы уравнений находим константу Стокса $\alpha = i\sqrt{1 + e^{-2\Phi}}$. Теперь мы знаем матрицу

$$\Omega_{41} = e^\Phi \begin{pmatrix} 1 & \alpha \\ \alpha & -1 \end{pmatrix},$$

которая осуществляет переход от волновой функции слева от барьера к волновой функции справа: $A' = e^\Phi(A + \alpha B)$, $B' = e^\Phi(\alpha A - B)$. Из условия $A' = 0$ найдем $B/A = -1/\alpha$ и $B'/A = e^\Phi(\alpha + 1/\alpha)$, откуда получим известные квазиклассические формулы для коэффициентов отражения и прохождения

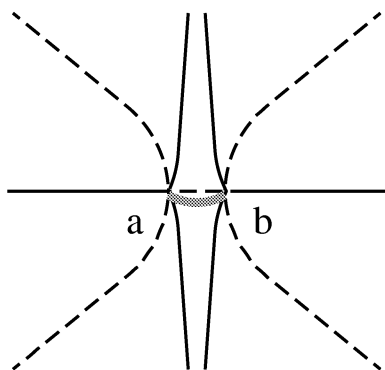
$$R = \frac{1}{1 + e^{-2\Phi}}, \quad T = \frac{1}{1 + e^{+2\Phi}}.$$



2. В задаче о частице в потенциальной яме, в отличие от барьера (рис. 15.3), классически разрешенная область находится внутри интервала $[a, b]$, поэтому стоксовы и антистоксовы линии графе Стокса 15.4 поменяются местами. При обходе по контуру Γ вокруг разреза базисные функции ψ_\pm умножатся на $e^{\pm i\Psi}$, где

$$\Psi = \oint_\Gamma k(z) dz = 2 \int_a^b \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))} dx.$$

У каждого решения должен измениться знак, поэтому $\Psi = 2\pi n + \pi$. Получается условие квантования Бора—Зоммерфельда.



Таким образом, задача о построении равномерного квазиклассического разложения в комплексной плоскости проводится в три этапа

- 1° ТОПОЛОГИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ. Построение графа Стокса.
- 2° АНАЛИТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ. Нахождение константы Стокса методом эталонных уравнений.
- 3° АЛГЕБРАИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ. Перемножение матриц перехода.