

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО
ОБРАЗОВАНИЯ
"МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА"

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

КАФЕДРА ФИЗИКИ ЧАСТИЦ И КОСМОЛОГИИ

КУРСОВАЯ РАБОТА

Метод Ландау для потенциалов с мягкими особенностями

Студент:

Колосов Роман Денисович

Научный руководитель:

кандидат физ.-мат. наук, с.н.с. ИЯИ РАН

Левков Дмитрий Геннадиевич

Москва, 2025 г.

Содержание

1 Введение	1
2 Пример квазиклассического вычисления	2
2.1 Матричные элементы гармонического осциллятора	2
2.2 Сравнение с точным ответом	5
3 Потенциал с мягкой особенностью	6
3.1 Деформация контура	6
3.2 Оценка вкладов различных участков контура	7
3.3 Интеграл вблизи сингулярности	12
3.4 Численное вычисление экспоненты подавления	15
3.5 Переформулировка в терминах комплексных классических траекторий	17
4 Заключение	19

1 Введение

Метод Ландау позволяет вычислять квантовомеханические матричные элементы операторов с помощью квазиклассических волновых функций. Вывод этого метода [1] полагается на существовании сингулярности потенциала, где $|U(x)|$ стремится к бесконечности. При этом, сингулярность $U(x)$ может находиться на бесконечности.

Но существуют такие потенциалы, где $U(x)$ принимает конечное значение в своей сингулярности. Например, рассмотрим движение одномерной квантовой частицы с массой $m = 1$ в потенциале

$$U = \frac{\omega^2}{2} [\sqrt{(x - x_0)^2 + a^2} - x]^2, \quad (1)$$

где a , ω и x_0 – параметры. Ниже мы будем использовать безразмерную систему единиц, где $\hbar \ll 1$ – малый параметр разложения. Функция (1) имеет корневую особенность при $x = x_0 \pm ia$, но принимает там конечные значения: $U(x_0 \pm ia) = \frac{\omega^2}{2}(x_0 \pm ia)^2$. Этот потенциал интересен тем, что движение частицы в нём становится точно решаемым при $a \rightarrow 0$.

Целью данной курсовой работы является обобщение метода Ландау на потенциалы вида (1).

2 Пример квазиклассического вычисления

2.1 Матричные элементы гармонического осциллятора

Рассмотрим гармонический осциллятор с частотой $\omega = 1$ и потенциалом $U = x^2/2$. Будем вычислять матричный элемент:

$$\mathcal{A} = \langle N | e^{\frac{ij\hat{x}}{\hbar}} | 0 \rangle, \quad (2)$$

где j — действительная константа, а $\langle N |$ и $| 0 \rangle$ — волновые функции N -ого и основного собственных энергетических состояний, где $N \gg 1$. Для простоты будем считать, что N чётно, благодаря чему соответствующая волновая функция — чётная функция x : $\psi_N(x) = \psi_N(-x)$. С учетом чётности N , выражение (2) можно переписать как:

$$\begin{aligned} \mathcal{A} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0 \psi_N \exp\left(\frac{ijx}{\hbar}\right) dx &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0 \psi_N \exp\left(\frac{ijx}{\hbar}\right) dx + \\ &+ \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0 \psi_N \exp\left(-\frac{ijx}{\hbar}\right) dx = 2\text{Re } \mathcal{A}^+, \end{aligned} \quad (3)$$

где

$$\mathcal{A}^+ = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0 \psi_N^+ \exp\left(\frac{ijx}{\hbar}\right) dx + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0 \psi_N^+ \exp\left(-\frac{ijx}{\hbar}\right) dx, \quad (4)$$

и мы обозначили волновые функции состояний за $\psi_0(x)$ и $\psi_N(x) = 2\text{Re } \psi_N^+(x)$. В квазиклассическом приближении волновые функции осциллятора равны:

$$\psi_0 = \frac{C_0}{2\sqrt{\varkappa_0}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{a_0}^x \varkappa_0 dx\right), \quad \psi_N^+ = \frac{iC_N}{2\sqrt{\varkappa_N}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_{a_N}^x \varkappa_N dx\right), \quad (5)$$

где мы полагаем, что x находится справа от точек поворота $a_0 = \sqrt{2E_0}$ и $a_N = \sqrt{2E_N}$ в верхней полуплоскости $\text{Im } x > 0$, C_0 и C_N — нормировочные константы, а $\varkappa \equiv \sqrt{2U - 2E}$ — евклидов импульс частицы. Отметим, что можно использовать, и выражения для волновых функций в других

областях (например, слева от точек поворота $-a_0$ и $-a_N$); этот выбор не влияет на дальнейшие выкладки и приводит к тому же ответу.

Подставим (5) в (4):

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^+ = & \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{iC_0C_N}{8\sqrt{\varkappa_0\varkappa_N}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{a_0}^x \varkappa_0 dx + \frac{1}{\hbar} \int_{a_N}^x \varkappa_N dx + \frac{ijx}{\hbar}\right) dx + \\ & + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{iC_0C_N}{8\sqrt{\varkappa_0\varkappa_N}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{a_0}^x \varkappa_0 dx + \frac{1}{\hbar} \int_{a_N}^x \varkappa_N dx - \frac{ijx}{\hbar}\right) dx = I_+ + I_-, \end{aligned} \quad (6)$$

где I_+ и I_- обозначают два слагаемых в выражении (6). Далее будем считать, что $\hbar \ll j \ll 1$.

Рассмотрим I_- . Показатель экспоненты его подынтегральной функции равен.

$$\varphi(x) = - \int_{a_0}^x \varkappa_0 dx + \int_{a_N}^x \varkappa_N dx - ijx. \quad (7)$$

Его экстремум x_0 – седловая точка рассматриваемого интеграла – определяется из условия $\varphi'(x_0) = 0$, т.е. $-\varkappa_0 + \varkappa_N - ij = 0$. Так как $\varkappa_0 = \sqrt{x_0^2 - a_0^2}$ и $\varkappa_N = \sqrt{x_0^2 - a_N^2}$, седловая точка находится при

$$x_0 \approx i \frac{a_N^2 - a_0^2}{2j} = i\rho_0,$$

где $\rho_0 \in \mathbb{R}$ и мы использовали разложение по $j \ll 1$. Интересно, что $|x_0| = O(j^{-1}) \gg 1$. При больших x показатель экспоненты имеет простой вид

$$\varphi(x) \approx \frac{a_0^2 - a_N^2}{4} + \frac{1}{2} \left(a_0^2 \ln \frac{2x}{a_0} - a_N^2 \ln \frac{2x}{a_N} \right) - ijx, \quad (8)$$

который будет полезен в дальнейшем. Продеформируем контур интегрирования так, как показано на рис. 1. Он состоит из бесконечно длинного горизонтального участка и двух вертикальных участков длины ρ_0 .

С одной стороны, $|x|$ велико и выражение (8) применимо во всех точках этого контура. С другой стороны, этот контур является седловым для I_- , т.е. он удовлетворяет условиям:

1. В окрестности седловой точки x_0 : $\text{Im } \varphi(x) = \text{Im } \varphi(x_0) = \text{const.}$

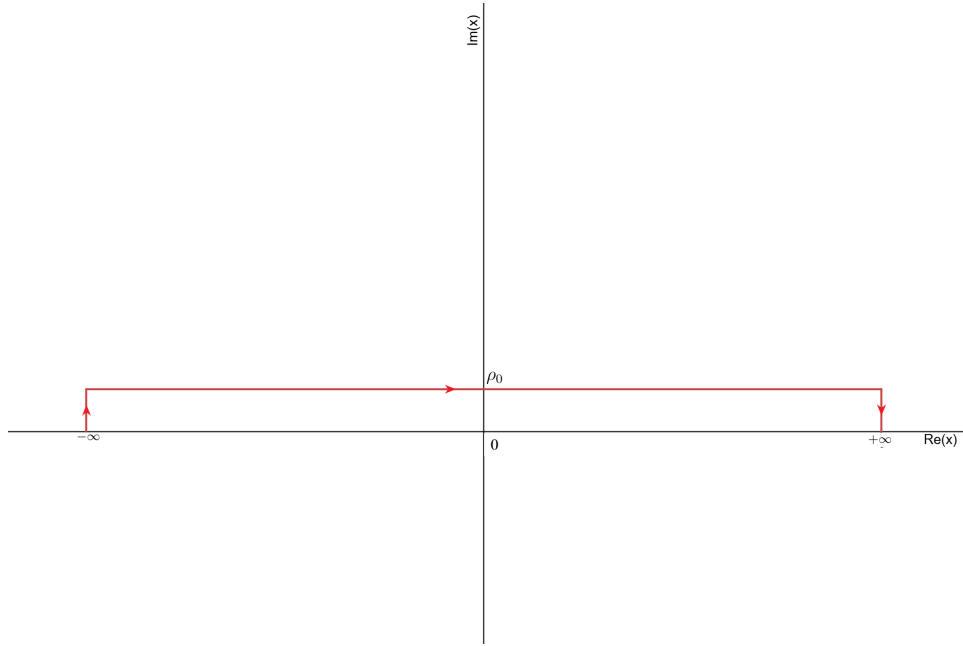


Рис.1 Контур интегрирования на комплексной плоскости x .

2. $\text{Re } \varphi(x)$ достигает максимума в в точке x_0 .

Также нетрудно продемонстрировать, что интегралы вдоль вертикальных участков контура равны нулю. Теперь заметим, что во всех точках выбранного контура подынтегральное выражение I_+ экспоненциально мало по сравнению с подынтегральным выражением I_- , см. формулы (6) и (7). Таким образом, в выражении (6) можно пренебречь I_+ .

Применяя метод перевала для I_- , находим:

$$\mathcal{A}^+ = \frac{iC_0C_N}{8} P e^{\varphi(x_0)/\hbar}, \quad (9)$$

где P — предэкспонента в методе перевала. Выражения для $\varphi(x_0)$ и P , вычисленные с необходимой точностью, даются формулами:

$$\varphi(x_0) = \frac{\hbar N}{2} + \frac{\hbar}{4} \ln 2N - \frac{\hbar N}{2} \ln \frac{2\hbar N}{j^2} + \frac{\hbar}{4} - \frac{i\pi\hbar N}{2} - \frac{j^2}{4}, \quad (10)$$

$$P = -i\sqrt{\frac{2\pi}{N}}. \quad (11)$$

Подставляя (10) и (11) в (9) и используя известные значения нормировочных констант $C_0 = \frac{\sqrt{2}}{(\pi e)^{1/4}}$ и $C_N = \sqrt{\frac{2}{\pi}}$ [2], приходим к окончательному выражению для матричного элемента (2):

$$\mathcal{A}^+ = \frac{e^{-\frac{j^2}{4\hbar}}}{2^{5/4}(\pi N)^{1/4}} \cdot e^{N/2} \left(-\frac{2\hbar N}{j^2} \right)^{-N/2},$$

так что

$$\mathcal{A} = 2\text{Re } \mathcal{A}^+ = \frac{e^{-\frac{j^2}{4\hbar}}}{(2\pi N)^{1/4}} \cdot e^{N/2} \left(-\frac{2\hbar N}{j^2} \right)^{-N/2}. \quad (12)$$

Данная формула верна с точностью до высших квазиклассических поправок по $\hbar$ и $1/N$.

2.2 Сравнение с точным ответом

Матричный элемент (2) можно вычислить точно, выразив оператор $\hat{x}$ через операторы рождения и уничтожения

$$\hat{a}^\dagger = \frac{\hat{x} - i\hat{p}}{\sqrt{2}}, \quad \hat{a} = \frac{\hat{x} + i\hat{p}}{\sqrt{2}},$$

так что $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hbar$. Формула Хаусдорфа для операторов, коммутатор которых является c -числом, гласит:

$$\exp\left(\frac{ij\hat{x}}{\hbar}\right) = e^{-\frac{j^2}{4\hbar}} \cdot \exp\left(\frac{ij\hat{a}^\dagger}{\sqrt{2\hbar}}\right) \exp\left(\frac{ij\hat{a}}{\sqrt{2\hbar}}\right).$$

Подставляя это выражение в формулу (2), получаем:

$$\mathcal{A} = e^{-\frac{j^2}{4\hbar}} \langle N | \exp\left(\frac{ij\hat{a}^\dagger}{\sqrt{2\hbar}}\right) | 0 \rangle.$$

Далее разложим экспоненту

$$\exp\left(\frac{ij\hat{a}^\dagger}{\sqrt{2\hbar}}\right) | 0 \rangle = \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{1}{k!} \left(\frac{ij\hat{a}^\dagger}{\sqrt{2\hbar}} \right)^k | 0 \rangle$$

и подействуем оператором рождения на вакуум: $(\hat{a}^\dagger)^k | 0 \rangle = \sqrt{k! \hbar^k} | k \rangle$. Так как $\langle N | N' \rangle = \delta_{NN'}$, то

$$\mathcal{A} = \frac{e^{-\frac{j^2}{4\hbar}}}{\sqrt{N!}} \left(\frac{ij}{\sqrt{2\hbar}} \right)^N. \quad (13)$$

Данное выражение верно при любом N . При $N \gg 1$ применима формула Стирлинга: $N! \approx e^{-N} N^N \sqrt{2\pi N}$, и выражение (13) приобретает вид:

$$\mathcal{A} = \frac{e^{-\frac{j^2}{4\hbar}}}{(2\pi N)^{1/4}} \cdot e^{N/2} \left(-\frac{2\hbar N}{j^2} \right)^{-N/2}. \quad (14)$$

Мы видим, что выражения (12) и (14) полностью совпадают.

3 Потенциал с мягкой особенностью

3.1 Деформация контура

Теперь рассматриваем потенциал (1), см. рис. 2. Он обладает двумя точками ветвления: $x_0 + ia$ и $x_0 - ia$. Проведём разрезы комплексной плоскости x из этих точек вертикально вверх и вертикально вниз соответственно.

В классически доступной области квазиклассические волновые функции можно записать в виде $\psi_0 = 2\text{Re } \psi_0^-$, $\psi_N = 2\text{Re } \psi_N^+$, где

$$\psi_0^- = \frac{C_0}{2\sqrt{p_0}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{a_0}^x p_0 dx - \frac{i\pi}{4}\right), \quad \psi_N^+ = \frac{C_N}{2\sqrt{p_N}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{a_N}^x p_N dx + \frac{i\pi}{4}\right),$$

функции $p_0(x) = \sqrt{2E_0 - 2U}$, $p_N(x) = \sqrt{2E_N - 2U}$ обозначают импульсы, а константы a_0 и a_N — правые точки поворота для уровней с номерами 0 и N соответственно. Мы будем считать, что $\text{Re } p_N > 0$ на отрезке $-a_N < x < a_N$, и аналогично для p_0 .

Будем вычислять матричный элемент

$$\mathcal{A} = \langle N | \hat{x} | 0 \rangle = 2\text{Re} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_N^+ x \psi_0 dx \right) = \text{Re} \left(\frac{C_0 C_N}{2} I_0 \right). \quad (15)$$

Продеформируем контур интегрирования в полуплоскость $\text{Im } x \geq 0$. В этом случае $\psi_0 \approx \psi_0^-$, так что

$$I_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x e^{W_1(x)}}{\sqrt{p_0 p_N}} dx, \quad W_1(x) = \frac{i}{\hbar} \int_{a_N}^x p_N dx - \frac{i}{\hbar} \int_{a_0}^x p_0 dx. \quad (16)$$

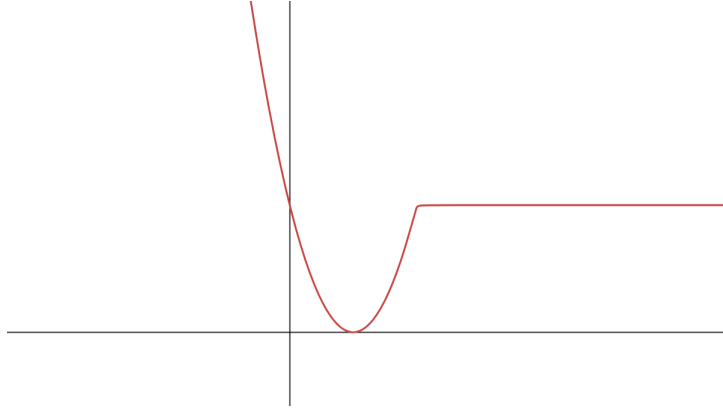


Рис.2 Качественный вид рассматриваемого потенциала.

Далее будем вычислять интеграл (15).

Для этого выберем контур $\text{Im } x > 0$, указанный на рис. 3. Контур состоит из четырёх участков:

1. Дуга окружности бесконечного радиуса.
2. Вертикальный участок, идущий вдоль разреза.
3. Бесконечный горизонтальный участок.
4. Вертикальный участок справа длины a .

Мотивация такого выбора контура будет ясна в дальнейшем. А пока перейдём к оценке интегралов по различным участкам контура.

3.2 Оценка вкладов различных участков контура

Сначала докажем, что интеграл по дуге окружности равен нулю. Для этого запишем $W_1(x)$ в следующем виде:

$$W_1(x) = W_1(-A) + \frac{i}{\hbar} \int_{-A}^x (p_N - p_0) dx = W_1(-A) - \frac{1}{\hbar} \int_{-A}^x (\varkappa_N - \varkappa_0) dx, \quad (17)$$

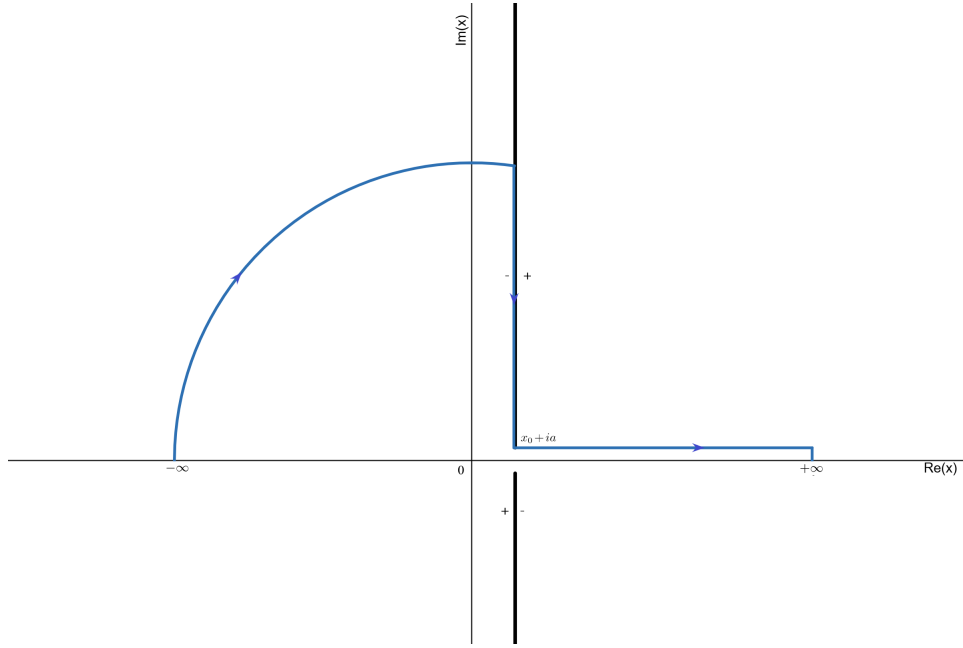


Рис.3 Комплексная плоскость x , на которой изображены контур интегрирования (синий) и разрезы (черные). Знак на каждой стороне разреза означает знак мнимой части функции $\sqrt{(x - x_0)^2 + a^2}$. Разрезы проведены вертикально из точек $x_0 + ia$ и $x_0 - ia$.

где $A \rightarrow +\infty$ — радиус окружности. В формуле (17) мы заменили $p_N = i\kappa_N$ и $p_0 = i\kappa_0$, так как мы рассматриваем область на верхней стороне разреза слева от точек поворота, где $\text{Re } \kappa_N, \text{Re } \kappa_0 \geq 0$. Перепишем $W_1(-A)$ в виде:

$$W_1(-A) = C + \frac{i}{\hbar} \int_{-A'}^{-A} (p_N - p_0) dx = C - \frac{1}{\hbar} \int_{-A'}^{-A} (\kappa_N - \kappa_0) dx,$$

где $A' \gg x_0$ — некоторое положительное действительное число, а константа C зависит от A' . Тогда при вычислении интеграла от $-A'$ до $-A$ можно считать, что $U \gg E_N, E_0$, поэтому подынтегральное выражение можно разложить:

$$\kappa = \sqrt{2U} \sqrt{1 - \frac{E}{U}} \approx \sqrt{2U} - \frac{E}{\sqrt{2U}} \Rightarrow \kappa_N - \kappa_0 \approx \frac{E_N - E_0}{2\omega x}.$$

Таким образом,

$$W_1(-A) = C - \frac{1}{\hbar} \int_{-A'}^{-A} \frac{E_N - E_0}{2\omega x} dx = C - \frac{E_N - E_0}{2\hbar\omega} \ln \frac{A}{A'}.$$

Заметим, что $E_N - E_0 = 2\hbar\omega N$, следовательно

$$W_1(-A) = C + \ln \left(\frac{A}{A'} \right)^{-N}.$$

Теперь перейдем непосредственно к вычислению интеграла по дуге, который равен:

$$I_c = \lim_{A \rightarrow +\infty} \int_{-A}^{iA} \frac{x e^{W_1(x)}}{\sqrt{p_0 p_N}} dx = \lim_{A \rightarrow +\infty} e^{W_1(-A)} \int_{-A}^{iA} \frac{x e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{-A}^x (\varkappa_N - \varkappa_0) dx}}{i \sqrt{\varkappa_0 \varkappa_N}} dx.$$

Т.к. $x = A e^{i\theta}$, то

$$-\frac{1}{\hbar} \int_{-A}^x (\varkappa_N - \varkappa_0) dx = -N \ln \frac{x}{-A} = iN(\pi - \theta).$$

Учитывая, что $\sqrt{\varkappa_0 \varkappa_N} \approx \sqrt{2U} \approx -2\omega x$, получим:

$$I_c = \lim_{A \rightarrow +\infty} -e^C \left(\frac{A}{A'} \right)^{-N} \frac{A}{2\omega} \int_{\pi}^{\frac{\pi}{2}} e^{iN(\pi - \theta)} e^{i\theta} d\theta.$$

В силу того, что интеграл по θ не зависит от A , при $N \gg 1$ справедливо

$$I_c = 0.$$

Мы доказали, что интеграл по дуге на рис. 3 равен нулю.

Похожим образом можно показать, что подынтегральное выражение в формуле (15) стремится к 0 при $x \rightarrow ia + \infty$ вдоль вертикальной части контура. Как следствие, для вычисления матричного элемента необходимо вычислить два интеграла: вдоль разреза и по горизонтальному участку контура. Сразу отметим, что данная часть контура интегрирования целиком лежит справа от точек поворота, поэтому

$$p_N = -i\varkappa_N, \quad p_0 = -i\varkappa_0,$$

где $\operatorname{Re} \kappa_N, \operatorname{Re} \kappa_0 \geq 0$.

Введём обозначения:

$$x_s \equiv x_0 + ia, \quad W_1(x_s) \equiv W_s.$$

Тогда

$$W_1(x) = W_s + \frac{1}{\hbar} \int_{x_s}^x (\kappa_N - \kappa_0) dx, \quad (18)$$

где интеграл теперь берётся от сингулярности потенциала.

Начнем с рассмотрения горизонтального участка контура. Для простоты предположим, что $a \ll 1$. Тогда потенциал на нем почти постоянен: $U \approx \omega^2 x_0^2/2$, так что

$$W_1(x) = W_s + \frac{\sqrt{\omega^2 x_0^2 - 2E_N} - \sqrt{\omega^2 x_0^2 - 2E_0}}{\hbar} (x - x_s).$$

Так как $x - x_s$ — действительное положительное число, а $\sqrt{\omega^2 x_0^2 - 2E_N} - \sqrt{\omega^2 x_0^2 - 2E_0} < 0$, то вдоль горизонтального участка контура $\operatorname{Re} W_1(x)$ убывает. А значит, главная экспонента подынтегрального выражения максимальна при $x = x_s$.

Теперь исследуем поведение функции $W_1(x)$ вдоль левой стороны верхнего разреза. Для этого введём действительный параметр $t \in [1; +\infty)$:

$$x - x_0 = iat.$$

Потенциал можно записать в виде:

$$U(t) = \frac{\omega^2}{2} [a\sqrt{1-t^2} - x_0 - iat]^2 = \frac{\omega^2}{2} [-ia\sqrt{t^2-1} - x_0 - iat]^2,$$

благодаря чему интеграл приобретает вид

$$W_1(t) = W_s + \frac{ia}{\hbar} \int_1^t (\sqrt{2U(t) - 2E_N} - \sqrt{2U(t) - 2E_0}) dt = W_s + \frac{a}{\hbar} I(t),$$

где

$$I(t) = i \int_1^t (\sqrt{2U(t) - 2E_N} - \sqrt{2U(t) - 2E_0}) dt.$$

На рис. 4 построен график зависимости $\text{Re } I$ от параметра t .

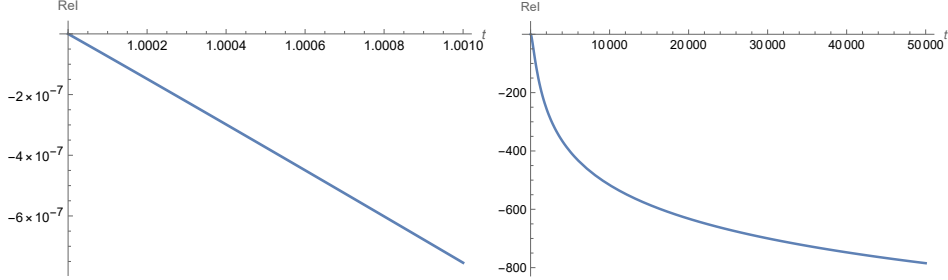


Рис.4: Графики зависимости показателя экспоненты $\text{Re } I$ от параметра $t \in [1; +\infty)$ вдоль верхнего разреза. На левом графике $t \in [1; 1.001]$, на правом $t \in [1; 10^6]$. Значения параметров потенциала: $\omega = 1$, $x_0 = 1$, $a = 10^{-3}$, $\hbar = 10^{-7}$, $E_N = 1/3$.

Видно, что $\text{Re } I(t)$ убывает при увеличении t . Таким образом, вновь максимум подынтегрального выражения достигается в точке сингулярности $x = x_s$. Но для полного доказательства этого факта, необходимо ещё исследовать асимптотику $t \gg O(1/a)$. При таких значениях t выполнено $|U| \gg E_N, E_0$ и $x \approx iat$, так что

$$I(t) = \tilde{C} + i \int_{t_0}^t \left(\sqrt{2U} \sqrt{1 - \frac{E_N}{U}} - \sqrt{2U} \sqrt{1 - \frac{E_0}{U}} \right) dt,$$

где $t_0 \gg O(1/a)$, а $\tilde{C}$ — число, зависящее от t_0 . Получим:

$$I(t) = \tilde{C} + i \int_{t_0}^t \frac{E_0 - E_N}{\sqrt{2U}} dt = \tilde{C} + i \int_{t_0}^t \frac{E_0 - E_N}{2\omega iat} dt = \tilde{C} + \frac{E_0 - E_N}{2\omega a} \ln \frac{t}{t_0}.$$

Мы видим, что $\text{Re } I(t)$ убывает при большом t .

Таким образом, мы доказали, что интегралы по горизонтальной и вертикальной частям контура оба насыщаются в окрестности точки сингулярности x_s . Теперь ясно, из каких соображений выбирался контур: мы продеформировали его таким образом, чтобы интеграл для искомого матричного элемента насыщался при $x \approx x_s$.

3.3 Интеграл вблизи сингулярности

Итак, в предыдущем разделе мы доказали, что вдоль нашего контура интеграл для матричного элемента насыщается вблизи точки сингулярности потенциала x_s , а значит, вклад в него будет давать лишь малая окрестность этой точки.

Сделаем замену переменных

$$x - x_s = a\epsilon,$$

где $\epsilon \ll 1$ вблизи сингулярности. На вертикальной части контура $\arg(\epsilon) = -3\pi/2$, а на горизонтальной $\arg(\epsilon) = 0$. Разложим потенциал U по ϵ вблизи x_s :

$$\begin{aligned} U &= \frac{\omega^2}{2} [\sqrt{a^2(i + \epsilon)^2 + a^2} - x_s - a\epsilon]^2 = \frac{\omega^2}{2} [x_s - a\sqrt{2i\epsilon} + O(\epsilon)]^2 = \\ &= \frac{\omega^2 x_s^2}{2} - \omega^2 a x_s \sqrt{2i\epsilon} + O(\epsilon). \end{aligned} \quad (19)$$

Теперь разложим $\varkappa$:

$$\varkappa = \varkappa^{(s)} - \frac{\omega^2 a x_s \sqrt{2i\epsilon}}{\varkappa^{(s)}} + O(\epsilon), \quad (20)$$

где $\varkappa^{(s)} \equiv \varkappa(x_s) = \sqrt{\omega^2 x_s^2 - 2E}$. Подставляя (20) в (18), и интегрируя по ϵ , получим:

$$W_1(\epsilon) = W_s + \frac{A\epsilon}{\hbar} + \frac{B\epsilon^{3/2}}{\hbar} + \frac{1}{\hbar} O(\epsilon^2),$$

где

$$A = a \left(\varkappa_N^{(s)} - \varkappa_0^{(s)} \right), \quad B = \frac{2\sqrt{2}e^{i\pi/4}}{3} \omega^2 a^2 x_s \left(\frac{1}{\varkappa_0^{(s)}} - \frac{1}{\varkappa_N^{(s)}} \right).$$

Мы видим, что в окрестности сингулярности подынтегральное выражение имеет простой вид.

Теперь перейдем непосредственно к вычислению интеграла по двум частям контура:

$$I_0 = \int_{x_0 + i\infty}^{+\infty + ia} \frac{x e^{W_1(x)}}{\sqrt{p_0 p_N}} dx. \quad (21)$$

Мы оставили бесконечные пределы, так как интеграл всё равно насыщается вблизи сингулярности. Перепишем (21) в терминах ϵ :

$$I_0 = iae^{W_s} \int_{+i\infty}^{+\infty} \frac{x_s + a\epsilon}{\sqrt{\varkappa_0 \varkappa_N}} \exp\left(\frac{A\epsilon}{\hbar} + \frac{B\epsilon^{3/2}}{\hbar}\right) d\epsilon. \quad (22)$$

Подставляя (20) и делая замену $\epsilon = \hbar\chi^2$, приходим к следующему интегралу:

$$I_0 = \frac{2i\hbar ae^{W_s}}{\sqrt{\varkappa_0^{(s)} \varkappa_N^{(s)}}} \int_{\infty \cdot e^{-\frac{3i\pi}{4}}}^{+\infty} \chi e^{A\chi^2} (1 + C\hbar^{1/2}\chi + B\hbar^{1/2}\chi^3) d\chi, \quad (23)$$

где

$$C = \frac{\sqrt{2}\omega^2 ax_s e^{\frac{i\pi}{4}}}{2} \left[\frac{1}{(\varkappa_0^{(s)})^2} + \frac{1}{(\varkappa_N^{(s)})^2} \right].$$

Отметим, что в формуле (23) были отброшены все члены со степенью $\hbar$, выше $1/2$. Интегрирование по χ ведётся вдоль контура на рис. 5. Оче-

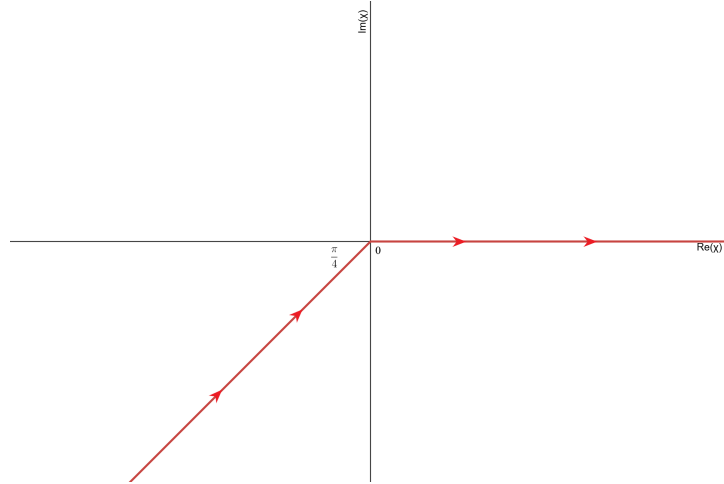


Рис.5 Комплексная плоскость χ и контур интегрирования на ней.

видно, что данный контур можно продеформировать в действительную ось, т.к для достаточно малых a выполнено $\arg A \approx \pi - a\Delta\varphi$, где $\Delta\varphi > 0$. Поэтому интеграл (23) можно взять вдоль действительной оси от $-\infty$ до $+\infty$.

Это даёт ответ для матричного элемента $\mathcal{A} \propto I_0$ в формуле (15):

$$\mathcal{A} \propto \hbar^{3/2} e^{W_s}, \quad (24)$$

где

$$W_s = \frac{i}{\hbar} \int_{a_N}^{x_0+ia} p_N dx - \frac{i}{\hbar} \int_{a_0}^{x_0+ia} p_0 dx, \quad (25)$$

а часть предэкспоненты, не содержащая $\hbar$ отброшена, так как вычисление её с помощью формулы (23) дало бы не совсем правильный результат по причинам, которые здесь обсуждаться не будут.

Теперь вычислим W_s в пределе $a \rightarrow 0$, когда этот интеграл можно взять аналитически. Для этого перепишем (25) в виде:

$$W_s = \frac{1}{\hbar} \int_{a_N}^{x_0} \varkappa_N dx - \frac{1}{\hbar} \int_{a_0}^{x_0} \varkappa_0 dx + \frac{1}{\hbar} O(a),$$

где $\varkappa = \sqrt{\omega^2(x_0 - 2x)^2 - 2E}$ и $a_{0,N} = \frac{1}{2}(x_0 + \sqrt{2E_{0,N}}/\omega)$. Интегрируя, получим:

$$W_s = \frac{1}{\hbar} \left[\frac{x_0}{4} (\varkappa_N^{(s)} - \varkappa_0^{(s)}) + \frac{E_N}{2\omega} \ln \frac{\sqrt{2E_N}}{\omega x_0 + \varkappa_N^{(s)}} - \frac{E_0}{2\omega} \ln \frac{\sqrt{2E_0}}{\omega x_0 + \varkappa_0^{(s)}} + O(a) \right]. \quad (26)$$

Теперь подставим энергии $E_0 = \hbar\omega$ и $E_N = 2\hbar\omega(N + 1/2)$ и получим:

$$e^{W_s} = e^{F/\hbar} \left(\frac{\sqrt{4\hbar\omega N + 2\hbar\omega}}{\omega x_0 + \varkappa_N^{(s)}} \right)^{N+1/2} \left(\frac{\sqrt{2\hbar\omega}}{\omega x_0 + \varkappa_0^{(s)}} \right)^{-1/2}, \quad (27)$$

где

$$F = -\frac{x_0}{4} (\varkappa_0^{(s)} - \varkappa_N^{(s)}) + O(a).$$

Учитывая, что $N \gg 1$, получим:

$$e^{W_s} = e^{F/\hbar} \left(\frac{\sqrt{4\hbar\omega N}}{\omega x_0 + \varkappa_N^{(s)}} \right)^N \left(2N e^{\left(\frac{\omega x_0 + \varkappa_0^{(s)}}{\omega x_0 + \varkappa_N^{(s)}} \right)^2} \right)^{1/4} \left(1 + O\left(\frac{1}{N}\right) \right).$$

Префактор в этой формуле (последние три слагаемых) вновь можно отбросить, так как он был опущен в выражении (24).

3.4 Численное вычисление экспоненты подавления

В конце предыдущего раздела мы вычислили экспоненту W_s при $a = 0$. Но также интерес представляет вычисление W_s при конечных a . В этом случае получить аналитический результат не представляется возможным. Поэтому воспользуемся численными методами.

Перепишем (25) в терминах $\varkappa$:

$$W_s = \frac{1}{\hbar} \int_{a_N}^{x_0+ia} \varkappa_N dx - \frac{1}{\hbar} \int_{a_0}^{x_0+ia} \varkappa_0 dx = \frac{1}{\hbar} \int_{a_N}^{x_0+ia} \varkappa_N dx + \frac{1}{\hbar} \int_{x_0+ia}^{a_0} \varkappa_0 dx. \quad (28)$$

Напомним, что

$$\varkappa_0 = \sqrt{2U} = \sqrt{\omega^2 [\sqrt{(x-x_0)^2 + a^2} - x]^2}, \quad (29)$$

$$\varkappa_N = \sqrt{2U - 2E_N} = \sqrt{\omega^2 [\sqrt{(x-x_0)^2 + a^2} - x]^2 - 2E_N}. \quad (30)$$

В главном квазиклассическом порядке можно считать, что $E_0 = 0$. Введём удобную замену переменных: $x = x_0 \tilde{x}$, $a = x_0 \tilde{a}$, $E_N = \omega^2 x_0^2 \tilde{E}_N$. В новых терминах:

$$\varkappa_0 = \omega x_0 \sqrt{[\sqrt{(\tilde{x}-1)^2 + \tilde{a}^2} - \tilde{x}]^2}, \quad (31)$$

$$\varkappa_N = \omega x_0 \sqrt{[\sqrt{(\tilde{x}-1)^2 + \tilde{a}^2} - \tilde{x}]^2 - 2\tilde{E}_N}, \quad (32)$$

а соответствующие точки поворота равны:

$$\tilde{a}_0 = \frac{1 + \tilde{a}^2}{2}, \quad \tilde{a}_N = \frac{1 + \tilde{a}^2 - 2\tilde{E}_N}{2(1 - \sqrt{2\tilde{E}_N})}. \quad (33)$$

Выражение (28) можно записать в виде:

$$W_s = \frac{\omega x_0^2}{\hbar} \left[\int_{\tilde{a}_N}^{1+i\tilde{a}} \sqrt{[\sqrt{(\tilde{x}-1)^2 + \tilde{a}^2} - \tilde{x}]^2 - 2\tilde{E}_N} d\tilde{x} + \int_{1+i\tilde{a}}^{\tilde{a}_0} \sqrt{[\sqrt{(\tilde{x}-1)^2 + \tilde{a}^2} - \tilde{x}]^2} d\tilde{x} \right]. \quad (34)$$

Интегрирование в (34) будем проводить по контуру на комплексной плоскости $\tilde{x}$, изображённому на рис. 6.

Такой выбор контура обусловлен соображениями удобства. На половине контура, выделенной синем цветом, частица движется с энергией $E = E_N$, а на половине, выделенной красным, с нулевой энергией. На рис. 6 также введены обозначения для интегралов I_1, I_2, I_3 и I_4 по соответствующим частям контура.

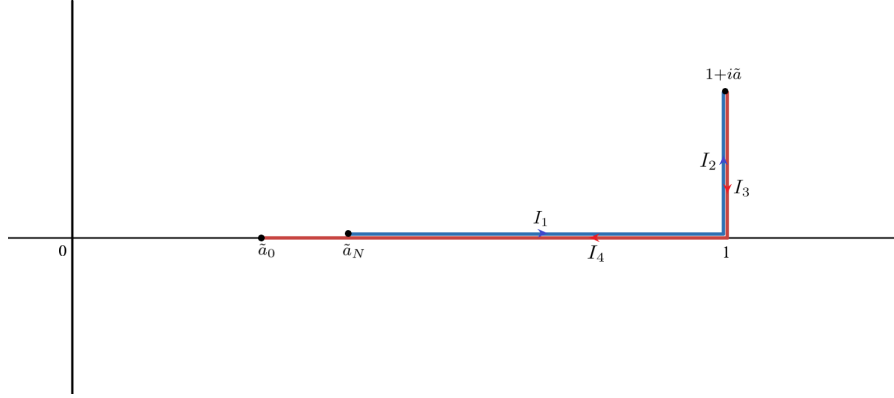


Рис.6 Контур интегрирования на комплексной плоскости $\tilde{x}$. Стрелки обозначают направление движения частицы.

Вычислять интегралы мы будем с помощью метода Гаусса, так как он хорошо работает для функций с корневыми особенностями. При этом, интегралы I_3 и I_4 вычисляются аналитически, поэтому их можно использовать для оценки точности метода. Ниже приведены получившиеся графики зависимостей действительной и мнимой частей W_s от энергии $\tilde{E}_N$.

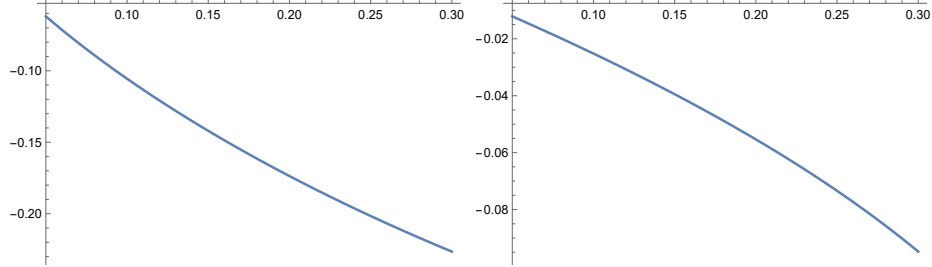


Рис.7 Графики зависимостей $\text{Re } W_s$ (левый) и $\text{Im } W_s$ (правый) в зависимости от $\tilde{E}_N$ в единицах $\frac{\omega x_0^2}{\hbar}$ при $\tilde{a} = 0.2$.

3.5 Переформулировка в терминах комплексных классических траекторий

Заметим, что показатель подавления (28) связан с укороченным евклидовым действием S_E^{sh} :

$$W_s = -\frac{S_E^{sh}}{\hbar}, \quad (35)$$

где

$$S_E^{sh} = \int_{a_0}^{x_0+ia} \varkappa_0 dx + \int_{x_0+ia}^{a_N} \varkappa_N dx. \quad (36)$$

Действие вычислено на следующей траектории:

1. Сначала частица движется с нулевой энергией $E_0 = 0$, стартуя от точки поворота $a_0 = x_0/2$, пока она не достигнет сингулярности потенциала x_s .
2. В точке сингулярности происходит скачок импульса. Частица начинает двигаться с энергией E_N , пока не приходит в точку поворота a_N , соответствующую уже новой энергии.

Действие S_E^{sh} можно записать как

$$S_E^{sh} = S_E - E_N \tau_N, \quad (37)$$

где

$$S_E = \int_{\tau_i}^{\tau_f} \left(\frac{1}{2} \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 + U(x) \right) d\tau \quad (38)$$

обозначает полное евклидово действие, $\tau = it$ — евклидово время, а τ_i и τ_f — начальный и конечный моменты движения частицы соответственно. В формуле (37) τ_N — евклидово время движения частицы с энергией E_N .

Таким образом, для нахождения показателя подавления матричного элемента (15), необходимо вычислить евклидово действие $S_E = -iS$ на указанной выше траектории. Найдём временной контур $t \in \mathbb{C}$, вдоль которого необходимо вычислять действие.

Будем работать в пределе $a \rightarrow 0$ и считать, что $U \approx \frac{\omega^2}{2}(x_0 - 2x)^2$. Также будем считать, что частица стартует с нулевой энергией из точки

поворота a_0 в момент времени $\tau \rightarrow -\infty$. Уравнение движения частицы в евклидовом времени имеет вид

$$\frac{d^2x}{d\tau^2} = U'(x). \quad (39)$$

Решение уравнения (39) в рассматриваемом потенциале даётся выражением:

$$x(\tau) = \frac{x_0}{2} + Ae^{2\omega\tau} + Be^{-2\omega\tau}, \quad (40)$$

где A и B - константы. Нам нужно два решения этого уравнения: одно для движения с нулевой энергией, другое для движения с энергией E_N . Обозначим эти решения $x_1(\tau)$ и $x_2(\tau)$, а их константы A, B, C и D соответственно (A и C — при положительной экспоненте).

Из условия $x_1(-\infty) = a_0 = x_0/2$, находим $B = 0$. Выберем начало отсчёта времени τ так, что $A = x_0/2$ и $x_1(0) = x_0$. Подчеркнём, что так как мы выбрали A действительным, то при движении вдоль мнимой оси времени $t = -i\tau$ значение x_1 будет действительным, см. (40).

В точке x_0 частица имеет евклидов импульс $\varkappa_0 = \frac{dx}{d\tau} = -i\frac{dx}{dt} = \omega x_0$, поэтому, чтобы прийти в сингулярность, ей необходимо двигаться в положительном направлении действительной оси t в течении времени $\Delta t \approx a/\omega x_0 \rightarrow 0$.

После того, как частица оказалась в сингулярности $x_s \approx x_0$, двигаясь с нулевой энергией, она начинает двигаться уже с энергией E_N , т.е. по траектории $x_2(\tau)$. Нам необходимо сшить траектории $x_1(\tau)$ и $x_2(\tau)$ в точке сингулярности. Условие сшивки можно записать как $x_1(0) = x_0 \approx x_2(0)$ при $a \rightarrow 0$. С учётом этого условия, а также зная евклидов импульс частицы при $x_2(\tau \approx 0) \approx x_0$, нетрудно получить выражения для констант второй траектории:

$$C \approx \frac{1}{4} \left[x_0 + \sqrt{x_0 - \frac{2E_N}{\omega^2}} \right], \quad D \approx \frac{1}{4} \left[x_0 - \sqrt{x_0 - \frac{2E_N}{\omega^2}} \right]. \quad (41)$$

Заметим, что в результате после скачка энергии, импульс частицы уменьшается. Поэтому движение от точки x_s обратно до действительной оси занимает более долгий промежуток времени по сравнению с Δt . После достижения точки x_0 , она вновь начинает двигаться вдоль действительного $\tau = it$, что соответствует действительному x_2 , пока она не дойдёт до точки поворота a_N . Найти конечный момент времени τ_f можно из

уравнения $x_2(\tau_f) = a_N \approx \frac{1}{2}(x_0 + \sqrt{2E_N}/\omega)$,

$$\tau_f = -\frac{1}{2\omega} \operatorname{arccch} \frac{\omega x_0}{\sqrt{2E_N}} + O(a), \quad t_f = \frac{i}{2\omega} \operatorname{arccch} \frac{\omega x_0}{\sqrt{2E_N}} + O(a). \quad (42)$$

Наглядное графическое представление всех указанных рассуждений представлено на рис. 8.

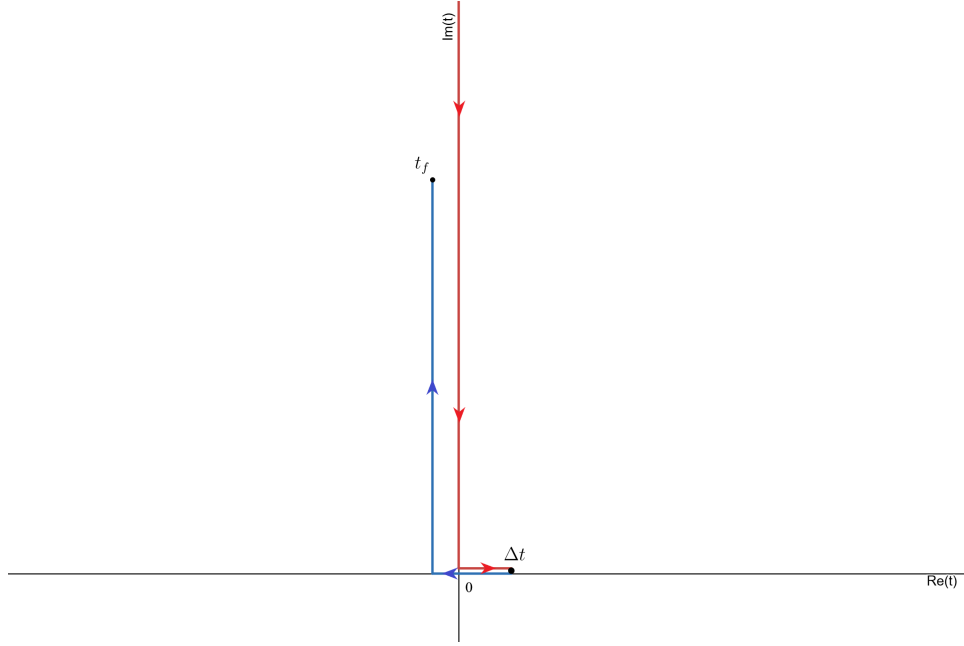


Рис.8 Контур движения частицы в комплексном времени t . Красный цвет — движение с нулевой энергией, синий — с энергией E_N .

4 Заключение

В работе получены следующие результаты:

1. В модели квантового гармонического осциллятора вычислен квазиклассический матричный элемент экспоненциального оператора в базисе собственных энергетических состояний. Показано, что в квазиклассическом пределе ответ, полученный методом Ландау, совпадает с точным.

2. Квазиклассический метод Ландау обобщён на потенциал с мягкой особенностью. Показано, что главный вклад в квазиклассические матричные элементы в этом случае даётся малой окрестностью сингулярности потенциала. Вычислены показатель подавления и степень $\hbar$ в предэкспоненте матричных элементов.
3. В модели (1) вычислена экспонента подавления матричных элементов, аналитически при $a \rightarrow 0$ и численно при конечных a .
4. Задача о вычислении матричных элементов переформулирована в терминах комплексных классических траекторий.

Список литературы

- [1] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, «Теоретическая физика, т.3. «Квантовая механика», §51. М: Наука, 1989.
- [2] D. G. Levkov, A. G. Panin and S. M. Sibiryakov, Unstable Semiclassical Trajectories in Tunneling, Phys. Rev. Lett. 99 (2007) 170407 [0707.0433].
- [3] Кривченко В. В., Елютин П. В., ред. Боголюбов Н. Н. Квантовая механика (с задачами). М., Наука, 1976.
- [4] Лаврентьев М. А., Шабат Б. В. Методы теории функций комплексного переменного. — Издание 5-е, исправленное. — М.: Наука, 1987.