

Семинар 13. Математическое дополнение

Метод Лапласа

Метод Лапласа — очень мощный метод решения дифференциальных уравнений произвольного порядка с линейными коэффициентами¹:

$$\sum_{m=0}^N (a_m + b_m x) \cdot \frac{d^m Y}{dx^m} = 0$$

Метод заключается в поиске решения в виде некоторого интегрального преобразования:

$$Y(x) = \int_C dt Z(t) e^{xt}$$

Нашей конечной целью будет определение функции $Z(t)$. Интегрирования производится вдоль некоторого контура C в комплексной плоскости, который тоже будет определён потом². Подстановка в уравнение даёт:

$$\int_C dt Z(t) \left[\left(\sum_{m=0}^N a_m t^m \right) + \left(\sum_{m=0}^N b_m t^m \right) x \right] e^{xt} = 0$$

Тут удобно ввести обозначения $P(t) = \sum_m a_m t^m$ и $Q(t) = \sum_m b_m t^m$. Во втором члене нам «мешает» x ; однако, от него можно избавиться путём интегрирования по частям: $x e^{xt} dt = d(e^{xt})$. Поэтому:

$$\int_C dt Z(t) Q(t) x e^{xt} = \underbrace{Z(t) Q(t) e^{xt}}_{\partial C} \Big|_C - \int_C e^{xt} \frac{d}{dt} (Z(t) Q(t)) dt$$

Потребуем, чтобы на границах контура интегрирования внеинтегральный член занулялся (это будет некоторым требованием на контур интегрирования). Получаем:

$$\int_C dt \underbrace{\left[Z(t) P(t) - \frac{d}{dt} (Z(t) Q(t)) \right]}_0 e^{xt} = 0$$

Если мы теперь подберём функцию $Z(t)$ так, чтобы выражение в скобках занулялось, то тем самым мы решим уравнение. Решение этого уравнения записывается тривиально $Z(t) = \frac{1}{Q(t)} \exp \left(\int \frac{P(t)}{Q(t)} dt \right)$. Таким образом, мы получаем следующий «рецепт»:

1. Смотрим на дифференциальное уравнение, строим функции $P(t)$, $Q(t)$; вычисляем функцию $Z(t)$.
2. Исследуем возможные контура в комплексной плоскости, на концах которого функция $Z(t) Q(t) e^{xt} = \exp \left(xt + \int \frac{P(t)}{Q(t)} dt \right)$ зануляется. Как правило, это либо замкнутые контура, обходящие какие-то особенности подынтегрального выражения; либо контура, уходящие на бесконечность вдоль какого-нибудь из направлений.
3. Далее требуется выбрать какой-нибудь один контур интегрирования, который обычно фиксируется выбором граничных условий. Причём в квантовой механике, как правило, граничные условия фиксируются при x на вещественной оси, при $x \rightarrow \pm\infty$. Поэтому для выбора контура интегрирования, сперва требуется вычислить асимптотики решений, которые получаются, если по-разному выделять контура.
4. Наконец, глядя на различные асимптотики, мы должны выбрать интересующий нас контур.

¹Обратим внимание, что при $N = 2$ общее решение таких уравнений выражается через гипергеометрическую функцию; в частности, с помощью этого метода можно построить для неё интегральное представление

²Заметим, что если контур интегрирования совпадает с мнимой осью, то это преобразование совпадает с обычным преобразованием Фурье. На сам метод можно смотреть как на некое обобщение последнего.

Функция Эйри и комплексный метод перевала

Применим теперь разработанный метод к дифференциальному уравнению Эйри:

$$y''(x) - xy(x) = 0$$

Ему соответствует $P(t) = t^2$ и $Q(t) = -1$. Тем самым, $\int \frac{P}{Q} dt = -\frac{t^3}{3}$ и $Z = \exp(-\frac{t^3}{3})^3$. Тем самым, мы получаем интегральное представление:

$$y(x) = \int_C dt \exp\left(xt - \frac{t^3}{3}\right)$$

Дальше требуется определить контур. Поскольку у подынтегральной функции особенностей нет, единственная возможность заключается в выборе контура, приходящего из бесконечности и уходящего на бесконечность. Поэтому требуется построить сектора, в которых функция в экспоненте затухает (это соответствует условию $ZQe^{xt} \rightarrow 0$). Член с t^3 , вообще говоря, на бесконечности важнее; поэтому условие, определяющее сектора, формулируется следующим образом: $\text{Re} t^3 > 0$; если выбрать $t = |t|e^{i \arg t}$, то это значит $\cos(3 \arg t) > 0$. Выбирая различные контура, можно получать различные решения.

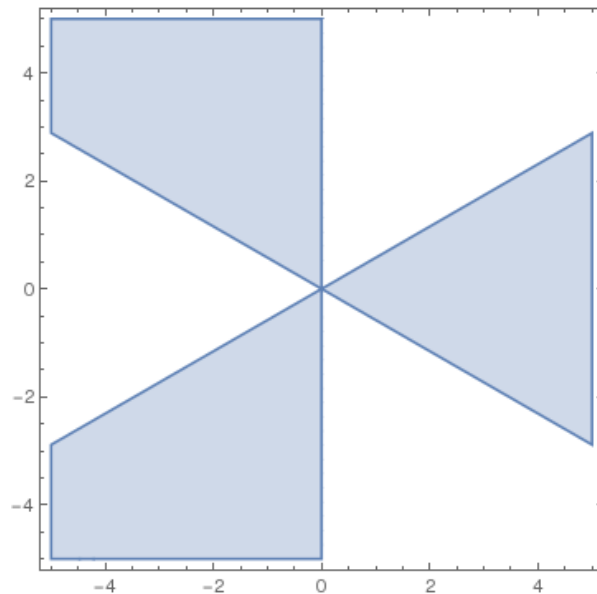


Рис. 1: Сектора, в которые можно уводить контур интегрирования C при $t \rightarrow \infty$

Удобно выбрать три контура C_1 (снизу-вверх), C_2 (сверху-направо) и C_3 (справа-вниз). Соответствующие функции $y_{1,2,3}$ будут решениями уравнения; причём $y_1 + y_2 + y_3 = 0$, поэтому среди них имеются два линейно-независимых. Дальше мы покажем, что $\text{Ai}(x) = \frac{1}{2\pi i} y_1(x)$.

Метод перевала

Пусть зафиксирован некоторый контур; и нам требуется найти асимптотики функции $y(x \rightarrow \pm\infty)$. Эту задачу отлично решает метод перевала, который применяется к интегралам вида:

$$y = \int_C A(z) e^{\Phi(z)} dz$$

С вещественным методом перевала мы уже сталкивались; если функция $\Phi(z)$ чисто вещественна на контуре интегрирования, то достаточно найти максимумы этой функции $\Phi'(z_0) = 0$, разложиться квадратично вблизи этих максимумов (а «медленную» огибающую $A(z)$ можно просто взять в максимуме $A(z_0)$). Метод перевала в комплексной плоскости базируется на этой же простой идее, и он использует то хорошее свойство комплексных интегралов от аналитических функций, а именно — возможность модифицировать контур интегрирования. Таким образом, для асимптотической оценки интеграла всегда модифицировать контур так, чтобы «ходить» только по линиям постоянной фазы $\text{Im} \Phi(z) = \text{const}$. Обратим внимание, что линии постоянной фазы тождественно совпадают с линиями *наискорейшего спуска*, то есть с направлением $\nabla \text{Re} \Phi$.

³Поскольку уравнение линейное, то его можно домножить на произвольную константу; в этом смысле знак Z не играет никакой роли

Шаг первый Сперва требуется найти положение так называемых седловых точек⁴ $\Phi'(z_0) = 0$. В нашем случае есть функция $\Phi(t) = xt - \frac{t^3}{3} \Rightarrow \Phi' = x - t^2 = 0$. При $x > 0$, имеется пара седловых точек на вещественной оси $t_{1,2} = \pm\sqrt{x}$; при $x < 0$ имеется пара седловых точек на мнимой оси $t_{3,4} = \pm i\sqrt{|x|}$. Определим сразу значения функции в этих седловых точках:

$$\Phi(t) = \begin{cases} \pm \frac{2}{3}x^{3/2}, & t = t_{1,2} = \pm\sqrt{x} \\ \mp \frac{2}{3}i|x|^{3/2} & t = t_{3,4} = \pm i\sqrt{|x|} \end{cases}$$

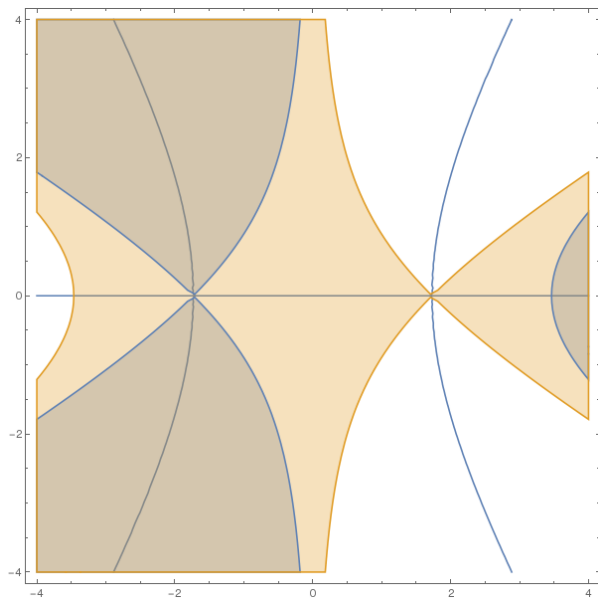
Шаг второй Затем требуется найти направление линий наискорейшего спуска из точки z_0 . Вблизи каждой точки функция в общем виде раскладывается квадратично $\Phi(z) \approx \Phi(z_0) + \frac{1}{2}\Phi''(z_0) \cdot (z - z_0)^2 + \dots$. Рассмотрим поведение функции $\text{Re}\Phi(z)$ в окрестности z_0 ; если положить $\Phi'' = |\Phi''|e^{i\arg\Phi''}$ и $z - z_0 = \rho e^{i\theta}$, тогда $\text{Re}(\Phi(z) - \Phi(z_0)) = \frac{1}{2}|\Phi''|\rho^2 e^{i(\arg\Phi'' + 2\theta)}$. Имеются следующие взаимно-перпендикулярные направления:

$$\arg\Phi'' + 2\theta = 2\pi n \Rightarrow \theta = -\frac{1}{2}\arg\Phi'', \quad \theta = -\frac{1}{2}\arg\Phi'' + \pi \quad (\text{направления наискорейшего возрастания})$$

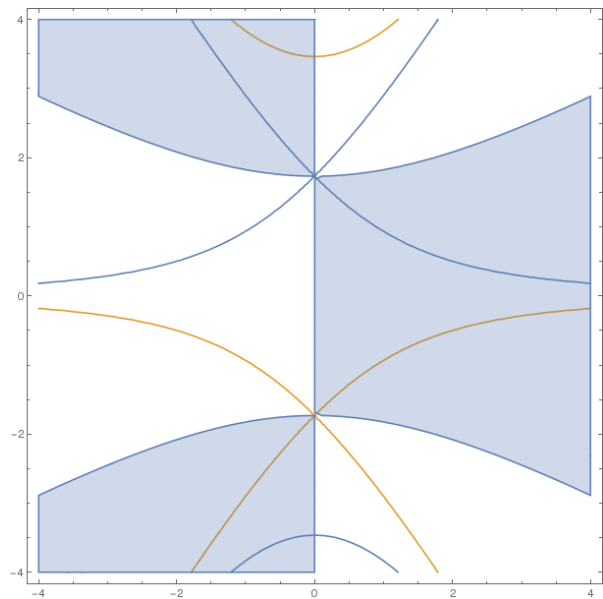
$$\arg\Phi'' + 2\theta = \pi + 2\pi n \Rightarrow \theta = -\frac{1}{2}\arg\Phi'' \pm \frac{\pi}{2}, \quad (\text{направления наискорейшего спуска})$$

В нашем случае получается следующее:

$$\Phi''(t) = -2t = \begin{cases} -2\sqrt{x} \Rightarrow \theta = 0, \pi, & t_1 = \sqrt{x}, \quad x > 0 \\ 2\sqrt{x} \Rightarrow \theta = \pm \frac{\pi}{2} & t_2 = -\sqrt{x}, \quad x > 0 \\ -2i\sqrt{|x|} \Rightarrow \theta = -\frac{\pi}{4}, \frac{3\pi}{4}, & t_3 = i\sqrt{|x|}, \quad x < 0 \\ 2i\sqrt{|x|} \Rightarrow \theta = -\frac{3\pi}{4}, \frac{\pi}{4}, & t_4 = -i\sqrt{|x|}, \quad x < 0 \end{cases}$$



(а) Случай $x = 3 > 0$. Видно, что для левой седловой точки линия наискорейшего спуска идёт вертикально, $\theta = \frac{\pi}{2}$; а для правой — наоборот, горизонтально, $\theta = 0$



(б) Случай $x = -3 < 0$. Верхней седловой точке соответствует направление наискорейшего спуска $\theta = -\frac{\pi}{4}$, а нижней — $\theta = \frac{\pi}{4}$

Рис. 2: Анализ топологии комплексной плоскости. Затемнённые области соответствуют областям, куда функция затухает $\text{Re}\Phi(z) < \text{Re}\Phi(z_0)$. Линии соответствуют линиям постоянной фазы $\text{Im}\Phi(z) = \text{Im}\Phi(z_0)$

Шаг третий Таким образом, нам бы хотелось пустить контур через точку z_0 под углом, соответствующим линии постоянной фазы — линии наискорейшего спуска. Если мы поступим так, то вклад в интеграл от окрестности z_0 оценится следующим образом⁵:

⁴Название связано с следующим утверждением. Как известно из ТФКП, функция $\text{Re}\Phi(z = x + iy)$ — гармоническая функция, то есть удовлетворяет уравнению Лапласа $\Delta\Phi = 0$. Это значит, что если вдоль какого-то направления функция имеет локальный минимум $\frac{\partial^2 \text{Re}\Phi}{\partial x^2} < 0$, то вдоль перпендикулярного — локальный максимум $\frac{\partial^2 \text{Re}\Phi}{\partial y^2} > 0$. Это значит, что в окрестности точки z_0 функция $\text{Re}\Phi(z)$ устроена как седло.

⁵Не стоит забывать фазу $e^{i\theta}$, связанную с переходом от интеграла по dz к интегралу вдоль направления наискорейшего спуска!

$$y = \int_C dz A(z) e^{-\Phi(z)} \approx \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\theta} d\rho A(z) e^{\Phi(z_0) - \frac{1}{2}|\Phi''|\rho^2} = \sqrt{\frac{2\pi}{|\Phi''|}} A(z_0) e^{\Phi(z_0) + i\theta}$$

Обратим внимание, что ведущая зависимость от параметра, как правило, даётся просто посредством $e^{\Phi(z_0)}$. Конечно, тут предполагается выполнение стандартных критериев метода перевала (а именно, что максимум достаточно узкий, и функция $A(z)$ достаточно медленна, так что такое разложение оправдано).

Шаг четвёртый Теперь нам можно наконец выбрать контур, соответствующий функции Эйри. Функция Эйри определяется как вещественное решение, которое при $x > 0$ экспоненциально затухает. Поэтому при $x > 0$ контур должен проходить только через седловую точку t_2 , и никак не через t_1 . Такой контур единственный — это C_1 (контур, идущий из нижнего сектора в верхний). Для удобства его можно пустить чисто по мнимой оси; выбирая константу так, чтобы определение совпало с стандартным (она равна $\frac{1}{2\pi i}$), мы можем написать:

$$\text{Ai}(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{C_1} e^{xt - t^3/3} dt = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \cos\left(xt - \frac{t^3}{3}\right) dt$$

Шаг пятый Теперь проведём непосредственно «перевальную» оценку интеграла по выбранному контуру для различных знаков x . При $x > 0$, контур «насаживается» на единственную седловую точку $t = t_2 = -\sqrt{x}$ и проходит через неё по направлению $\theta = \frac{\pi}{2}$; получается вклад:

$$\text{Ai}(x \rightarrow \infty) \approx \frac{1}{2\sqrt{\pi}x^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}x^{3/2}}$$

При $x < 0$ контур «насаживается» на обе седловые точки. Однако стоит обратить внимания, что фазы в них различны $\text{Im}\Phi(t_3) \neq \text{Im}\Phi(t_4)$; в связи с этим, вообще говоря, не существует единого контура, который проходит по линиям постоянной фазы через обе седловые точки. В действительности же контур идёт «снизу», проходит через седло $t = -2i\sqrt{|x|}$ под углом $\theta = \frac{\pi}{4}$; затем уходит на $t \rightarrow +\infty$ (подобно контуру $-C_3$!). Там он «перескакивает» на другую линию постоянной фазы, откуда от «возвращается» по ней до второго седла $t = 2i\sqrt{|x|}$, проходит его под направлением $\theta = \frac{3\pi}{4}$ и уходит «наверх» (как контур $-C_2$; смотри рисунок 2). Перевальная оценка тем самым даёт:

$$\text{Ai}(x \rightarrow -\infty) \approx \frac{1}{2\pi i} \sqrt{\frac{2\pi}{2\sqrt{|x|}}} \left[e^{\frac{2}{3}i|x|^{3/2} + i\frac{\pi}{4}} + e^{-\frac{2}{3}i|x|^{3/2} + i\frac{3\pi}{4}} \right] = \frac{1}{\sqrt{\pi}|x|^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}|x|^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right)$$

Пример. Задача Ландау-Зенера

Напомним, что задача Ландау-Зенера описывает общий случай «пересечения уровней» (level crossing), и описывается следующим гамильтонианом: $\hat{H} = \begin{pmatrix} \alpha t & \gamma \\ \gamma & -\alpha t \end{pmatrix}$. На $-\infty$ мы стартуем с волновой функции $\psi_1 \sim \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$; и интересуемся мы вероятностями оказаться в каждом из состояний при $t \rightarrow \infty$.

В домашнем задании к теории возмущений мы уже разбирали случай «быстрого» проскока, $\alpha \gg \gamma^2$, где мы получили, что вероятность перехода в состояние ψ_2 мала и в ведущем порядке теории возмущений равна $P = \pi \frac{\gamma^2}{\alpha}$. В адиабатическом пределе $\alpha \ll \gamma^2$, напротив, с близкой к единице вероятности мы остаёмся в том же адиабатическом состоянии (обратим внимание, что оно при $t \rightarrow \infty$ совпадает с ψ_2 !); а переходы — экспоненциально редки, $P = \#e^{-\pi\gamma^2/\alpha}$ (константа перед экспонентой из адиабатики не находится). Эта задача помимо всего прочего очень важна хотя бы потому, что допускает точное решение, которое можно построить, используя метод Лапласа. Итак, мы решаем следующую систему дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} i\partial_t \psi_1 &= \alpha t \cdot \psi_1 + \gamma \cdot \psi_2 \\ i\partial_t \psi_2 &= \gamma \cdot \psi_1 - \alpha t \cdot \psi_2 \end{cases}, \quad |\psi_1(-\infty)|^2 = 1, \quad \psi_2(-\infty) = 0$$

Система из двух уравнений первого порядка эквивалентна одному уравнению второго порядка, которое можно получить, исключая $\psi_2(t)$ ⁶. Кроме того, сразу обезразмерим уравнения, введя $z = \alpha^{1/2}t$ и $\beta = \frac{\gamma^2}{2\alpha}$ ⁷:

$$\psi_1'' + (i + 2\beta + z^2)\psi_1 = 0$$

Чтобы свести это уравнение к уравнению с линейными коэффициентами, можно явно выделить «динамическую» фазу $\psi_1(z) = e^{iz^2/2} f(z)$ ⁸:

⁶Это можно сделать, например, следующим образом: продифференцировать первое уравнение; подставить в него $\partial_t \psi_2$ из второго уравнения, и ψ_2 — напротив, из исходного первого

⁷Общее решение этого уравнения выражается через так называемые функции параболического цилиндра $D_{-i\beta}(\sqrt{2}e^{i\pi/4}t)$ и $D_{-1+i\beta}(-\sqrt{2}e^{-i\pi/4}t)$

⁸Это уравнение уже гипергеометрическое

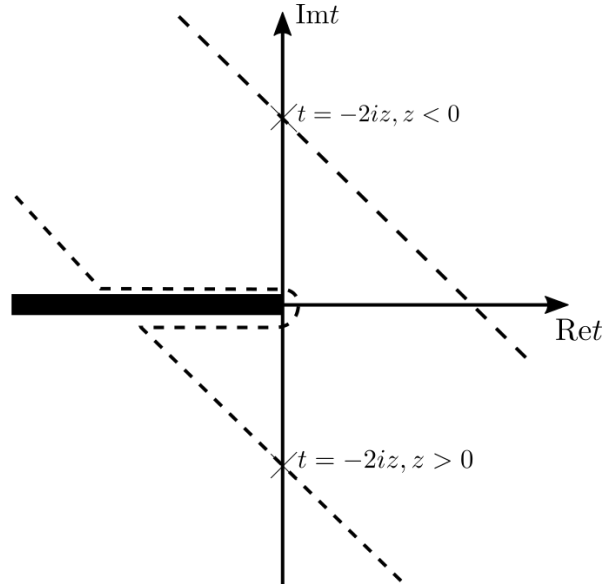


Рис. 3: Структура комплексной плоскости и контур интегрирования для задачи Ландау-Зенера

$$f'' + 2iz \cdot f' + 2(i + \beta)f = 0$$

Итак, мы получаем уравнение, которое можно решать с помощью метода Лапласа. Давайте его применим! Получаем:

$$P(t) = t^2 + 2(i + \beta), \quad Q(t) = 2it, \quad \int \frac{P}{Q} dt = -\frac{i}{4}t^2 + (-i\beta + 1) \ln t$$

$$f(z) = \int_C dt \cdot t^{-i\beta} \exp\left(-\frac{i}{4}t^2 + zt\right)$$

Определим седловые точки полученного интеграла:

$$\varphi(t) = -\frac{i}{4}t^2 + zt, \quad \varphi'(t_0) = -\frac{i}{2}t_0 + z = 0 \Rightarrow t_0 = -2iz, \quad \varphi(t_0) = -iz^2$$

$$\varphi'' = -\frac{i}{2} \Rightarrow \theta = -\frac{\pi}{4}$$

Таким образом, вклад от «седла» будет даваться $f(z) \sim e^{-iz^2} \Rightarrow \psi_1(z) \sim e^{-iz^2/2}$.

Кроме этого, для того, чтобы определить многозначную функцию $t^{-i\beta}$, требуется провести разрез. Вообще говоря, перевальный контур может этот разрез задеть, и в интеграл будет вклад от разреза. Такой вклад удобно будет оценить, если разрез пустить по вещественной оси влево $t \in (-\infty; 0)$; тогда вдоль разреза функция экспоненциально затухает, и вклад от разреза будет $f \sim 1 \Rightarrow \psi_1 \sim e^{iz^2/2}$. Исходя из постановки задачи, мы понимаем, что при $z \rightarrow -\infty$ вклад должен быть только от седла, а при $z \rightarrow +\infty$ — и от седла, и от разреза. Это достигается выбором контура, который идёт из 4 четверти во вторую (смотри рисунок).

Случай $z < 0$ Тут имеется только вклад от седла. При этом многозначная функция $t_0^{-i\beta} = e^{\pi\beta/2} \cdot |t_0|^{-i\beta}$, и получаем (вспоминая, что $\psi_1(z) = e^{-iz^2/2} f(z)$):

$$\psi_1(z \rightarrow -\infty) \approx \sqrt{2\pi} e^{\pi\beta/2} e^{-iz^2/2 - i\beta \ln 2|z| - i\pi/4}, \quad |\psi_1(z \rightarrow -\infty)|^2 = 2\pi e^{\pi\beta}$$

Воспользуемся первым уравнением, чтобы показать, что $\psi_2(-\infty) = 0$. Подставляя, получаем:

$$\psi_2(z \rightarrow -\infty) \approx -\sqrt{\pi\beta} e^{\pi\beta/2} \frac{1}{|z|} e^{-iz^2/2 - i\beta \ln(2|z|) - \frac{i\pi}{4}}, \quad |\psi_2(z \rightarrow -\infty)| \approx \frac{\pi\beta e^{\pi\beta}}{z^2} \rightarrow 0$$

Тем самым, мы проверили, что найденное решение — ровно то, что мы ищем!

Случай $z > 0$ Наша многозначная функция даёт $t_0^{-i\beta} = e^{-\pi\beta/2}|t_0|^{-i\beta}$; тем самым, вклад от седла даётся:

$$\psi_1^{(1)}(z \rightarrow +\infty) = \sqrt{2\pi}e^{-\pi\beta/2}e^{-iz^2/2-i\beta \ln 2z-i\pi/4}, \quad |\psi_1^{(1)}(z \rightarrow +\infty)|^2 = 2\pi e^{-\pi\beta/2}$$

Оценим теперь вклад от разреза. На разных берегах разреза мы имеем:

$$t^{-i\beta} = (-|t|)^{-i\beta} = \begin{cases} e^{\pi\beta}|t|^{-i\beta}, & \text{Im}t = +0 \\ e^{-\pi\beta}|t|^{-i\beta}, & \text{Im}t = -0 \end{cases}$$

Тем самым, вклад от разреза оценивается следующим образом. На нём затухающая экспонента e^{zt} «важнее», чем медленная $e^{-it^2/4}$; получаем:

$$\begin{aligned} \psi_1^{(2)}(z) &= e^{iz^2/2} \left[e^{-\pi\beta} \int_{-\infty}^0 dt \cdot |t|^{-i\beta} e^{zt} + e^{\pi\beta} \int_0^{-\infty} dt |t|^{-i\beta} e^{zt} \right] = \\ &= e^{iz^2/2} (e^{-\pi\beta} - e^{\pi\beta}) \int_0^{\infty} dt \cdot t^{-i\beta} e^{-zt} = -2 \sinh \pi\beta \Gamma(1-i\beta) \frac{1}{z} e^{i\beta \ln z + iz^2/2}, \quad |\psi_1^{(2)}(z \rightarrow +\infty)|^2 \sim \frac{4\pi\beta \sinh \pi\beta}{z^2} \rightarrow 0 \end{aligned}$$

(тут мы воспользовались тем, что $|\Gamma(1-i\beta)|^2 = \Gamma(1-i\beta)\Gamma(1+i\beta) = i\beta \frac{\pi}{\sin(i\pi\beta)} = \frac{\pi\beta}{\sinh \pi\beta}$).

Ответ Мы построили все необходимые асимптотики. Адиабатическое состояние, которое на $-\infty$ соответствовало в нашем базисе $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, на $+\infty$ соответствует $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Поэтому вероятность адиабатического перехода даётся просто величиной $P = \frac{|\psi_1(t \rightarrow +\infty)|^2}{|\psi_1(t \rightarrow -\infty)|^2} = e^{-2\pi\beta} \equiv e^{-\pi\gamma^2/\alpha}$ (обратим внимание, что вклад от разреза в эту величину, вообще говоря, нулевой). Этот ответ воспроизводит как пертурбативный ответ (при этом $1 - e^{-\pi\gamma^2/\alpha} \approx \pi \frac{\gamma^2}{\alpha}$), так и адиабатический.