

## W03 УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

### § 01 Уравнение Шредингера

◆ Уравнение Шредингера, известное всем по курсу квантовой механики, в одномерном случае имеет вид

$$i\hbar\psi_t = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi_{xx} + U(x)\psi. \quad (1)$$

Как известно, благодаря его линейности для получения общего решения достаточно найти решения вида  $\psi(x,t) = \varphi(x)e^{iEt/\hbar}$ , где функции  $\varphi(x)$  являются собственными функциями, удовлетворяющими обыкновенному дифференциальному уравнению

$$\frac{\hbar^2}{2m}\varphi_{xx} = (U(x) + E)\varphi. \quad (2)$$

◆ В частном случае отсутствия пространственного потенциала  $U(x)$  уравнение (1) сводится к виду

$$i\psi_t + \psi_{xx} = 0, \quad (1a)$$

отличающемся от уравнения диффузии (W02.17) лишь наличием мнимой единицы. Подставляя в (1a) решение в виде гармонической волны  $\psi_k(x,t) = Ae^{ikx - i\omega t}$ , получаем дисперсионное соотношение для свободного движения

$$\omega = k^2. \quad (3)$$

Легко видеть, что все высшие производные  $\omega(k)$ , начиная с третьей, равны нулю, что позволяет сразу использовать полученное ранее выражение (W01.15) для расплывания волнового пакета  $\psi(x,0) = A(x)e^{ik_0x}$ :

$$\begin{aligned} \psi(x,t) &= A(x,t)e^{ik_0(x-k_0t)}, \\ A(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} A_k \exp\left(ik(x-2k_0t) - ik^2t\right) dk = \\ &= \frac{1}{2\sqrt{i\pi t}} \int_{-\infty}^{\infty} A(x') \exp\left\{-\frac{i}{4t}(x-x'-2k_0t)^2\right\} dx' \end{aligned} \quad (4)$$

◆ В случае волнового пакета в форме гауссианы  $A(x) = \exp(-x^2/2\Delta^2)$  из (4) легко получаем

$$|A(x,t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{1+4t^2/\Delta^4}} \exp\left(-\frac{(x-2k_0t)^2}{\Delta^2(1+4t^2/\Delta^4)}\right), \quad (46)$$

то есть волновой пакет перемещается с групповой скоростью  $2k_0$ , а ширина его со временем возрастает.

## § 02 Параболическое уравнение

◆ Свойства уравнения Шредингера в одномерном и трехмерном случаях изучались подробно в курсе квантовой механики. Однако при описании эволюции медленно меняющейся амплитуды узких световых пучков в рамках классической электродинамики волновое уравнение сводится к т.н. параболическому уравнению, имеющему вид уравнения Шредингера в двумерном случае

$$i\psi_t + \Delta_{\perp}\psi = 0, \quad (5)$$

где переменная  $t$  имеет смысл пространственной координаты в направлении распространения пучка, а лапласиан  $\Delta_{\perp}$  описывает дифракционные эффекты в поперечных направлениях. Раскрывая лапласиан в полярных координатах, (5) можно записать в виде:

$$i\psi_t + m\left(\frac{1}{x}\psi_x + \frac{1}{x^2}\psi_{\varphi\varphi}\right) + \psi_{xx} = 0, \quad (5a)$$

где  $m=1$  соответствует обычному световому пучку, описываемому параболическим уравнением (5) с поперечным лапласианом (в этом случае координата  $x$  играет роль радиуса в цилиндрических координатах), а случай с  $m=0$  мы сохранили, чтоб была возможность перейти к плоскому оптическому пучку (например, в задаче о дифракции на краю экрана).

◆ Собственные функции полученного уравнения при  $m=1$  могут быть выражены через функции Бесселя, что не всегда удобно. Возможно, однако, найти частное решение двумерного уравнения Шредингера, имеющее более простой вид. Будем искать решение уравнения (5a) с волновым фронтом, имеющим форму спирали  $\psi(t, x, \varphi) = f(x)e^{ikx - i\omega t + i\mu\varphi}$ . Подставляя его в параболическое уравнение (5a), получаем дифференциальное уравнение второй степени для функции  $f(x)$ :

$$f'' + 2ikf' + (\omega - k^2)f + \frac{1}{x}(f' + ikf) - \frac{\mu^2}{x^2}f = 0. \quad (6)$$

Предполагая, что  $f(x) \sim x^{\alpha}$  и приравнявая в уравнении (6) коэффициенты при разных степенях  $x$ , получаем систему

$$\begin{cases} \omega - k^2 = 0 \\ 1 + 2\alpha = 0 \\ \alpha^2 - \mu^2 = 0. \end{cases} \quad (7)$$

Первое из соотношений играет роль дисперсионного соотношения для волн такого типа, связывающего частоту и длину шага спирали, а из остальных находим  $\alpha = -1/2$ ,  $\mu = \pm 1/2$ . Это означает, что полученное решение оказывается периодичным по углу  $\varphi$  с периодом  $4\pi$ :

$$\psi(t, x, \varphi) = x^{-1/2} \exp\{ikx - ik^2t \pm i\varphi/2\}. \quad (8)$$

Таким образом, полученное решение не относится к классу решений параболического уравнения, имеющих период  $2\pi$  и выражающихся через функции Бес-

селя, и не годится для описания световых пучков. Однако в квантовомеханическом случае то, что при повороте на  $2\pi$  функция  $\psi$  меняет знак, означает, что в соответствии с принципами квантовой механики плотность вероятности, пропорциональная квадрату модуля волновой функции, имеет период  $2\pi$ . Другими словами, полученное решение в определенных условиях могло бы описывать какую-то реальную физическую ситуацию.

✧ Аналогичное решение со спиральным волновым фронтом (но с периодом  $2\pi$ ) для волнового уравнения, описывающее сингулярность в световой волне, получено в работе M.S.Soskin et al. "Topological charge and angular momentum of light beams carrying optical vortices", Phys.Rev. A56, 4064-4075 (1997).

◆ Вернемся к описанию световых пучков с помощью параболического уравнения (5а). Легко видеть, что оно инвариантно по отношению к масштабным преобразованиям  $x \rightarrow \alpha x$ ,  $t \rightarrow \alpha^2 t$ , что в осесимметричном или плоском случаях позволяет искать решение с помощью автомодельной подстановки, позволяющей уменьшить количество независимых переменных

$$\psi(x, t) = f(x^2/t). \quad (9)$$

Подставляя (9) в (5а), получаем дифференциальное уравнение

$$4zf'' = (iz - 2 - 2m)f', \quad (10)$$

где  $z = x^2/t$ . Интегрируя уравнение два раза, находим его решение в виде

$$f(z) \sim \int z^{\frac{1+m}{2}} \exp \frac{iz}{4} dz \sim t^{\frac{m-1}{2}} \int x^{-m} \exp \frac{ix^2}{4t} dx \quad (11)$$

Полученное автомодельное решение описывает дифракцию Френеля в случаях, когда прочие условия задачи также инвариантны относительно масштабных преобразований. Так, например, в плоском случае для дифракции волны на краю экрана легко получаем

$$\psi(x, t) \sim C(x/2\sqrt{t}) + iS(x/2\sqrt{t}), \quad (12)$$

где функции  $C(z)$  и  $S(z)$  - интегралы Френеля, знакомые всем по курсу оптики. Дифракция на отверстии, однако, не может быть описана подобным образом, так как размеры отверстия не инвариантны относительно упомянутых выше масштабных преобразований.

◆ На практике чаще всего используется модель гауссова светового пучка, у которого спадание амплитуды при удалении от его оси описывается функцией Гаусса. Будем искать решение параболического уравнения в виде  $\psi(t, r) = u(t)e^{-f(t)r^2}$ , учитывая, что поперечный лапласиан в этом случае удобнее вычислять в декартовых координатах  $r^2 = x^2 + y^2$ . После подстановки в (5) получаем уравнение

$$i(u' - uf'r^2) - 4u(f + f^2r^2) = 0 \quad (13)$$

Приравнивая коэффициенты при разных степенях  $r$ , получаем систему двух диф.уравнений 1-го порядка для двух неизвестных функций  $u(t)$  и  $f(t)$ , которые легко интегрируются. В результате получаем решение

$$\psi(t, r) = \frac{u_0}{\sqrt{(t-t_0)^2 + \varphi_0^2}} \exp\left(-\frac{ir^2}{4(t-t_0 + i\varphi_0)} + i \operatorname{arctg} \frac{t-t_0}{\varphi_0}\right) \quad (14)$$

Действительная часть показателя экспоненты описывает гауссово поведение амплитуды пучка, а мнимая - переменный радиус кривизны волнового фронта. Положение  $t = t_0$  соответствует перетяжке гауссова пучка.

### § 03 Нелинейное уравнение Шредингера

◆ Уравнение Шредингера с дополнительным членом  $\psi|\psi|^2$  называют нелинейным уравнением Шредингера (НУШ):

$$i\psi_t + \psi_{xx} + \psi|\psi|^2 = 0 \quad (15)$$

Удобно перейти от комплексной функции  $\psi$  к двум действительным функциям. Подставляя в (15)  $\psi = ue^{i\varphi}$  и разделяя мнимую и действительную части уравнения, получаем систему

$$\begin{cases} u_t + 2u_x\varphi_x + u\varphi_{xx} = 0 \\ u\varphi_t + u\varphi_x^2 - u_{xx} - u^3 = 0 \end{cases} \quad (16)$$

◆ Метода получения общего решения этой системы не существует. Будем искать решение в виде волнового пакета  $\psi(x, t) = u(x, t)\exp(ikx - i\omega t)$ . В этом случае  $\varphi_t = -\omega$ ,  $\varphi_x = k$ ,  $\varphi_{xx} = 0$ , и из первого уравнения (16) немедленно получаем

$$u_t = -2ku_x, \quad (17)$$

то есть функция  $u$  имеет вид бегущей волны:  $u(x, t) = u(x - 2kt)$ . Из второго уравнения (16) следует

$$u'' - (k^2 - \omega)u + u^3 = 0. \quad (18)$$

После умножения на  $u'$  полученное уравнение легко интегрируется:

$$u'^2 - (k^2 - \omega)u^2 + u^4/2 = E. \quad (19)$$

Легко видеть, что функция  $u$  описывает движение с энергией  $E$  в потенциале

$$W(u) = \frac{u^4}{2} - (k^2 - \omega)u^2. \quad (20)$$

В случае  $k^2 - \omega = \eta^2 > 0$  функция  $W(u)$  описывает двухямный потенциал (рис. W03.A). При  $E < 0$  движение  $u$  происходит в одной из двух малых ям, тогда как при  $E > 0$  - во всей потенциальной яме.

◆ Решение, соответствующее  $E = 0$ , является особым - приближение к точке поворота  $W(0) = 0$ , соответствующее движению по сепаратрисе, происходит бесконечно долго, т.к.  $u'(x) \rightarrow 0$ . Это означает, что форма решения  $u(x)$ , соответствующая движению системы по половинке восьмерки сепаратрисы, будет

иметь вид уединенного возмущения, выходящего на константу при  $x \rightarrow \pm\infty$ . Найдем явный вид решения в этом случае:

$$\int dx = \sqrt{2} \int \frac{du}{u\sqrt{2\eta^2 - u^2}} = \frac{1}{\eta} \ln \operatorname{tg} \left( \frac{1}{2} \arcsin \frac{u}{\sqrt{2}\eta} \right). \quad (21)$$

Обращая полученное соотношение, получаем частное решение нелинейного уравнения Шредингера в виде

$$\psi(x, t) = \frac{\sqrt{2}\eta \exp\{ikx - i(k^2 - \eta^2)t + i\varphi_0\}}{\operatorname{ch}\{\eta(x - x_0 - 2kt)\}}. \quad (22)$$

Полученное решение является **солитоном** - уединенной волной, сохраняющей свою форму и скорость после столкновения с другой такой уединенной волной. Более подробно свойства солитонов будут рассмотрены в следующих лекциях.

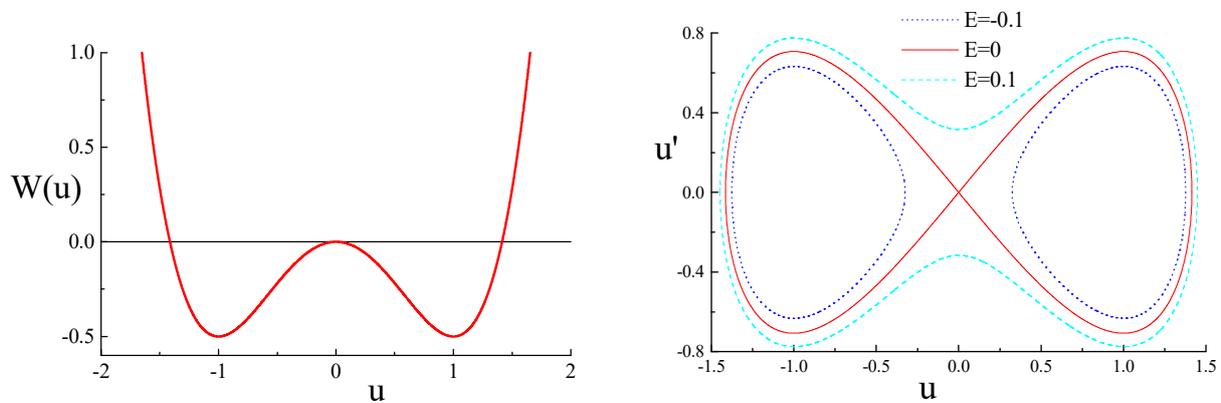


Рис.W03.A. Двухямный потенциал (20) при  $\eta^2 = 1$  и фазовый портрет движения в нем при различных значениях энергии.

### § 04 Самофокусировка. Приближение геометрической оптики

◆ Нелинейный член  $\psi|\psi|^2$  в параболическом уравнении описывает кубическую нелинейность вещества, в котором распространяется волновой пучок:

$$i\psi_t + \Delta_{\perp}\psi + \varepsilon\psi|\psi|^2 = 0. \quad (23)$$

Коэффициент  $\varepsilon = \pm 1$  учитывает знак кубической нелинейности, в зависимости от которого нелинейность увеличивает или уменьшает расходимость пучка. При соответствующем знаке и достаточно большой амплитуде поля нелинейность может полностью скомпенсировать дифракционную расходимость и привести к самофокусировке пучка.

◆ Аналогично (16), для амплитуды и фазы  $\psi$  получаем систему двух уравнений:

$$\begin{cases} u_t + 2\nabla_{\perp}u\nabla_{\perp}\varphi + u\Delta_{\perp}\varphi = 0 \\ u\varphi_t + u|\nabla_{\perp}\varphi|^2 - \Delta_{\perp}u - \varepsilon u^3 = 0. \end{cases} \quad (24)$$

Во многих случаях достаточно анализа этой системы в приближении геометрической оптики, при котором можно пренебречь дифракционным членом для амплитуды  $\Delta_{\perp} u \rightarrow 0$ , так как она меняется гораздо медленнее фазы. Как и раньше, в осесимметричном случае можно уменьшить количество независимых переменных до двух:

$$\begin{cases} u_t + 2u_x \varphi_x + u(\varphi_{xx} + \varphi_x/x) = 0 \\ \varepsilon u^2 = \varphi_t + \varphi_x^2 \end{cases} \quad (25)$$

Полученную систему можно упростить с помощью замены  $p = u^2$ ,  $\theta = \varphi_x$ :

$$\begin{cases} p_t + 2p_x \theta + 2p(\theta_x + \theta/x) = 0 \\ \varepsilon p_x = \theta_t + 2\theta\theta_x \end{cases} \quad (26)$$

◆ Система (26) по-прежнему слишком сложна для поиска общего решения. Поэтому будем искать решение в безаберрационном приближении - в форме гауссового пучка:

$$\theta(x, t) = \varphi_x = x f(t), \quad (27)$$

что также учитывает тот факт, что из системы (26) следует нечетность функции  $\theta(x)$ . Из (27) и второго уравнения (26) следует, что функция  $p$  имеет первые два члена в разложении по четным степеням  $x$ :

$$p(x, t) = h(t) - x^2 g(t). \quad (28)$$

Подставляя (27) и (28) в (26) и приравнивая коэффициенты при различных степенях  $x$ , получаем систему дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} h' + 4fh = 0 \\ g' + 8fg = 0 \\ f' + 2f^2 + 2\varepsilon g = 0 \end{cases} \quad (29)$$

Первое уравнение определяет функцию  $h(t)$ . Выражая из второго уравнения  $f$  через  $g$  и подставляя в третье, получаем нелинейное дифференциальное уравнение второй степени

$$\frac{g''}{g} - \frac{5}{4} \frac{g'^2}{g^2} - 16\varepsilon g = 0. \quad (30)$$

Для решения этого уравнения умножим его на  $g^{-1/4}$  и перепишем в виде

$$\left( g^{-5/4} g' \right)' - 16\varepsilon g^{3/4} = 0 \quad (31)$$

Отсюда для функции  $q(t) = \{g(t)\}^{-1/4}$  получаем

$$q'' + 4\varepsilon q^{-3} = 0 \quad (32)$$

Уравнение (32) легко проинтегрировать, умножив его на  $q'$ :

$$q'^2 - 4\varepsilon q^{-2} = \text{const} = -4\varepsilon \mu. \quad (33)$$

◆ В результате дальнейшего интегрирования легко получаем

$$q(t) = \sqrt{1/\mu - 4\varepsilon\mu^2 t^2}, \quad (34)$$

откуда

$$u^2(x,t) = (1 - 4\varepsilon\mu^2 t^2)^{-1} - \mu^2 (1 - 4\varepsilon\mu^2 t^2)^{-2} x^2$$

$$\varphi(x,t) = \varphi_0(t) - \varepsilon\mu^2 t (1 - 4\varepsilon\mu^2 t^2)^{-1} x^2 \quad (35)$$

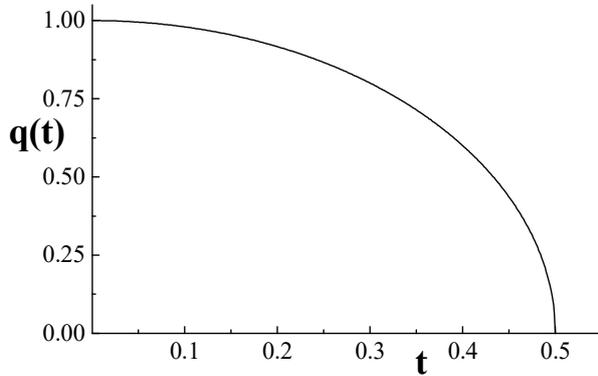


Рис.W03.В.

Поведение функции  $q(t)$  при самофокусировке в осесимметричном случае (34) ( $\mu = 1, \varepsilon = 1$ ).

◆ Полученное решение описывает эволюцию первых двух членов в разложении распределения интенсивности пучка  $u^2(x)$  по степеням  $x^2$ . Величина  $1/\mu$  имеет смысл начальной ширины пучка. В случае  $\varepsilon = 1$  на расстоянии  $\Delta t = 1/2\mu$  интенсивность пучка в центре стремится к бесконечности, а ширина пучка – к нулю, что соответствует самофокусировке. Поведение функции  $q(t)$  показано на рис.W03.В.

◆ Отметим, что реальное поведение светового пучка за точкой самофокусировки может быть определено только с учетом отброшенного дифракционного члена для амплитуды.

### § 05 Самофокусировка. Достаточный критерий

◆ Решение (35) производит впечатление, что при правильном знаке нелинейности самофокусировка неизбежна. Однако это приближенное решение, на самом деле это не так – если световой пучок слишком слаб и рассредоточен, нелинейный член будет слишком мал для компенсации дифракционных эффектов. Оказывается, можно найти точный критерий, позволяющий с уверенностью утверждать о том, что самофокусировка произойдет. Вернемся снова к уравнению (23):  $i\psi_t + \Delta_{\perp}\psi + \varepsilon\psi|\psi|^2 = 0$ .

◆ Домножая его на  $\psi^*$  и вычитая из него комплексно сопряженное, получаем

$$\frac{\partial|\psi|^2}{\partial t} + i\nabla_{\perp}\mathbf{J} = 0, \quad (36)$$

где  $\mathbf{J} = \psi \nabla_{\perp} \psi^* - \psi^* \nabla_{\perp} \psi$ . Отсюда следует, что интеграл по поперечному сечению пучка  $I = \int |\psi|^2 d^2\rho$  не зависит от  $t$ , так как интеграл по большому контуру вокруг светового пучка  $\oint \mathbf{J} d\mathbf{l} = 0$  в соответствии с граничными условиями. Далее мы будем опускать индекс  $\perp$  в обозначениях поперечных операторов  $\nabla_{\perp}$  и дельта  $\Delta_{\perp}$ . Рассмотрим теперь эволюцию величины  $q = 2|\nabla\psi|^2 - \varepsilon|\psi|^4$ :

$$\frac{\partial q}{\partial t} = 2(\nabla\psi \nabla\psi_t^* + \text{к.с.}) - 2\varepsilon|\psi|^2 \frac{\partial |\psi|^2}{\partial t}. \quad (37)$$

Подставляя  $\psi_t$  из (23) и  $|\psi|_t^2$  из (36), можно получить

$$q_t = 2i\nabla \left\{ \nabla\psi^* \Delta\psi - \nabla\psi \Delta\psi^* + \varepsilon|\psi|^2 \mathbf{J} \right\}, \quad (38)$$

откуда следует, что величина  $Q = \int (2|\nabla\psi|^2 - \varepsilon|\psi|^4) d^2\rho$  также сохраняется. Наконец, выведем уравнение для среднего квадрата радиуса пучка  $R^2 = \frac{1}{I} \int |\psi|^2 \rho^2 d^2\rho$ . Дифференцируя его по  $t$ , подставляя (36) и интегрируя по частям, получаем

$$I \frac{dR^2}{dt} = -i \int \rho^2 \nabla \mathbf{J} d^2\rho = 2i \int (\mathbf{J} \rho) d^2\rho. \quad (39)$$

Дифференцируя его еще раз и используя исходное уравнение (35), имеем:

$$I \frac{d^2 R^2}{d^2 t} = -2 \int \left[ \left\{ \Delta\psi (\rho \nabla) \psi^* - \psi (\rho \nabla) \Delta\psi^* + \hat{e} \cdot \hat{n} \right\} + \left\{ \varepsilon |\psi|^2 (\rho \nabla) \psi^* - \psi (\rho \nabla) (\psi^* |\psi|^2) + \hat{e} \cdot \hat{n} \right\} \right] d^2\rho. \quad (40)$$

Вторую фигурную скобку достаточно легко упростить, а первая скобка преобразуется при помощи тождества  $\nabla(\rho \nabla)\psi = (\rho \nabla)\nabla\psi + \nabla\psi$ . Учитывая, что все члены вида  $\nabla(\dots)$  при интегрировании обнуляются, получаем:

$$I \frac{d^2 R^2}{d^2 t} = 2 \int \left[ 4|\nabla\psi|^2 + \varepsilon(\rho \Delta) |\psi|^4 \right] d^2\rho \quad (41)$$

Интегрируя последний член по частям и учитывая, что  $\nabla_{\perp} \rho = 2$ , получаем

$$\frac{d^2 R^2}{d^2 t} = \frac{4Q}{I}, \quad (42)$$

откуда находим закон эволюции среднего квадрата радиуса пучка

$$R^2(t) = R_0^2 + \frac{2Q}{I} (t - t_0)^2. \quad (43)$$

Таким образом, если выполнено неравенство  $Q < 0$ , средний квадрат радиуса пучка достигает нуля на конечном расстоянии, что означает фокусировку. Отметим, что этот критерий работает только в одну сторону - если  $Q > 0$ , часть пучка все равно может сфокусироваться.