

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

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

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 Δ_{\perp} описывает дифракционные эффекты в поперечных направлениях. Раскрывая лапласиан, (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 φ с периодом 4π :

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

Таким образом, полученное решение не относится к классу решений параболического уравнения, имеющих период 2π и выражающихся через функции Бесселя, и не годится для описания световых пучков. Однако в квантовомеханиче-

ском случае то, что при повороте на 2π функция ψ меняет знак, означает, что в соответствии с принципами квантовой механики плотность вероятности, пропорциональная квадрату модуля волновой функции, имеет период 2π . Другими словами, полученное решение в определенных условиях могло бы описывать какую-то реальную физическую ситуацию.

✧ Аналогичное решение со спиральным волновым фронтом (но с периодом 2π) 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.

§ 03 Нелинейное уравнение Шредингера

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

$$i\psi_t + \psi_{xx} + \psi|\psi|^2 = 0 \quad (13)$$

Удобно перейти от комплексной функции ψ к двум действительным функциям. Подставляя в (13) $\psi = ue^{i\varphi}$ и разделяя мнимую и действительную части уравнения, получаем систему

$$\begin{cases} u_t + 2u_x\varphi_x + u\varphi_{xx} = 0 \\ u\varphi_t + u\varphi_x^2 - u_{xx} - u^3 = 0 \end{cases} \quad (14)$$

◆ 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 (14) немедленно получаем

$$u_t = -2ku_x, \quad (15)$$

то есть функция u имеет вид бегущей волны: $u(x,t) = u(x - 2kt)$. Из второго уравнения (14) следует

$$u'' - (k^2 - \omega)u + u^3 = 0. \quad (16)$$

После умножения на u' полученное уравнение легко интегрируется:

$$u'^2 - (k^2 - \omega)u^2 + u^4/2 = E. \quad (17)$$

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

$$W(u) = \frac{u^4}{2} - (k^2 - \omega)u^2. \quad (18)$$

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.

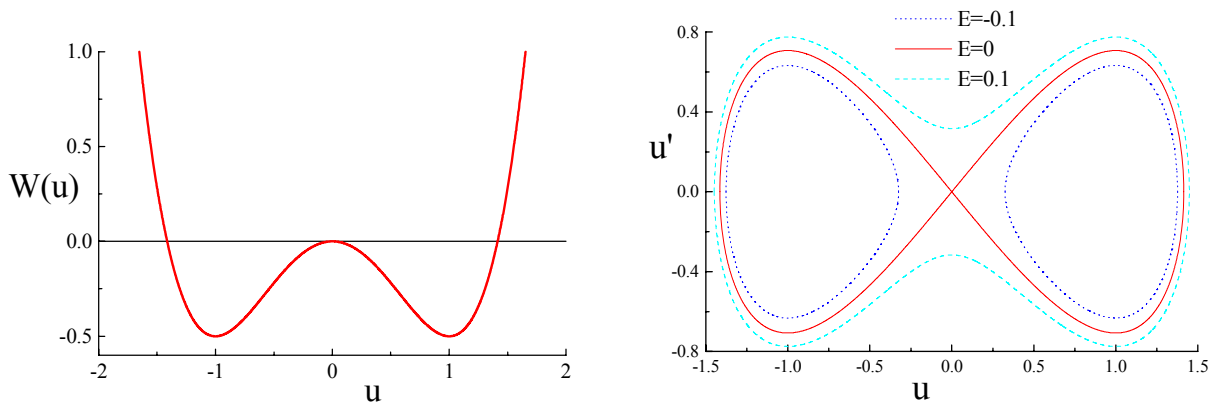


Рис.W03.A. Двухямный потенциал (18) при $\eta^2 = 1$ и фазовый портрет движения в нем при различных значениях энергии.

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

$$\int dx = \sqrt{2} \int \frac{du}{u\sqrt{2\eta^2 - u^2}} = \frac{1}{\eta} \ln \operatorname{tg} \left(\frac{1}{2} \arcsin \frac{u}{\sqrt{2}\eta} \right). \quad (19)$$

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

$$\psi(x, t) = \frac{\sqrt{2}\eta \exp\{ikx - i(k^2 - \eta^2)t + i\varphi_0\}}{\operatorname{ch}\{\eta(x - x_0 - 2kt)\}}. \quad (20)$$

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.

§ 04 Самофокусировка. Приближение геометрической оптики

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

$$i\psi_t + \Delta_{\perp}\psi + \varepsilon\psi|\psi|^2 = 0. \quad (21)$$

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 (14), для амплитуды и фазы ψ получаем систему двух уравнений:

$$\begin{cases} u_t + 2\nabla_{\perp}u\nabla_{\perp}\varphi + u\Delta_{\perp}\varphi = 0 \\ u\varphi_t + u|\nabla_{\perp}\varphi|^2 - \Delta_{\perp}u - \varepsilon u^3 = 0. \end{cases} \quad (22)$$

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:

$$\begin{cases} u_t + 2u_x\varphi_x + u(\varphi_{xx} + \varphi_x/x) = 0 \\ \varepsilon u^2 = \varphi_t + \varphi_x^2 \end{cases}. \quad (23)$$

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

$$\begin{cases} p_t + 2p_x\theta + 2p(\theta_x + \theta/x) = 0 \\ \varepsilon p_x = \theta_t + 2\theta\theta_x \end{cases}. \quad (24)$$

◆ Система (24) по-прежнему слишком сложна для поиска общего решения. Поэтому будем искать решение в безабберационном приближении - в виде сферического волнового фронта с переменным радиусом кривизны:

$$\theta(x, t) = \varphi_x = xf'(t), \quad (25)$$

что также учитывает тот факт, что из системы (24) следует нечетность функции $\theta(x)$. Из (25) и второго уравнения (24) следует, что функция p имеет первые два члена в разложении по четным степеням x :

$$p(x,t) = h(t) - x^2 g(t). \quad (26)$$

Подставляя (25) и (26) в (24) и приравнивая коэффициенты при различных степенях x , получаем систему дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} h' + 4fh = 0 \\ g' + 8fg = 0 \\ f' + 2f^2 + 2\varepsilon g = 0 \end{cases}. \quad (27)$$

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

$$\frac{g''}{g} - \frac{5}{4} \frac{g'^2}{g^2} - 16\varepsilon g = 0. \quad (28)$$

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

$$\left(g^{-5/4} g' \right)' - 16\varepsilon g^{3/4} = 0 \quad (29)$$

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

$$q'' + 4\varepsilon q^{-3} = 0 \quad (30)$$

Уравнение (30) легко проинтегрировать, умножив его на q' :

$$q'^2 - 4\varepsilon q^{-2} = \text{const} = -4\varepsilon\mu. \quad (31)$$

◆ В результате дальнейшего интегрирования легко получаем

$$q(t) = \sqrt{1/\mu - 4\varepsilon\mu t^2}, \quad (32)$$

откуда

$$\begin{aligned} u^2(x,t) &= \left(1 - 4\varepsilon\mu^2 t^2\right)^{-1} - \mu^2 \left(1 - 4\varepsilon\mu^2 t^2\right)^{-2} x^2 \\ \varphi(x,t) &= \varphi_0(t) - \varepsilon\mu^2 t \left(1 - 4\varepsilon\mu^2 t^2\right)^{-1} x^2 \end{aligned} \quad (33)$$

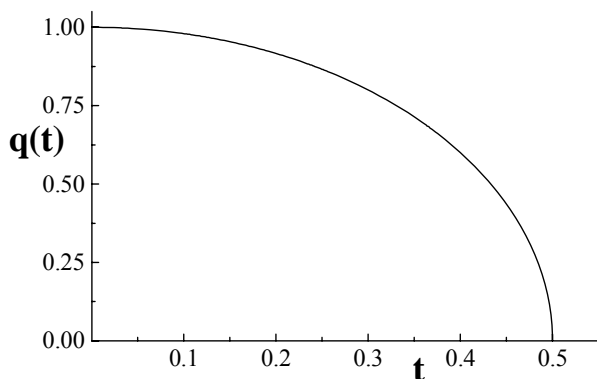


Рис.W03.В.

Поведение функции $q(t)$ при самофокусировке в осесимметричном случае (32) ($\mu = 1, \varepsilon = 1$).

◆ 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 (33) 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 (21):

$$i\psi_t + \Delta_{\perp}\psi + \varepsilon\psi|\psi|^2 = 0. \quad (34)$$

◆ Домножая его на ψ^* и вычитая из него комплексно сопряженное, получаем

$$\frac{\partial|\psi|^2}{\partial t} + i\nabla_{\perp}\mathbf{J} = 0, \quad (35)$$

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 $\oint\mathbf{J}dl = 0$ в соответствии с граничными условиями. Далее мы будем опускать индекс \perp в обозначениях поперечных операторов ∇_{\perp} и дельта Δ_{\perp} . Рассмотрим теперь эволюцию величины $q = 2|\nabla\psi|^2 - \varepsilon|\psi|^4$:

$$\frac{\partial q}{\partial t} = 2(\nabla\psi\nabla\psi_t^* + \text{к.с.}) - 2\varepsilon|\psi|^2\frac{\partial|\psi|^2}{\partial t}. \quad (36)$$

Подставляя ψ_t из (34) и $|\psi|_t^2$ из (35), можно получить

$$q_t = 2i\nabla\left\{\nabla\psi^*\Delta\psi - \nabla\psi\Delta\psi^* + \varepsilon|\psi|^2\mathbf{J}\right\}, \quad (37)$$

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 (35) и интегрируя по частям, получаем

$$I \frac{dR^2}{dt} = -i \int \rho^2 \nabla \mathbf{J} d^2 \rho = 2i \int (\mathbf{J} \rho) d^2 \rho. \quad (38)$$

Дифференцируя его еще раз и используя исходное уравнение (34), имеем:

$$I \frac{d^2 R^2}{d^2 t} = -2 \int \left[\left\{ \Delta \psi (\rho \nabla) \psi^* - \psi (\rho \nabla) \Delta \psi^* + \hat{e} \cdot \hat{n} \right\} + \right. \\ \left. + \varepsilon \left\{ \psi |\psi|^2 (\rho \nabla) \psi^* - \psi (\rho \nabla) (\psi^* |\psi|^2) + \hat{e} \cdot \hat{n} \right\} \right] d^2 \rho. \quad (39)$$

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:

$$I \frac{d^2 R^2}{d^2 t} = 2 \int \left[4 |\nabla \psi|^2 + \varepsilon (\rho \Delta) |\psi|^4 \right] d^2 \rho \quad (40)$$

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

$$\frac{d^2 R^2}{d^2 t} = \frac{4Q}{I}, \quad (41)$$

откуда находим закон эволюции среднего квадрата радиуса пучка

$$R^2(t) = R_0^2 + \frac{2Q}{I} (t - t_0)^2. \quad (42)$$

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.

