Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Б. Ю. Стернин, В. Е. Шаталов, Метод ресургентного анализа в теории атомных столкновений, *ТМФ*, 1997, том 112, номер 2, 308–323

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf1045>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 35.173.137.237

26 апреля 2023 г., 13:28:27

Б. Ю. Стернин*, В. Е. Шаталов†

МЕТОД РЕСУРГЕНТНОГО АНАЛИЗА В ТЕОРИИ АТОМНЫХ СТОЛКНОВЕНИЙ

Рассматривается задача об атомных столкновениях в адиабатическом приближении. Показывается, что вычисление вероятностей перехода в этом приближении может быть получено средствами ресургентного анализа. Даются вычислительный алгоритм для переходных вероятностей и математическое обоснование этого алгоритма. Все рассмотрения проводятся на примере двухуровневой модели Ландау–Зинера.

ВВЕДЕНИЕ

Данная работа посвящена построению математической модели переходов при атомных столкновениях в адиабатическом приближении, когда малы относительные скорости сталкивающихся частиц. Такое приближение характеризуется наличием “медленного времени” $\tau = vt$, где скорость v предполагается малой.

Переходы между электронными состояниями описываются уравнением Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x, vt) \right] \psi, \quad (1)$$

здесь V – потенциал взаимодействия (в задаче об атомных столкновениях V – потенциал, создаваемый двумя заряженными центрами). Мы изучаем асимптотическое поведение решения уравнения (1) при $v \rightarrow 0$. Такая задача была рассмотрена с физической точки зрения Соловьевым [1]. Исследование этой задачи может быть разделено на две части: вычисление соответствующих термов $E_j(\tau)$ и построение адиабатических асимптотических решений (при $v \rightarrow 0$) задачи с известной энергией E_j .

В данной статье средствами ресургентного анализа изучается второй аспект общей проблемы – асимптотический. Для простоты изложения мы иллюстрируем метод ресургентного анализа на простейшей задаче с параболическим потенциалом (модель Ландау–Зинера), хотя вся схема применима и в общем случае.

Эта статья была написана в рамках программы “Экспоненциальные асимптотики” в Институте математики им. Исаака Ньютона (Кембридж, Англия) в весеннем семестре 1995 г. Мы весьма признательны организаторам программы, в особенности Майклу Берри и Крису Хоулсу за их приглашение и великолепные условия для работы. Мы также благодарны Е. А. Соловьеву, который обратил наше внимание на эту задачу и

*Московский государственный университет, Москва, Россия

†Московский технический университет электроники и математики РАН, Москва, Россия

ответил на многочисленные вопросы, которые возникали в процессе плодотворных дискуссий с ним. Английские версии этой работы были опубликованы в препринтах [2, 3].

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Вначале кратко остановимся на общей постановке задачи.

Рассмотрим протон и некоторый атом (например, водорода), двигающиеся с относительной скоростью v . Тогда в классическом по движению ядер приближении можно считать, что тяжелая частица движется как классическая частица, а электрон — как квантовая. Таким образом, переходы между электронными состояниями в этой системе описываются с помощью следующего уравнения Шредингера¹⁾:

$$i \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H}(R) \psi(x, t). \quad (2)$$

Здесь $\hat{H}(R)$ — гамильтониан электрона двухатомной квазимолекулы (точная форма гамильтониана $\hat{H}(R)$ для нас не важна), $x = (x^1, x^2, x^3)$ — координаты электрона и R — межъядерное расстояние, которое может быть записано в виде

$$R = \sqrt{d^2 + v^2 t^2},$$

d — прицельный параметр, и мы пренебрегаем кривизной классических траекторий тяжелых частиц.

Следуя [4], под адиабатическим приближением мы будем понимать асимптотическое разложение неизвестной функции $\psi(x, t)$ относительно малого параметра v .

Переходя к представлению заселенности атомных состояний, т.е. разлагая волновую функцию $\psi(x, t)$ электрона по базису $\{\psi_j(x, R)\}$, который состоит из собственных функций мгновенного гамильтониана $\hat{H}(R)$, отвечающих собственным значениям $E_j(R)$ (последние называются *адиабатическими потенциальными кривыми*),

$$\psi(x, t) = \sum_j c_j(t) \psi_j(x, R(t)), \quad (3)$$

получим следующую бесконечную систему дифференциальных уравнений Борна–Фока для функций $c_j(t)$:

$$i \frac{\partial c_j(t)}{\partial t} = \sum_k H_{jk}(t) c_k(t), \quad (4)$$

где (бесконечная) матрица $\|H_{jk}(t)\|$ определяет гамильтониан $\hat{H}(t)$ в рассматриваемом представлении. Для того чтобы выделить явно малый параметр v , мы введем новую переменную $\tau = vt$ (“медленное время”). Тогда система (4) переписется в виде

$$i v \frac{\partial c_j(\tau, v)}{\partial \tau} = \sum_k H_{jk}(\tau) c_k(\tau, v), \quad (5)$$

где функции $H_{jk}(\tau)$ зависят от переменной τ регулярным образом.

¹⁾Здесь и ниже мы используем атомную систему единиц, для которой $\hbar = 1$, $m = 1$, $e = 1$.

Введем теперь *конечно-уровневую аппроксимацию* задачи (5). Прежде всего в силу теоремы Борна–Фока главный член адиабатического приближения показывает отсутствие переходов между различными состояниями электронов. В то же время а posteriori известно, что вероятности переходов $p_{j_0 j}$ в адиабатическом приближении экспоненциально убывают при $v \rightarrow 0$ как $e^{-\Delta/v}$, где Δ – кратчайшее расстояние между соответствующими термами (рис. 1). Это означает, что для исследования асимптотического поведения функции $c_j(t)$ по переменным v с точностью до экспоненциальных членов некоторого фиксированного типа достаточно включить в рассмотрение лишь конечное число компонент $c_k(t)$, соответствующих энергетическим уровням $E_k(R)$, расположенным вблизи данного терма $E_{j_0}(R)$. Таким образом, мы приходим к *конечномерной модели*, которая имеет вид уравнения (5), но только с конечной матрицей $\|H_{jk}(\tau)\|$.

Рис. 1. Квазипересечение.

Сформулируем теперь соответствующую математическую задачу. Рассмотрим систему

$$iv \frac{\partial c_j(\tau, v)}{\partial \tau} = \sum_{k=1}^n H_{jk}(\tau) c_k(\tau, v), \quad j = 1, 2, \dots, n, \quad (6)$$

обыкновенных дифференциальных уравнений с “начальными данными”

$$\lim_{\tau \rightarrow -\infty} c_j(\tau, v) = \begin{cases} 1, & j = j_0, \\ 0, & j \neq j_0 \end{cases} \quad (7)$$

относительно n неизвестных функций

$$c_j(\tau, v), \quad j = 1, 2, \dots, n.$$

Задача состоит в исследовании асимптотического поведения решения системы при $v \rightarrow 0$ с экспоненциальной точностью произвольного экспоненциального типа.

Поставленная задача будет решена в этой статье с помощью *ресургентного анализа* (см., например, [5]). Мы продемонстрируем наш метод на простейшей модели Ландау–Зинера, хотя вся вычислительная процедура может быть применена к общей модели типа (6), (7). Мы напомним [6, 7], что для модели Ландау–Зинера матрица $\hat{H}(\tau) = \|H_{jk}(\tau)\|$ имеет вид

$$\hat{H}(\tau) = \begin{pmatrix} a_1\tau & b_1 & b_2 & \dots \\ b_1 & a_2\tau & 0 & \dots \\ b_2 & 0 & a_3\tau & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix},$$

так что соответствующая двухуровневая модель $\hat{H}(\tau)$ записывается в виде матрицы

$$\hat{H}(\tau) = \begin{pmatrix} a_1\tau & b \\ b & a_2\tau \end{pmatrix}$$

с некоторыми вещественными постоянными a_1, a_2, b . Для определенности положим $a_1 = -2, b = -1, a_2 = 0$. Таким образом, мы приходим к системе двух обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} -iv \frac{dc_1}{d\tau} &= 2\tau c_1 + c_2, \\ -iv \frac{dc_2}{d\tau} &= c_1. \end{aligned} \quad (8)$$

В соответствии с методом ресургентного анализа [5] мы ищем решение системы (8) в виде

$$\begin{aligned} c_1(\tau, v) &= \mathcal{L}[C_1(\tau, s)], \\ c_2(\tau, v) &= \mathcal{L}[C_2(\tau, s)], \end{aligned} \quad (9)$$

где $C_j(\tau, s)$, $j = 1, 2$, являются бесконечно продолжимыми²⁾ аналитическими функциями по переменной s и $\mathcal{L}[C_j]$ – преобразование Лапласа³⁾ функции $C_j(\tau, s)$ по переменной s , взятой в некоторой точке ветвления $s = S(\tau)$:

$$c_j(\tau, v) = \mathcal{L}[C_j(\tau, s)] = \int_{\Gamma(\tau)} e^{\frac{i}{v}s} C_j(\tau, s) ds. \quad (10)$$

В последней формуле $\Gamma(\tau)$ – стандартный контур, окружающий особую точку $s = S(\tau)$ функции $C_j(\tau, s)$ (рис. 2). Как это обычно бывает в ресургентном анализе, нам необходимо исследовать асимптотическое поведение функций не только для вещественных, но также и для комплексных значений переменной τ . Вообще говоря, для того чтобы это сделать, необходимо потребовать, чтобы коэффициенты рассматриваемой системы

²⁾ *Бесконечно продолжимая* функция есть, грубо говоря, аналитическая функция, имеющая дискретное множество особенностей на своей римановой поверхности. По поводу точных определений см., например, [5, 8].

³⁾ Впоследствии мы увидим, что функции c_j будут представлены как сумма преобразований Лапласа функции C_j , взятых в различных точках ветвления этих функций (см. формулу (20) ниже). Сейчас этот факт не является для нас важным.

обыкновенных дифференциальных уравнений были бы целыми функциями. В нашем модельном примере это требование выполнено очевидным образом. Подставляя теперь выражения (10) для компонент $c_j(\tau, v)$ решений системы (8), получим следующую систему для неизвестных функций $C_j(\tau, s)$:

$$\begin{aligned}\frac{\partial C_1}{\partial \tau} &= -2\tau \frac{\partial C_1}{\partial s} - \frac{\partial C_2}{\partial s}, \\ \frac{\partial C_2}{\partial \tau} &= -\frac{\partial C_1}{\partial s}.\end{aligned}\quad (11)$$

Рис. 2. Стандартный контур интегрирования.

Далее, как будет видно ниже, можно предположить, что решение $\{C_j(\tau, s)\}$ последней системы имеет *простые особенности*, т.е. особенности вида

$$C_j(\tau, s) = \frac{a_0(\tau)}{s - S(\tau)} + \ln(s - S(\tau)) \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(s - S(\tau))^j}{j!} a_{j+1}(\tau) \quad (12)$$

вблизи каждой своей особой точки $s = S(\tau)$. В этом случае выражение (10) может быть рассмотрено как результат ресуммирования соответствующего ВКБ-ряда

$$e^{\frac{i}{v}S(\tau)} \sum_{j=0}^{\infty} v^j a_j(\tau). \quad (13)$$

Однако, как известно (см., например, [5]), асимптотические решения могут включать различное число ВКБ-членов для различных точек x (так называемое *явление Стокса*). Таким образом, для того чтобы исследовать решение методом ресургентного анализа, нужно:

изучить *ресургентную структуру* решения, т.е. определить значение действий для всех ВКБ-членов, которые могут входить в асимптотическое разложение;

изучить *явление Стокса*, т.е. определить, какие особенности типа (12) дадут вклад в асимптотическое разложение при различных значениях переменной x .

Эта программа будет реализована в последующих разделах.

2. РЕСУРГЕНТНАЯ СТРУКТУРА РЕШЕНИЙ

Нашей первоначальной целью является вычисление ресургентной структуры функции $c_j(\tau, v)$, т.е. структуры множества особенностей функции $C_j(\tau, s)$. Как это следует из формул (12), (13), ресургентная структура решения играет важную роль в ее ВКБ-разложении. Именно, если $s = S(\tau)$ – уравнение множества особенностей решения и $\{S_j(\tau)\}$ – различные ветви, вообще говоря, многозначной функции $S(\tau)$, то $S_j(\tau)$ играют роль действия в ВКБ-членах асимптотического разложения решения. Ясно, что вопрос, существует ли ресургентное решение системы вида (6), не является простым. В [5] мы доказали существование полной системы ресургентных решений обыкновенного дифференциального уравнения произвольного порядка с полиномиальными коэффициентами. Полученный результат может быть обобщен и на системы обыкновенных дифференциальных уравнений так, что можно доказать существование бесконечно продолжимого решения задачи (6), (7) (для случая систем уравнений с полиномиальными коэффициентами) с простыми особенностями в точках

$$s = S_j(\tau).$$

Здесь $S_j(\tau)$, как и ранее, являются различными ветвями решения соответствующего уравнения Гамильтона–Якоби. Для системы (11) уравнение Гамильтона–Якоби имеет вид

$$\begin{vmatrix} 2\tau - S'(\tau) & 1 \\ 1 & -S'(\tau) \end{vmatrix} = [S'(\tau)]^2 - 2\tau S'(\tau) - 1 = 0. \quad (14)$$

ЗАМЕЧАНИЕ 1. Для системы (8) существование ресургентных решений с простыми особенностями может быть доказано непосредственно. Для того чтобы это сделать, найдем решение этой системы в виде интеграла Лапласа

$$\begin{aligned} c_1(\tau, v) &= \int_{\gamma} \exp \left[\frac{i}{v} p \tau \right] A_1(p, v) dp, \\ c_2(\tau, v) &= \int_{\gamma} \exp \left[\frac{i}{v} p \tau \right] A_2(p, v) dp, \end{aligned}$$

где функции $A_1(p, v)$ и $A_2(p, v)$, а также контур интегрирования γ являются неизвестными. Подставляя последнее соотношение в систему (8), получаем для $A_1(p, v)$ и $A_2(p, v)$ следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned} pA_1 &= 2iv \frac{dA_1}{dp} + A_2, \\ pA_2 &= A_1. \end{aligned}$$

Решение полученной системы имеет вид

$$A_1(p, v) = \exp \left\{ \frac{i}{v} \left[-\frac{p^2}{4} + \frac{1}{2} \ln p \right] \right\},$$

$$A_2(p, v) = p^{-1} \exp \left\{ \frac{i}{v} \left[-\frac{p^2}{4} + \frac{1}{2} \ln p \right] \right\},$$

так что соответствующее решение (c_1, c_2) системы (8) записывается в виде

$$c_1(\tau, v) = \int_{\gamma} \exp \left\{ \frac{i}{v} \left[p\tau - \frac{p^2}{4} + \frac{1}{2} \ln p \right] \right\} dp,$$

$$c_2(\tau, v) = \int_{\gamma} \exp \left\{ \frac{i}{v} \left[p\tau - \frac{p^2}{4} + \frac{1}{2} \ln p \right] \right\} p^{-1} dp. \quad (15)$$

В последних интегралах выбор контура интегрирования γ проводится таким образом, чтобы эти интегралы сходились. Пример такого контура изображен на рис. 3. Этот контур можно выбрать произвольным образом как контур, идущий из бесконечности в область экспоненциального убывания интеграла (эта область на рисунке заштрихована) и обходящий полярную особенность $p = 0$ подынтегрального выражения.

Рис. 3. Выбор контура γ .

Перепишем теперь полученные выражения для решений в виде резургентных функций. Для этого совершим замену переменных

$$s = p\tau - \frac{p^2}{4} + \frac{1}{2} \ln p \quad (16)$$

в (15) и таким образом приведем выражения для решений к виду

$$c_1(\tau, v) = \int_{\gamma} \exp \left[\frac{i}{v} s \right] \frac{dp}{ds}(\tau, s) dp,$$

$$c_2(\tau, v) = \int_{\gamma} \exp \left[\frac{i}{v} s \right] p^{-1}(\tau, s) \frac{dp}{ds}(\tau, s) dp,$$

где $p(\tau, s)$ является решением уравнения (16) относительно переменной p .

Теперь очевидно, что особенности функций

$$C_1(\tau, s) = \frac{dp}{ds}(\tau, s),$$

$$C_2(\tau, s) = p^{-1}(\tau, s) \frac{dp}{ds}(\tau, s)$$

расположены в тех точках, где замена переменных (16) вырождается. Эти точки могут быть найдены из уравнения (16) вместе с уравнением

$$\frac{\partial}{\partial p} \left\{ p\tau - \frac{p^2}{4} + \frac{1}{2} \ln p \right\} = \tau - \frac{p}{2} + \frac{1}{2p} = 0$$

и имеют вид

$$s = S(\tau) = -\frac{1}{4} + \frac{\tau^2}{2} + \frac{1}{2}\tau\sqrt{\tau^2 + 1} + \frac{1}{2} \ln \left(\tau + \sqrt{\tau^2 + 1} \right). \quad (17)$$

Функция $S(\tau)$, определенная последним соотношением, — это решение уравнения Гамильтона–Якоби (14).

Построенное решение не является функцией с простыми особенностями в определенном выше смысле. Однако нетрудно построить решение с простыми особенностями, применяя оператор $(\partial/\partial s)^{-1/2}$ [5, 9, 10] к обеим функциям $C_1(\tau, s)$ и $C_2(\tau, s)$.

Продолжим исследование ресургентной структуры решения (11). Если найти функцию $S'(\tau)$ из уравнения Гамильтона–Якоби (14), то мы получим выражение для соответствующих адиабатических потенциальных кривых

$$E(\tau) = S'(\tau) = \tau + \sqrt{\tau^2 + 1} \quad (18)$$

(два различных определения квадратного корня соответствуют двум адиабатическим потенциальным кривым). Теперь, интегрируя полученный результат вдоль путей в комплексной τ -плоскости от начала координат до произвольной точки τ , мы получим уравнение множества особенностей решения $(C_1(\tau, s), C_2(\tau, s))$ системы (11) в виде⁴⁾

$$s = S(\tau) = \frac{\tau^2}{2} + \frac{1}{2}\tau\sqrt{\tau^2 + 1} + \frac{1}{2} \ln \left(\tau + \sqrt{\tau^2 + 1} \right). \quad (19)$$

Полученное множество особенностей изображено на рис. 4 для трех различных значений переменной τ . Именно, рис. 4а соответствует некоторому вещественному отрицательному значению τ , рис. 4б — значению $\tau = 0$, а рис. 4в — некоторому положительному значению переменной τ .

Видно, что для любого значения τ множество особенностей решения состоит из двух различных решеток с шагом $i\pi$. Для любого вещественного значения τ первая из этих решеток, соответствующая положительному знаку квадратного корня в выражении (19), содержит одну вещественную точку, а другая не содержит вещественных точек

⁴⁾Это выражение отличается от выражения (17), полученного выше, аддитивной постоянной $-1/4$. Поскольку выбор произвольной константы функции действия несуществен, мы будем использовать ниже наиболее простую нормировку.

Рис. 4. Ресургентная структура решения.

совсем. Если переменная τ меняется от $-\infty$ до 0, эти две решетки движутся одна навстречу другой в направлении вещественной оси. Далее, при значении $\tau = 0$ они пересекут друг друга и продолжат свое движение при τ , меняющемся от 0 до $+\infty$, так, что дистанция между ними будет неограниченно возрастать.

Обозначим теперь через S_+ (соответственно S_-) вещественное значение функции, определенной равенством (19) для положительного значения $\sqrt{\tau^2 + 1}$ (соответственно значение функции $S(\tau)$, имеющей мнимую часть, равную $i\pi/2$, для отрицательного значения $\sqrt{\tau^2 + 1}$). Ясно, что решение $(c_1(\tau, v), c_2(\tau, v))$ системы (8), которое дается выражением (10) с контуром интегрирования $\Gamma(\tau)$, окружающим точку $S_+(\tau)$ (или любую другую точку первой решетки), соответствует адиабатической потенциальной кривой $E_+(\tau)$ (с положительным значением $\sqrt{\tau^2 + 1}$). В то же время выражение с контуром $\Gamma(\tau)$, окружающим точку $S_-(\tau)$ (или любую другую точку второй решетки), дает решение, соответствующее потенциальной кривой $E_-(\tau)$ (с отрицательным значением $\sqrt{\tau^2 + 1}$). Таким образом, для того чтобы удовлетворить “начальным условиям” рассматриваемой задачи, необходимо выбрать для $\tau < 0$ решение, определенное формулой (10) с контуром интегрирования $\Gamma(\tau)$, показанным на рис. 4а.

Теперь мы должны продолжить полученное решение на все вещественные значения τ и вычислить это решение для достаточно больших положительных значений τ . Однако, как это видно из рис. 4, если переменная τ пересекает значение $\tau = 0$, контур интегрирования пересекается бесконечным множеством точек из второй решетки особенностей. Ясно, что в результате этого пересечения изменится топология контура интегрирования, поскольку особая точка, которая пересекает контур, может “вытянуть” из него один или два контура того же типа, но окружающего эту новую точку особенности. Такое явление известно в ресургентном анализе как *явление Стокса*, и, следовательно, изучение продолжения решения для положительных значений τ должно включать в себя рассмотрение явления Стокса. Это исследование и будет проведено в следующем разделе.

3. ИССЛЕДОВАНИЕ ЯВЛЕНИЯ СТОКСА

До настоящего момента мы строили решение уравнения (8) в области $\tau < 0$. Это решение представлялось в виде интеграла (10) с контуром $\Gamma(\tau)$, изображенным на рис. 4а. Однако, как это уже упоминалось в конце предыдущего раздела, топология контура интегрирования может измениться при продолжении построенного решения на все вещественные значения τ . Эта топологическая перестройка может случиться при $\tau = 0$, когда особенности подынтегрального выражения пересекают контур интегрирования.

Упомянутая перестройка является следствием того, что любая особая точка, пересекающая контур интегрирования, может “вытянуть” из него некоторый другой контур аналогичного типа. Однако мы не знаем а priori, как много контуров такого типа будет в результате пересечения “вытянуто” из контура интегрирования (если такие “вытянутые” контуры будут вообще присутствовать). Число “вытянутых” контуров зависит от того, какая из ветвей контура интегрирования (который расположен на римановой поверхности подынтегрального выражения) действительно пересекается рассматриваемой точкой особенности. Например (см. рис. 4б), точка A особенности подынтегрального выражения может пересекать обе ветви Γ_1 и Γ_2 контура интегрирования. В этом случае в результате пересечения из контура $\Gamma(\tau)$ будут “вытянуты” два добавочных контура. Может случиться также, что эта точка пересечет одну из ветвей Γ_1 и Γ_2 . В этом случае в процессе пересечения возникнет только один новый контур интегрирования. Наконец, можно себе представить, что точка A движется вдоль листа римановой поверхности, которая не содержит ни контур Γ_1 , ни контур Γ_2 . В этом случае процесс пересечения не приведет к появлению новых контуров интегрирования. Таким образом, мы видим, что, вообще говоря, интегральное представление решения в различных областях вещественной оси τ будет иметь вид

$$c_j(\tau, v) = \sum_k \mathcal{L}_{s_k} [C_j(\tau, s)] = \sum_k \int_{\Gamma_k(\tau)} e^{\frac{i}{v}s} C_j(\tau, s) ds, \quad (20)$$

отличающийся от вида (10). Здесь сумма берется по некоторому подмножеству⁵⁾ множества точек s_k особенностей подынтегрального выражения $C_j(\tau, s)$, и контур $\Gamma_k(\tau)$ является стандартным контуром, окружающим точку s_k . Сумма в правой части (20) может быть бесконечна, но должна содержать только конечное число точек носителя в полуплоскости $\text{Im } s < A$ для произвольного значения A .

Из проведенных выше рассмотрений ясно, что для того чтобы непосредственно вычислить число “вытянутых” контуров, необходимо знать глобальную структуру римановой поверхности подынтегрального выражения. Очевидно, что в общем случае это достаточно сложно.

Как мы видели выше (см. формулы (12) и (13)), каждая точка s_k особенности подынтегрального выражения (20) соответствует некоторому ВКБ-члену, который может быть включен (а может и не быть включен) в асимптотическое выражение построенного решения. Действительно, ВКБ-член (13) включается в асимптотическое разложение решения, если и только если соответствующая точка особенности подынтегрального выражения окружена некоторым контуром интегрирования в интегральном представлении этого решения, т.е. если эта точка соответствует одному из членов в правой

⁵⁾ Это подмножество называется *носителем* ресургентной функции. Понятие носителя ресургентной функции тесно связано с различными физическими и математическими понятиями; см., например, статью [11] о методе комплексных лучей.

части равенства (20). Мы будем называть точки особенностей, включенные в представление (20), *активными точками*, а все другие точки особенностей – *пассивными точками* для данного значения переменной τ . Из проведенных выше рассмотрений ясно, что свойство точки быть пассивной или активной может меняться в точности в тех точках τ , в которых одна точка особенности подынтегрального выражения (20) пересекает контур интегрирования, окружающий другую точку особенности. Для рассмотренного примера это может случиться только для таких значений τ , при которых вещественная часть действия $S_+(\tau)$ совпадает с вещественной частью $S_-(\tau)$, т.е. в случае, когда две решетки расположены на одной линии в комплексной области s . Множество таких точек называется *множеством Стокса* рассматриваемых функций. Множество Стокса разделяет всю комплексную область $\mathbf{C}_\tau$ на некоторое число областей, которые мы будем называть *областями Стокса*.

Наконец, существуют точки в комплексной плоскости $\mathbf{C}_\tau$, которые являются точками ветвления адиабатических потенциальных кривых (и, следовательно, точками ветвления функции действия). Такие точки называются *фокальными точками* ресургентной функции, и мы будем обозначать через $\mathcal{F}$ множество фокальных точек. Как мы увидим ниже, эти точки играют важную роль в исследовании асимптотических разложений рассматриваемых уравнений. В нашем примере имеются ровно две фокальные точки $\tau = \pm i$, в которых две решетки особенностей функций $C_1(\tau, s)$ и $C_2(\tau, s)$ совпадают друг с другом. Различие между множеством фокальных точек и множеством Стокса данной ресургентной функции состоит в том, что первое имеет *комплексную* коразмерность 1 в плоскости $\mathbf{C}_\tau$, в то время как второе является множеством *вещественной* коразмерности 1. Поэтому множество Стокса разделяет плоскость $\mathbf{C}_\tau$ на области Стокса, которые в отличие от множества фокальных точек не разделяют ничего.

Таким образом, для того чтобы дать полное описание явления Стокса, необходимо определить множество активных особых точек в каждой области Стокса.

ЗАМЕЧАНИЕ 2. Можно дать более явное описание явления Стокса, использующее понятие *микрофункции*. Для того чтобы прийти к этому понятию, мы заметим, что каждый интеграл в правой части равенства (20) не меняется при добавлении к подынтегральному выражению некоторой бесконечно продолжимой аналитической функции, которая является голоморфной в окрестности соответствующей точки s_k особенности. Таким образом, значение члена в представлении (20) зависит не от функций C_1 и C_2 , а от класса эквивалентности этих функций по модулю регулярных функций вблизи точки s_k . Такой класс эквивалентности называется (*бесконечно продолжимой*) *микрофункцией* с носителем, сосредоточенным в точке s_k , и фактически является не чем иным, как особой частью функций C_1 и C_2 в точке s_k . Пространство микрофункций, сосредоточенных в точке s_k , мы будем обозначать через $\mathcal{M}_{s_k}$.

Далее, как было видно выше, каждый член (экспоненциального) ВКБ-разложения решения соответствует в точности одному члену представления в правой части (20), т.е. в точности одной микрофункции, сосредоточенной в некоторой точке особенности функций C_1 и C_2 . Поэтому можно представить асимптотическое разложение функций, о которых идет речь, как, вообще говоря, бесконечные векторы

$$\begin{pmatrix} C_{1,s_1} \\ C_{1,s_2} \\ \dots \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} C_{2,s_1} \\ C_{2,s_2} \\ \dots \end{pmatrix}, \quad (21)$$

где C_{j,s_k} — некоторые элементы пространств $\mathcal{M}_{s_k}$ для некоторой точки s_k особенности функции $C_j(\tau, s)$. Мы обозначим через $\mathcal{M}$ пространство векторов (21), так что асимптотическое разложение решений может быть представлено как элемент из произведения $\mathcal{M} \times \mathcal{M}$.

Теперь замена асимптотического разложения в точках множества Стокса может быть интерпретирована как гомоморфизм

$$\tau: \mathcal{M} \times \mathcal{M} \rightarrow \mathcal{M} \times \mathcal{M},$$

который называется в ресургентном анализе *связывающим гомоморфизмом*.

Таким образом, вычисление явления Стокса есть в точности вычисление связывающего гомоморфизма Стокса в каждой точке множества Стокса.

Итак, для того чтобы вычислить асимптотическое разложение решения с экспоненциальной степенью точности, необходимо решить следующие две задачи:

- 1) вычислить ВКБ-разложения, отвечающие каждой точке особенности;
- 2) выбрать множество активных точек особенности для каждого значения τ .

Тогда асимптотическое разложение решения будет просто суммой ВКБ-разложений (или более точно результатом суммирования этих разложений, поскольку соответствующие асимптотические ряды расходятся), вычисленных в каждой активной точке для каждого значения τ .

Обе эти задачи могут быть решены с помощью комплексификации по переменной τ . Как уже было сказано выше, решение обеих этих задач сильно зависит от положения точек ветвления адиабатических потенциальных кривых или, другими словами, от фокальных точек конструируемого решения.

Опишем вычисления ВКБ-разложений. Для этого исследуем вначале поведение точек особенностей функций $C_1(\tau, s)$ и $C_2(\tau, s)$, когда τ пробегает путь l_1 в комплексной плоскости $\mathbf{C}_\tau$, показанный на рис. 5. Этот путь, начинающийся в точке $\tau = 0$, идет вдоль мнимой оси к точке $\tau = i$, обходит ее против часовой стрелки и возвращается в начало координат.

Рис. 5. Пути аналитического продолжения.

Когда переменная τ движется вдоль мнимой оси из начала координат в точку $\tau = i$, особые точки функции $C_j(\tau, s)$ будут двигаться вдоль траектории, показанной на рис. 6б. На рис. 6а и 6в отражены начальные и конечные стадии этого движения. Точки первой решетки показаны на рис. 6а крестами, в то время как точки второй – точками. В ситуации, изображенной на рис. 6в, эти две решетки совпадают друг с другом, поскольку $\tau = i$ является фокальной точкой. В самом деле,

$$S_+(i\theta) = -\frac{\theta^2}{2} + i \left[\frac{\theta}{2} \sqrt{1-\theta^2} + \frac{1}{2} \operatorname{arctg} \frac{\theta}{\sqrt{1-\theta^2}} \right],$$

$$S_-(i\theta) = -\frac{\theta^2}{2} + i \left[\frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2} \sqrt{1-\theta^2} - \frac{1}{2} \operatorname{arctg} \frac{\theta}{\sqrt{1-\theta^2}} \right],$$

и поэтому легко проверить, что действительная и мнимая части этих двух функций монотонны при $0 < \theta < 1$.

Рис. 6. Динамика резургентной структуры вдоль пути l_1 .

Далее, когда τ находится в точке a (см. рис. 5), т.е. $\theta = 1 - \varepsilon$ для некоторого малого положительного ε , две точки $S_+(i\theta)$ и $S_-(i\theta)$ являются близкими к точке $s = -1/2 + i\pi/4$. Когда переменная τ описывает малую петлю вокруг фокальной точки $\tau = i$, эти две точки поворачиваются на угол 3π и, следовательно, меняются местами в результате этого вращения. В самом деле,

$$S_{\pm}(i + \varepsilon e^{i\alpha}) = -\frac{1}{2} + \frac{i\pi}{4} \pm \frac{3\sqrt{2}i}{4} \varepsilon^{3/2} e^{\frac{3i\alpha}{2}} + O(\varepsilon^2),$$

и сделанное утверждение является прямым следствием последней формулы.

Наконец, если точка τ движется от значения $\tau = i(1 - \varepsilon)$ к началу координат, две рассмотренные точки будут двигаться обратно вдоль траекторий, показанных на рис. 6б, к

первоначальному положению. Таким образом, в результате обхода пути l_1 , показанного на рис. 5, точки A и B , показанные на рис. 6а, меняются местами (так же как и все другие пары точек, полученных из A и B сдвигом на $i\pi$).

Петля l_1 определяет элемент $\bar{l}_1$ фундаментальной группы $\pi_1(\mathbf{C}_\tau \setminus \mathcal{F})$ дополнения $\mathbf{C}_\tau \setminus \mathcal{F}$ множества фокальных точек $\mathcal{F}$ в плоскости $\mathbf{C}_\tau$. Как уже было показано, действие этого элемента на риманову поверхность решений C_1 и C_2 системы (11) переставляет точки особенности A и B . Следовательно, аналитическое продолжение этих функций, рассматриваемых в окрестности точки A вдоль пути l_1 , дает значения тех же функций в окрестности точки B . Поскольку соответствие между разложениями (12) и (13) является взаимно однозначным, можно утверждать, что ВКБ-элемент, отвечающий точке B , есть результат аналитического продолжения ВКБ-элемента, соответствующего точке A .

Действие элемента $\bar{l}_2$ фундаментальной группы $\pi_1(\mathbf{C}_\tau \setminus \mathcal{F})$, отвечающего пути l_2 , изображенного на рис. 5, может быть исследовано аналогичным образом. Этот элемент переставляет точки особенности A и C (см. рис. 6а), а не A и B .

Перейдем теперь к решению второй из перечисленных выше задач. Дело в том, что существует метод вычисления явления Стокса, основанный на так называемых *ресургентных уравнениях*. Этот метод использует тот факт, что решение $(c_1(\tau, v), c_2(\tau, v))$ системы (8) является целой функцией переменной τ , в то время как асимптотические ряды, представляющие ВКБ-элементы, ветвятся вокруг особых точек адиабатических потенциальных кривых. Поэтому вариация ВКБ-разложений, вызванная ветвлением действия $S(\tau)$ и амплитуды

$$a(\tau, v) = \sum_{j=0}^{\infty} v^j a_j(\tau),$$

должна сокращаться с дополнительными членами, появляющимися в асимптотическом разложении благодаря явлению Стокса. Можно выписать соответствующие соотношения и попытаться получить из них информацию об изменении асимптотических разложений. Эта программа может быть выполнена с помощью так называемых *сторонних производных*⁶⁾. К сожалению, изложение теории сторонних производных далеко выходит за рамки настоящей статьи. Читатель может найти подробное объяснение всей этой теории в [13, 8, 5]. Здесь мы упомянем только, что вычисление изменений в асимптотических разложениях при пересечении линии Стокса с помощью стороннего дифференциального исчисления возможно только в окрестности фокальной точки и лишь в том случае, если как точка, определяющая контур интегрирования, так и точка, пересекающая этот контур, совпадают друг с другом, когда τ приближается к этой фокальной точке. Поэтому возникает вопрос, как вычислить изменение асимптотического разложения, когда одна из точек пересекает контур интегрирования, определенный другой, если эти две точки находятся на некотором ненулевом расстоянии друг от друга. Такая ситуация, типичная для рассматриваемых задач, показана, например, на рис. 4б, где точка особенности A пересекает контур интегрирования вдали от его начала B .

Ответ на поставленный вопрос может быть получен с помощью аналитического продолжения вдоль путей l_1 и l_2 , изображенных на рис. 7 вместе с соответствующими линиями Стокса. Именно, вместо продолжения вдоль отрезка вещественной оси от точки $\tau = -\varepsilon$ до точки $\tau = \varepsilon$ для некоторого положительного ε (этот отрезок пересекает одну

⁶⁾ Впрочем, в ситуации “общего положения” можно обойтись и простыми алгебраическими средствами (см. [12]).

Рис. 7. Вычисление явления Стокса.

из линий Стокса) можно использовать продолжение вдоль пути l_1 , который пересекается со всеми рассматриваемыми линиями Стокса в окрестности фокальной точки $\tau = i$. Мы выбрали путь l_1 , поскольку, как это видно из рис. 6, две рассматриваемые точки A и B (см. рис. 4б) близки друг к другу в окрестности фокальной точки $\tau = i$.

Результат вычисления явления Стокса для рассматриваемого примера показан на рис. 4в. Из этого рисунка можно видеть, что все точки решетки, порожденные значениями $S_-(\tau)$ и лежащие над вещественной осью в комплексной плоскости $\mathbb{C}_s$, являются активными для $\tau > 0$, и поэтому все эти точки вносят нетривиальный вклад в асимптотическое разложение решения в этой области.

4. ФОРМУЛИРОВКА ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО АЛГОРИТМА

В предыдущем разделе мы выяснили, что асимптотическое разложение решения уравнения (8) для $\tau > 0$ (в частности, для больших вещественных значений τ) состоит из ВКБ-элемента, соответствующего адиабатической потенциальной кривой $E_+(\tau)$, и из всех аналитических продолжений этого элемента вдоль путей $l_1, l_1 l_2 l_1, l_1 l_2 l_1 l_2 l_1, \dots$, каждое из которых отвечает адиабатической потенциальной кривой $E_-(\tau)$.

Аналогично можно показать, что для общей задачи вида (6), (7) справедливо следующее утверждение.

УТВЕРЖДЕНИЕ. Асимптотическое разложение решения задачи (6), (7) для достаточно больших положительных значений переменной τ состоит из ВКБ-элемента, соответствующего адиабатической потенциальной кривой $E_{j_0}(\tau)$, и из всех продолжений этого элемента вдоль базисных петель фундаментальной группы

$$\pi_1(\mathbb{C}_\tau \setminus \mathcal{F}),$$

взятых с коэффициентами, определенными явлением Стокса.

Мы не будем приводить здесь доказательства сформулированного утверждения, поскольку оно более или менее аналогично рассуждениям, использованным при анализе рассмотренного примера. Читатель сможет сконструировать это доказательство самостоятельно.

В заключение мы заметим, что в точности те же самые вычисления приводят к асимптотическому исследованию явления *надбарьерного отражения* в квантовой механике (см., например, [14]). Более того, вычисления в простейшем случае квадратичного потенциала в точности совпадают с вышеприведенными вычислениями для двухуровневой модели Зинера.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований, грант № 95-01-01306а.

Список литературы

- [1] *Е. А. Соловьев*. УФН. 1989. Т. 157. № 3. С. 437–476.
- [2] *B. Sternin, V. Shatalov*. Collision problem in Atomic Physics and Resurgent Analysis. May, 1995. Preprint № NI 94047. Cambridge: Isaac Newton Inst. for Math. Sci., 1995.
- [3] *B. Sternin, V. Shatalov*. Theory of Atomic Collisions and Resurgent Analysis. Preprint MPI/95-68. Bonn: Max-Planck-Institut für Mathematik, 1995.
- [4] *M. Born, V. Fock*. Z. Phys. 1928. B. 51. S. 165–180.
- [5] *B. Sternin, V. Shatalov*. Borel-Laplace Transform and Asymptotic Theory. Boca Raton, Florida, USA: CRC-Press, 1996.
- [6] *L. D. Landau*. Phys. Z. der Sovjetunion. 1932. B. 1. S. 88–99.
- [7] *C. Zener*. Proc. R. Soc. A. 1932. V. 137. № 833. P. 696–702.
- [8] *B. Candelpergher, J. C. Nosmas, F. Pham*. Approche de la Résurgence. Paris: Hermann éditeurs des sciences et des arts, 1993.
- [9] *Б. Ю. Стернин, В. Е. Шаталов*. Матем. зам. 1991. Т. 49. № 6. С. 107–118.
- [10] *B. Sternin, V. Shatalov*. Differential Equations on Complex Manifolds. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1994.
- [11] *B. Sternin, V. Shatalov*. Complex Rays Method and Resurgent Analysis. Preprint № NI 94046. May, 1995. Cambridge: Isaac Newton Inst. for Math. Sci., 1995.
- [12] *B. Sternin, V. Shatalov*. Does One Need Resurgent Equations for Exact Semi-Classical Asymptotics? Preprint MPI/95-89. Bonn: Max-Planck-Institut für Mathematik, 1995.
- [13] *E. Delabaere*. Introduction to the Écale theory. In: Computer Algebra and Differential Equations. Ed. E. Tournier. № 193. London Mathematical Society, Lecture Note Series. Cambridge: Cambridge University Press, 1994. P. 59–102.
- [14] *Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц*. Квантовая механика (нерелятивистская теория). М.: Наука, 1989.

Поступила в редакцию 22.XII.1995 г.,
после доработки 25.XI.1996 г.

B. Yu. Sternin, V. E. Shatalov METHOD OF RESURGENT ANALYSIS IN THE ATOMIC COLLISION THEORY

A problem of atomic collisions is considered in the adiabatic approximation. It is shown that in this approximation transfer probabilities can be obtained by using resurgent analysis. A computation algorithm for finding the transfer probabilities as well as it's mathematical proof are presented. All considerations are performed by using a simple but representative example of the two-level Landau–Singer model.