

Распад метастабильного состояния

Побойко Игорь

20 мая 2017

На этом семинаре мы разберём ещё одну задачу квантовой механики, которая тоже решается при помощи инстантонов и которая тоже имеет туннельную природу. Речь идёт о задаче распада метастабильного состояния (см. семинар 8 прошлого семестра). Хотя технически эта задача очень похожа на задачу о туннельном расщеплении в двухъямном потенциале, в ней есть несколько крайне важных мест, которые стоит обсудить отдельно. Сама задача формулируется следующим образом. Частица массы $m = 1$ описывается следующим гамильтонианом:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\partial_x^2 + \lambda x^2(\eta - x) \quad (1)$$

В окрестности $x = 0$ имеется локальный минимум, а сам потенциал имеет вид осциллятора с частотой $\omega = \sqrt{2\lambda\eta}$. Если бы этот минимум был бы глобальным, то для низлежащих уровней имела бы серия стационарных связанных состояний $E_n = \omega(n + \frac{1}{2})$. Однако в нашей задаче никаких стационарных состояний нет, имеется только непрерывный спектр — поэтому если частицу поместить на один из этих осцилляторных уровней энергии, то рано или поздно частица протуннелирует через барьер (который мы считаем достаточно высоким, чтобы квазистационарное состояние было хорошо определённым). Как мы обсуждали ранее, такой процесс формально эквивалентен мнимой добавке к уровням энергии $E_n - i\frac{\Gamma_n}{2}$, так что обычная унитарная эволюция для таких состояний будет приводить к экспоненциальному затуханию вероятности со временем $\psi_n \propto e^{-i(E_n - i\Gamma_n/2)t} \Rightarrow |\psi_n|^2 \propto e^{-\Gamma_n t}$.

Давайте сперва формально повторим инстантонное вычисление, пропуская важные моменты — а в самом конце обсудим их.

Функциональный интеграл

Итак, мы хотим исследовать функцию Грина, дающую вероятность остаться в яме, $G(0, 0, t) = \langle 0 | e^{-i\hat{H}t} | 0 \rangle$. В мнимом времени $t = -i\beta$, в эту величину будет давать основной вклад основное состояние¹, и мы получим:

$$G_E(0, 0, \beta) \approx \sum_n |\langle 0 | n \rangle|^2 e^{-\beta E_n + i\beta \Gamma_n/2} \approx |\langle 0 | n = 0 \rangle|^2 e^{-\beta E_0 + i\beta \Gamma_0/2} \quad (2)$$

С другой стороны, для Евклидовой функции Грина можно записать следующий функциональный интеграл:

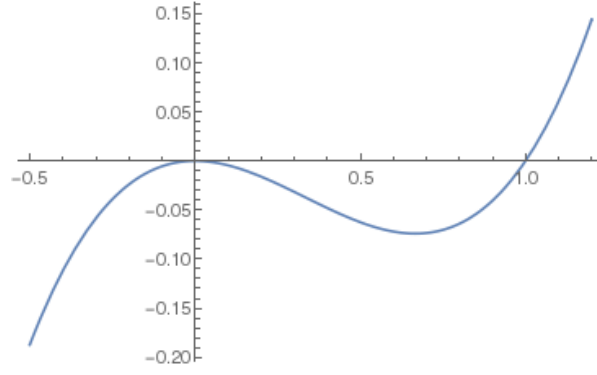
$$G_E(0, 0, \beta) = \int_{x(-\beta/2)=0}^{x(\beta/2)=0} \mathcal{D}x(\tau) e^{-S_E}, \quad S_E = \int_{-\beta/2}^{\beta/2} d\tau \left(\frac{1}{2}(\partial_\tau x)^2 + U(x) \right) \quad (3)$$

Как обычно, Евклидово действие представляет собой обычное действие, но в перевёрнутом потенциале², имеющим вид, изображённый на рисунке.

¹Это первый важный момент — ведь никакого основного состояния нет, мы имеем дело с квазистационарным состоянием — с точки зрения спектральных свойств гамильтониана, в задаче есть только непрерывный спектр.

²Второй существенный момент — потенциал $U(x)$ неограничен снизу, поэтому, вообще говоря, имеются траектории со сколь угодно большим отрицательным Евклидовым действием, которые дают сколь угодно большой вклад в этот функциональный интеграл. Будучи записанным так — он расходится! Исходный же интеграл, записанный в реальном времени, конечно, определён хорошо и никаких таких расхождений не содержит — траектории с бесконечно большим положительным как и отрицательным действием сильно осциллируют (из-за того, что вес имеет вид e^{iS}), и практически не дают вклад в функциональный интеграл.

Рис. 1: Перевернутый потенциал $-U(x)$. Оси в единицах η (Ox) и ω (Oy).



Инстантон

Следуя пройденному ранее пути, нам необходимо найти инстантон (в пределе $\beta \rightarrow \infty$) — седловую траекторию, дающую экстремум действия S_E . Как обычно, мы будем это делать, используя первый интеграл:

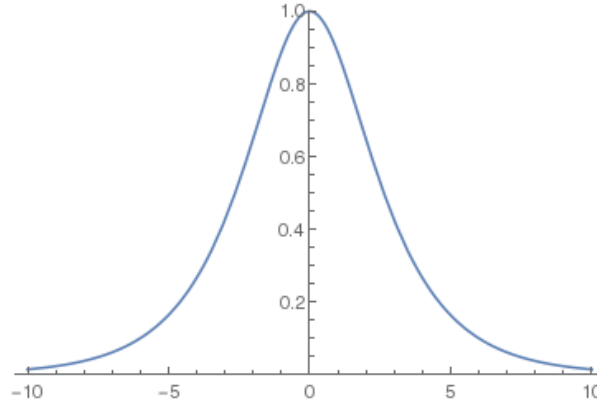
$$\partial_\tau^2 x = U'(x) = \lambda x(2\eta - 3x), \quad E = \frac{1}{2}(\partial_\tau x)^2 - U(x) = 0 \Rightarrow \partial_\tau x = \sqrt{2U(x)} \quad (4)$$

Имеются тривиальные траектории $x = 0$ (которая даст нам осцилляционные уровни энергии) и $x = \frac{2}{3}\eta$ (которая вообще является локальным максимумом и не интересна), а также нетривиальная траектория — инстантон:

$$\frac{dx}{\sqrt{2U(x)}} = d\tau \Rightarrow \boxed{x_{cl}(\tau) = \frac{\eta}{\cosh^2 \frac{\omega\tau}{2}}} \quad (5)$$

Эта траектория — «отскок» («bounce trajectory»), на ней частица «скатывается» с локального максимума $x = 0$ вправо, закатывается на точку остановки $x = \eta$, а затем скатывается обратно и опять закатывается на $x = 0$. Сама траектория изображена на рисунке:

Рис. 2: Инстантонная траектория $x_{cl}(\tau)$. Оси в единицах ω^{-1} (Ox) и η (Oy).



Как обычно, центр инстантона может быть выбран произвольным: $x_{cl}(\tau - \tau_c)$, $\tau_c \in (-\beta/2, \beta/2)$ — с чем, как обычно, будет связано наличие нулевой моды в этом функциональном интеграле. Действие на этом инстантоне считается тривиально, используя закон сохранения энергии:

$$S_0 = \int_{-\infty}^{\infty} (\partial_\tau x_{cl})^2 d\tau = 2\omega\eta^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sinh^2 z}{\cosh^6 z} dz = \frac{8}{15}\omega\eta^2 \gg 1 \quad (6)$$

Квадратичные флуктуации

Мы делаем разложение вблизи инстантона, и получаем $S_E[x_{cl}(\tau) + z(\tau)] \approx S_0 + S_2[z(\tau)]$ и

$$S_2[z(\tau)] \approx \frac{1}{2} \int z(\tau)(-\partial_\tau^2 + U''(x_{cl}(\tau)))z(\tau)d\tau \quad (7)$$

Как обычно, мы имеем дело с оператором типа «уравнения Шрёдингера» $\hat{L} = -\partial_\tau^2 + U''(x_{cl}(\tau))$. «Потенциальная энергия» этого уравнения следующая:

$$U''(x_{cl}(\tau)) = \omega^2 \left(1 - \frac{3}{\cosh^2 \frac{\omega\tau}{2}} \right) \quad (8)$$

Потенциал опять имеет вид Пешля-Теллера ($\sim \frac{1}{\cosh^2 x}$), поэтому для этой задачи опять можно найти аналитическое решение. Нам опять необходимо решать задачу поиска спектра оператора:

$$\hat{L}\psi_n(\tau) = \epsilon_n \psi_n(\tau) \quad (9)$$

У оператора имеется нулевая мода, связанная с произвольностью выбора центра инстантона, и она устроена аналогично:

$$\psi_1(\tau) = \frac{1}{\sqrt{S_0}} \frac{\partial x_{cl}}{\partial \tau} \quad (10)$$

Тут возникает третий важный момент, который отличается от рассматриваемого ранее двухъямного потенциала. Траектория $x_{cl}(\tau)$ имеет максимум, поэтому нулевая мода имеет *узел*. Она не может давать волновую функцию основного состояния — а только первого возбуждённого. Это означает, что основное состояние даёт *отрицательную моду* $\epsilon_0 = -|\epsilon_0| < 0$, и Гауссов интеграл по ней, устроенный как $\int d\epsilon_0 e^{\frac{1}{2}c_0^2|\epsilon_0-1|}$ — расходится! Тем не менее, давайте закроем глаза и на это, и воспользуемся стандартной формулой, говорящей, что этот интеграл равен $\sqrt{\frac{2\pi}{\epsilon_0}} = \pm i\sqrt{\frac{2\pi}{|\epsilon_0|}}$. Действительно, поскольку мы ожидаем наличие именно метастабильного состояния с комплексной энергией, мнимый вклад — это как раз то, что нам следует ожидать! (вещественный вклад означал бы лишь, что уровень энергии как-то изменился — и это не то, что нам интересно). Мистическим образом, поступая так, мы теряем двойку — и это четвёртый важный момент, который мы обсудим ниже.

Отщепляя интегрирование по нулевой моде, которое устроено точно так же и даёт $\sqrt{\frac{S_0}{2\pi}}\omega\beta$, и учитывая эту «потерянную» двойку, мы приходим к следующему ответу:

$$\frac{G_E(0, 0, \beta)}{G_0(0, 0, \beta)} = \pm i e^{-S_0} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{S_0}{2\pi}} \omega \beta \cdot \left(-\frac{\det'(-\partial_\tau^2 + U''(x_{cl}(\tau)))}{\det'(-\partial_\tau^2 + \omega^2)} \right)^{-1/2} \quad (11)$$

Отношение определителей проще сосчитать, используя метод Гельфанда-Яглома; оно оказывается равным

$$\frac{\det'(-\partial_\tau^2 + U''(x_{cl}(\tau)))}{\det'(-\partial_\tau^2 + \omega^2)} = -\frac{1}{60} \quad (12)$$

(как и следовало ожидать, из-за отрицательной моды определитель тоже отрицателен). Наконец, суммирование разреженного инстантонного газа также тривиально — количество траекторий-отскоков может быть произвольным $n = 0, 1, \dots$, и инстантонный газ даст попросту превратит найденное нами число (вклад с $n = 1$) в экспоненту от него же $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (\pm i\Gamma_0\beta/2)^n = \exp(\pm i\Gamma_0\beta/2)$. Собирая всё вместе, мы получаем следующий ответ:

$$\frac{G_E(0, 0, \beta)}{G_0(0, 0, \beta)} = \exp \left(\pm i e^{-S_0} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{30S_0}{\pi}} \omega \beta \right) \quad (13)$$

Сравнивая с ожидаемым ответом $\exp(i\Gamma_0\beta/2)$, мы понимаем, что необходимо выбрать знак «+» и ответ даётся:

$$\Gamma_0 = \omega \sqrt{\frac{30S_0}{\pi}} e^{-S_0} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \omega \cdot \sqrt{\omega\eta^2} e^{-8\omega\eta^2/15} \quad (14)$$

Обсуждение вопросов

Итак, к этому моменту у внимательного читателя могло накопиться порядочное количество вопросов, которые мы старались отмечать по ходу текста. Основной вопрос, конечно, можно сформулировать следующим образом: *как мы берём расходящийся (sic!) вещественный интеграл, и получаем конечный и мнимый (sic!) ответ?!*

Ответ кроется в процедуре аналитического продолжения. Исходный функциональный интеграл хорошо определён и является аналитической функцией на вещественной оси времени $t \in \mathbb{R}$. Мы строим его аналитическое продолжение в комплексную плоскость, и рассматриваем его на мнимой оси $t = -i\beta$. К сожалению, если буквально подставить мнимое время в функциональный интеграл, мы действительно получаем расходящийся интеграл — и это означает, что процедура такого аналитического продолжения устроена чуть сложнее; ниже мы обсудим, как именно.

С другой стороны, в мнимом времени инстантонная траектория — вещественная, что очень хорошо! Для взятия соответствующего интеграла мы можем пользоваться обычным *вещественным* методом перевала, для которого у нас имеется хорошо развитая интуиция. В терминах исходного интеграла — у него тоже, конечно, имеется седло, но оно *комплексное* — и значит, нам требуется комплексный метод перевала (для многомерного комплексного интеграла!). Более того, комплексных сёдел в действительности очень много, и задача определения тех, которые всё-таки дают вклад в интеграл —

нетривиальная задача³. Именно поэтому мы делаем Виковский поворот — он **значительно** упрощает нам жизнь. Цена, которую приходится заплатить за это упрощение — необходимость аналитического продолжения — в действительности невелика.

Процедура аналитического продолжения (формально) Формально такую процедуру можно устроить следующим образом. Рассмотрим функциональный интеграл как аналитическую функцию трёх параметров λ, η, t . При этом (λ, η, t) соответствует исходному функциональному интегралу, а $(\lambda, \eta, -i\beta)$ — Евклидовому, который мы считаем. Проследим, как меняется действие при вращении $t = |t|e^{-i\varphi}$:

$$iS[x(\tau), \lambda, \eta, |t|e^{-i\varphi}] = \int_{-\tau/2}^{\tau/2} d\tau \left(\frac{1}{2} e^{i\frac{\pi}{2} + i\varphi} (\partial_\tau x)^2 - e^{i\frac{\pi}{2} - i\varphi} \lambda x^2 (\eta - x) \right) \quad (15)$$

При сопровождающем вращении $\lambda = |\lambda|e^{i\varphi}$ интеграл будет оставаться сходящимся (т.к. траектории с большими $x(\tau)$ дают осциллирующий вклад), поэтому аналитическое продолжение $(\lambda, \eta, t) \rightarrow (|\lambda|e^{i\varphi}, \eta, |t|e^{-i\varphi})$ происходит тривиально, используя исходное выражение. При таком аналитическом продолжении при $\varphi = \frac{\pi}{2}$ мы получаем Евклидово действие (в мнимом времени), но с параметром $i\lambda$: $G_E(i\lambda, \eta, \beta)$. Нетривиальной остаётся процедура аналитического продолжения $\lambda \rightarrow -i\lambda$, потому что при буквально такой подстановке в интеграл он теряет свою сходимоссть. То, как устроено такое аналитическое продолжение, мы продемонстрируем на модельном (обычном) интеграле.

Модельный интеграл

Конечно, для функционального интеграла процедуру аналитического продолжения в явном виде предоставить достаточно тяжело — но ключевые её моменты (включая «мистическую двойку») можно ухватить на простом модельном одномерном интеграле. Рассмотрим следующий интеграл:

$$I(g) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \exp \left(-\frac{x^2}{2} + igx^3 \right) \quad (16)$$

Полученная функция аналитична при $g \in \mathbb{R}$ (аналог «вещественного времени»). С другой стороны, если мы попытаемся «наивно» её продолжить в $g \rightarrow \mp ig$ (аналог нашего «мнимого времени»), мы немедленно получим расходящийся интеграл, который даже внешне похож на наш: $I(\pm ig) \simeq \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp \left(-\frac{x^2}{2} \pm gx^3 \right)$. Тем не менее, процедуру аналитического продолжения можно построить достаточно просто. Заметим, что при комплексном $g = |g|e^{-i\varphi}$, интеграл сходится в комплексной плоскости в следующих секторах комплексной плоскости:

$$\text{Im}(gx^3) \geq 0 \leftrightarrow \begin{cases} \frac{\varphi}{3} & \leq \arg x \leq \frac{\pi}{3} + \frac{\varphi}{3} \\ \frac{2\pi}{3} + \frac{\varphi}{3} & \leq \arg x \leq \pi + \frac{\varphi}{3} \\ \frac{4\pi}{3} + \frac{\varphi}{3} & \leq \arg x \leq \frac{5\pi}{3} + \frac{\varphi}{3} \end{cases} \quad (17)$$

При $\varphi = 0$ наш интеграл $I(g)$ проходит по контуру, который лежит в первом секторе (вещественная ось). Поэтому если при уходе g в комплексную плоскость мы будем вращать соответствующим образом контур интеграла (чтобы он оставался в первой области), то полученный интеграл будет сходиться, а также будет являться аналитической функцией g . Тем самым, аналитическое продолжения интеграла $I(g)$ строится следующим образом:

$$I(g) = \int_C dx \exp \left(-\frac{x^2}{2} + igx^3 \right), \quad C = \left\{ \arg x \in \left[\frac{\varphi}{3}; \frac{\pi}{3} + \frac{\varphi}{3} \right] \right\}, \quad \varphi = -\arg g \in (-\pi, \pi) \quad (18)$$

(например, мы можем попросту вращать контур так, чтобы $\arg x = \frac{1}{3}\varphi$ — и интеграл всегда оставался осциллирующим).

Теперь можно приступить к исследованию асимптотик полученной аналитической функции при $g \ll 1$, для чего можно применить метод перевала. У интеграла имеются две седловых точки:

$$\varphi(x) = -\frac{x^2}{2} + igx^3, \quad \varphi'(x) = -x + 3igx^2 \Rightarrow \begin{cases} x_1 = 0 \\ x_2 = \frac{-i}{3g} \end{cases}, \quad \varphi(x) = \begin{cases} 0, & x = x_1 \\ \frac{1}{54g^2}, & x = x_2 \end{cases} \quad (19)$$

$$\varphi''(x) = -1 + 6igx = \begin{cases} -1, & x = x_1 \\ 1, & x = x_2 \end{cases} \quad (20)$$

1. Первая седловая точка $x = x_1$ — тривиальная, она является аналогом нашего тривиального «осцилляторного» седла — траектории $x_{cl} = 0$. Она всегда вещественная, и вклад от неё не зависит от g . Направление наискорейшего спуска

³ Даже в одномерном случае нужно чертить линии постоянной фазы, и т.п. — а их хоть можно нарисовать! В многомерном случае мы имеем дело с гиперповерхностями постоянной фазы в функциональном пространстве, и линии наискорейшего спуска принадлежат этим гиперповерхностям. Выбор, на какую из линий можно деформировать контур интегрирования — вообще говоря, очень сложная задача.

на ней соответствует действительной оси, и это седло всегда даёт вклад в интеграл. Сам вклад устроен следующим образом:

$$I_1(g) \approx \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2} dx = \sqrt{2\pi} \quad (21)$$

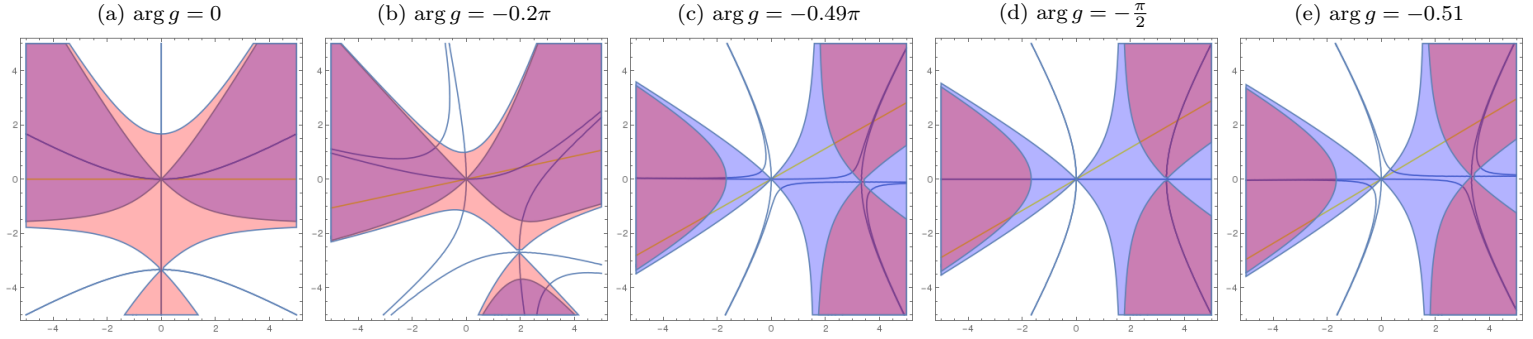
2. Вторая седловая точка — наш «инстантон». Для интеграла в «реальном времени» ($g \in \mathbb{R}$) она комплексна, и если бы мы не знали ничего о комплексных числах — мы бы её попросту упустили. Вторая производная в ней положительна — поэтому с точки зрения обычного Гауссова интегрирования, интеграл по ней расходился бы ($\sim \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{x^2}$) — впрочем, мы знаем, что в действительности это означает, что направление наискорейшего спуска на ней идёт параллельно мнимой оси. С учётом этого, вклад от второго седла оказывается следующим:

$$I_2(g) \approx \pm i \sqrt{2\pi} e^{1/54 g^2} \quad (22)$$

В «мнимом времени» $g = \pm i|g|$ седло становится вещественным $x_2 = \mp \frac{1}{3|g|}$, а вклад от него — экспоненциально мал $\propto \exp(-1/54|g|^2)$, а также он чисто мнимый (хотя, напомним, подынтегральное выражение выглядит чисто вещественным $\int_C e^{-x^2/2+gx^3} dx$). Так или иначе, аналогия тут практически полная.

Для того, чтобы понять, как устроен вклад этой седловой точки, можно проследить устройство топологии комплексной плоскости при вращении $g \rightarrow ge^{-i\pi/2}$ (смотри рисунки).

Рис. 3: Структура комплексной плоскости x при различных значениях $\arg g$ и при $|g| = 0.1$. Синие линии — линии постоянной фазы для обоих седловых точек. Жёлтая линия — исходный контур интегрирования. Голубая область — область $\operatorname{Re}\varphi(x) < \operatorname{Re}\varphi(x_1)$. Красная область — $\operatorname{Re}\varphi(x) < \operatorname{Re}\varphi(x_2)$.



Какой вывод стоит сделать из рисунка? При $\varphi < \frac{\pi}{2}$, вклад приходит только от тривиального седла и интеграл оценивается как

$$I(|g|e^{-i\varphi}) \approx I_1(g) \approx \sqrt{2\pi}, \quad 0 \leq \varphi < \frac{\pi}{2}, \quad (23)$$

в то время как при $\varphi > \frac{\pi}{2}$, вклад даёт также и второе седло (причём направление наискорейшего спуска $+\frac{\pi}{2}$, поэтому знак $\operatorname{Im}I(g) > 0$) и оценка получается следующей:

$$I(|g|e^{-i\varphi}) \approx I_1(g) + I_2(g) \approx \sqrt{2\pi}(1 + ie^{1/54g^2}), \quad \pi > \varphi > \frac{\pi}{2}. \quad (24)$$

В действительности мы тут имеем дело с явлением Стокса. У функции $I(g)$ мнимая ось (а именно она нас интересует!) — это линия Стокса, на которой появляется экспоненциально малый вклад $e^{-1/54|g|^2}$ на фоне «большого» вклада от основного седла. Обычно это означает, что на самой линии Стокса экспоненциально малый вклад плохо определён — ведь с «большим» вкладом $I_1(g)$ связан асимптотический ряд, погрешность которого больше экспоненциально малого вклада $I_2(g)$. Однако в данном случае (как и в функциональном интеграле) экспоненциально малый вклад выделить всё-таки возможно, потому что только он — мнимый (в этом смысле в $\operatorname{Im}I(g)$ мы сравниваем не $|I_2(g)|$ с $|I_1(g)|$, а с нулём — такое сравнение вполне законно).

Что же происходит на самой линии Стокса? Глядя на рисунок мы видим, что мы должны деформировать контур таким образом, что мы проходим по вещественной оси через первое седло, доходим до второго (но вдоль линии наискорейшего возрастания!); а затем на втором седле начинаем двигаться вдоль линии наискорейшего спуска, которая параллельна мнимой оси — тем самым, второе седло строго на линии Стокса даёт *половинный* вклад $\frac{1}{2}I_2(g)$:

$$\boxed{\operatorname{Im}I(-i|g|) \approx \frac{1}{2}I_2(g)} \quad (25)$$

Выводы Наш модельный интеграл оказался крайне полезным. На нём мы поняли смысл отрицательной моды, и законность нашего способа работы с ней, ровно как и происхождение множителя $\frac{1}{2}$. В функциональном интеграле мы также имеем дело с явлением Стокса (как аналитической функции амплитуды потенциала, или, что эквивалентно, туннельного действия) — асимптотический ряд, связанный с *ангармонизмом* осциллятора ($\frac{\omega}{2}$ — это лишь нулевой порядок!) имеет экспоненциально малую погрешность, которая сравнима с шириной уровня Γ . Последняя, тем не менее, хорошо определена, поскольку является чисто мнимой⁴ (на самом деле, точно такое же явление Стокса происходит и в задаче о туннельном расщеплении). Дальнейшее аналитическое продолжение $(\lambda, \eta, -i\beta) \rightarrow (\lambda, \eta, t)$ в конечном итоге сохранит эту $\frac{1}{2}$, поскольку мы всё время остаёмся на линии Стокса по переменной λ ; поэтому конечный ответ именно такой.

Метастабильные состояния Другой вопрос был связан с тем, как мы интерпретировали метастабильные состояния — в частности, раскладывались по ним, как будто они образуют базис. Разложение, конечно, правильно проводить по всем состояниям непрерывного спектра. Тем не менее, квазистационарные состояния проявляют себя как полюса амплитуды рассеяния — S -матрицы — расположенные вблизи вещественной оси. При вычислении различных интегралов по непрерывному спектру (ну, например — функции Грина) именно эти состояния будут давать наибольший (полюсной) вклад. Поэтому, хоть разложение буквально не запишется в нужном виде, но в действительности с хорошей точностью⁵ эта формула всё-таки работает:

$$G(0, 0, t) \simeq \sum_n |\langle 0|n \rangle|^2 e^{-iE_n t - \Gamma_n t/2}, \quad (26)$$

⁴Такая аналитическая связь между этими асимптотическими рядами имеет далеко идущие последствия, которые выходят за рамки курса.

⁵Конкретно, это зависит от времени t . А именно, экспоненциальный закон нарушается на самых маленьких временах $t \ll \frac{1}{E}$, а также на самых больших временах $t \gg \frac{1}{\Gamma} \ln \frac{E}{\Gamma}$. Обсуждение конкретных тонкостей, связанных с динамикой метастабильных состояний, а любопытного читателя мы порекомендуем дополнительную литературу (см., например, Базь, Гл. 6 «Квазистационарные состояния», §5 «Закон радиоактивного распада»).