Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Е. В. Выборный, Туннельное расщепление спектра и би-локализация собственных функций в несимметричной двойной яме, *ТМФ*, 2014, том 178, номер 1, 107–130

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf8531>

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: 3.82.47.9

26 апреля 2023 г., 09:59:58

© 2014 г.

Е. В. Выборный*

ТУННЕЛЬНОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ СПЕКТРА И БИЛОКАЛИЗАЦИЯ СОБСТВЕННЫХ ФУНКЦИЙ В НЕСИММЕТРИЧНОЙ ДВОЙНОЙ ЯМЕ

Рассматривается одномерное стационарное уравнение Шредингера с гладким потенциалом, имеющим вид двойной ямы. Получен критерий наличия двойной локализации волновых функций, экспоненциального расщепления энергетических уровней и туннельной транспортировки частицы в несимметричном потенциале. Получены асимптотические формулы для величины расщепления энергий, обобщающие известные формулы для случая зеркально-симметричного потенциала. Рассмотрен случай высоких энергетических уровней и случай энергий, близких к минимумам потенциала. Приведен пример туннельной транспортировки в несимметричной двойной яме. Кроме того, рассмотрена задача туннельного возмущения дискретного спектра оператора Шредингера с потенциалом с одной ямой. Экспоненциально малое возмущение энергий имеет место при локальных деформациях потенциала, сосредоточенных только в классически запрещенной области. Вычислен главный член асимптотики туннельного возмущения спектра.

Ключевые слова: туннелирование, квазипересечение энергетических уровней, одномерное уравнение Шредингера, квазиклассическое приближение.

DOI: 10.4213/tmf8531

1. ВВЕДЕНИЕ

Квантовое туннелирование представляет интерес для многих областей современной физики (см., например, монографии [1], [2]). Одной из базовых моделей туннелирования является одномерное движение в потенциальном поле, имеющем вид двойной ямы, в общем случае несимметричной. Задача об аналитическом изучении спектра и волновых функций в случае потенциала с двумя ямами имеет богатую историю: первые результаты, носящие качественный характер, содержались еще в работе 1927 года [3].

*Московский институт электроники и математики при Национальном исследовательском университете “Высшая школа экономики”, Москва, Россия.
E-mail: evgeniy.bora@gmail.com

Рис. 1

Мы рассматриваем квазиклассическую асимптотику волновых функций стационарного одномерного уравнения Шредингера

$$\left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\psi = E\psi, \quad 0 < \hbar \ll 1,$$

где $\hbar$ – малый параметр квазиклассического приближения.

Предполагается, что гладкий вещественный потенциал $V(x)$ имеет вид двойной ямы (см. рис. 1), т. е. классическая область движения частицы ($V(x) < E$) состоит из двух конечных интервалов. Между двумя ямами находится потенциальный барьер, и энергия E не близка к вершине потенциального барьера. Пусть спектр энергий вблизи E является дискретным. Известно, что в случае зеркально-симметричного потенциала этот спектр состоит из пар экспоненциально близких точек, а соответствующие собственные функции являются симметричными и антисимметричными [4]. Это приводит к эффекту туннельной транспортировки, когда частица, находящаяся в начальный момент в одной яме, через некоторый промежуток времени может быть обнаружена в другой яме с вероятностью, близкой к единице.

Аналог этого результата для симметричной ямы имеет место и в многомерном случае: известна асимптотика расщепления нижнего энергетического уровня [5].

В настоящей работе мы изучаем случай несимметричного потенциала $V(x)$. Такие потенциалы представляют интерес с физической точки зрения (см. [1], [6]). В несимметричном случае задача существенно усложняется. Однако численные расчеты по-прежнему демонстрируют существование двойной локализации собственных функций [1], [7], [8].

Рассматривая численно решенные примеры, мы замечаем, что вблизи энергии E спектр оператора с двухъямным потенциалом с некоторой точностью состоит из точек E_ℓ и E_r , соответствующих спектрам операторов Шредингера в левой и правой потенциальных ямах в отдельности. Пусть $\psi_{\ell,r}$ – волновые функции, локализованные в левой и правой потенциальных ямах соответственно. Если E_ℓ и E_r оказываются близкими, то в спектре оператора с двухъямным потенциалом присутствует пара близких точек, или, как говорят, происходит квазивыврождение энергетического уровня. В этом случае соответствующие собственные функции в первом приближении имеют вид линейных комбинаций функций ψ_ℓ и ψ_r .

Один из методов, при помощи которых можно найти величину расщепления и определить вид собственных функций в случае квазивырождения, основан на рассмотрении сужения оператора $\hat{H}$ на подпространство, образованное двумя векторами ψ_ℓ и ψ_r , и последующей диагонализации оператора $\hat{H}$. Этот метод, называемый *двухуровневая аппроксимация*, широко используется в задачах квантовой механики (см. ссылки в монографии [2]). В данном методе производится вычисление матричных элементов $\langle \hat{H}\psi_i, \psi_j \rangle$ для $i, j = \ell, r$; искомая величина расщепления находится как расстояние между собственными значениями данной матрицы, а ее собственные векторы дают приближение для коэффициентов линейного разложения собственных векторов оператора $\hat{H}$ по системе собственных функций $\psi_{\ell, r}$.

Поскольку подпространство, на которое происходит сужение, не является инвариантным, данный метод дает лишь приближенный результат, точность которого сильно зависит от того, насколько близко указанное подпространство к инвариантному, т. е. от выбора ψ_ℓ и ψ_r . Общее математическое обоснование метода содержится в работах [9], [10]. Этот метод в несколько переработанном виде изложен в приложении к настоящей статье вместе с другими полезными теоремами из теории линейных операторов. Различные вариации данного метода применялись к вычислению туннельного расщепления уровней энергии в несимметричном случае в работах [10]–[13].

В работах [10], [11] предлагается в качестве ψ_ℓ , E_ℓ выбирать решение уравнений Шредингера в окрестности Ω_ℓ левой ямы, которая не пересекается с правой ямой, и ставить условия Дирихле на границе области Ω_ℓ . Волновая функция ψ_r и энергия E_r выбираются аналогично. Показано, что при таком выборе можно получить достаточно точные выражения для энергий исходного уравнения в терминах решения задачи Дирихле для отдельных ям, если рассматривать достаточно большие окрестности Ω_i , $i = \ell, r$. Эти окрестности должны пересекаться и содержать “центр” потенциального барьера. Данным методом в работе [10] получена асимптотика расщепления пары нижних энергетических уровней в случае многомерного несимметричного потенциала (без явного выражения для амплитуды) в терминах энергий E_ℓ и E_r отдельных ям.

В настоящей работе показано, что такой выбор областей Ω_i является не только достаточным, но и необходимым условием применимости метода двухуровневой аппроксимации (см. разделы 6 и 7). Следовательно, как показано в разделе 7, выбор функций $\psi_{\ell, r}$, использованный в работе [13], приводит к неверному результату, поскольку области Ω_i выбраны непересекающимися. Одновременно мы отмечаем неточность работы [12], состоящую в том, что для определения центра несимметричного барьера использовалось обычное расстояние на прямой. На самом деле центр потенциального барьера необходимо определять с точки зрения действия по инстантону¹⁾.

Кроме вычисления расщепления уровней энергии, метод двухуровневой аппроксимации позволяет определить коэффициенты приближенного разложения собственных функций оператора $\hat{H}$ по функциям ψ_ℓ и ψ_r . Поскольку собственные функции определены с точностью до нормирующего множителя и ортогональны, достаточно знать асимптотику вероятностей $P_\ell(\hbar)$ и $P_r(\hbar)$ обнаружить частицу в левой и правой ямах для одной из пары собственных функций. Волновая функция называется биллокализованной, если обе вероятности $P_i(\hbar)$ существенно отличны от

¹⁾Или в смысле метрики Агмона [10], [14], [15].

нуля при достаточно малых $\hbar$, т. е. $P_i(\hbar) = p_i + O(\hbar)$ и $p_i > 0$. Несложно показать, что если одна собственная функция билокализована, то билокализована и вторая. Эффект билокализации собственных функций тесно связан с величиной туннельного расщепления уровней энергии.

В работе [16] для двух нижних энергетических уровней в многомерном потенциале доказано, что если обе вероятности $P_{\ell,r}(\hbar)$ имеют положительный нижний предел при $\hbar \rightarrow 0$, то для величины расщепления Δ справедлива оценка $\Delta = O(e^{-S/\hbar})$. В работе [10] эта оценка уточнена в случае пары нижних энергетических уровней.

Основной результат настоящей работы состоит в доказательстве критерия двойной локализации собственных функций (теорема 1), демонстрирующего связь амплитуды величины расщепления уровней энергии и вероятностей p_ℓ и p_r . В теореме также доказана связь с формулой для расщепления уровней энергии в терминах решения спектральной задачи для правой и левой ямы по отдельности (формула в духе работы [10]). Соответствующие формулы для расщепления имеют вид

$$\Delta = \frac{\delta}{2\sqrt{p_\ell p_r}}(1 + O(\hbar)),$$

$$\Delta = \sqrt{(E_r - E_\ell)^2 + \delta^2}(1 + O(\hbar));$$

здесь

$$\delta = 2\hbar^2 \left(\psi_\ell \frac{d\psi_r}{dx} - \psi_r \frac{d\psi_\ell}{dx} \right)_{x=c},$$

где c – центр потенциального барьера с точки зрения инстантонного действия.

Для высоких энергетических уровней (см. раздел 2) получена следующая асимптотическая формула для δ :

$$\delta = \hbar \frac{\sqrt{\omega_\ell \omega_r}}{\pi} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_\ell}^{x_r} |p| dx \right) (1 + O(\hbar)).$$

В случае низких энергетических уровней формула для δ приведена в разделе 3.

Для высоких энергетических уровней полученный результат согласуется с результатом, приведенным в книге [4], при наличии симметрии потенциала; в случае отсутствия симметрии полученный нами результат является обобщением этого результата.

Для низких энергетических уровней амплитуда расщепления может быть выражена в терминах решения системы в вариациях для инстантона (см. раздел 3). Подобный метод применялся в работе [17] для пары нижних энергий оператора Шредингера с многомерным симметричным потенциалом.

В разделе 6 рассмотрена задача о туннельном возмущении дискретного спектра оператора Шредингера с потенциалом, имеющим вид одной ямы. Задача состоит в оценке возмущения энергии E_0 оператора Шредингера с потенциалом $V(x)$ при добавлении к нему функции $f(x)$, локализованной только в классически запрещенной зоне. При этом малость $f(x)$ не предполагается. Получена формула для главного члена асимптотики туннельного возмущения:

$$E - E_0 = \langle f(x) \psi_0, \psi_0 \rangle (1 + o(1)),$$

где ψ_0 – волновая функция, соответствующая энергии E_0 .

В разделе 6 доказано, что задача о туннельном возмущении спектра одноямного потенциала эквивалентна задаче о деформации одной стороны потенциального барьера двухъямного потенциала. При такой деформации, где носитель $f(x)$ лежит между центром потенциального барьера и точкой поворота, происходит разрушение двойной локализации собственных функций, и для расщепления справедлива формула

$$\Delta = \langle f(x)\psi_i, \psi_i \rangle (1 + o(1)),$$

где $i = \ell$ или $i = r$ при деформации левой или правой стороны барьера.

В работе [18] рассматривалась задача о деформации одной стороны потенциального барьера симметричного двухъямного потенциала для пары нижних энергетических уровней. Было показано, что подобная деформация приводит к разрушению двойной локализации собственных функций, а для величины расщепления справедлива оценка

$$\Delta = \exp\left(-\frac{2S + o(1)}{\hbar}\right),$$

где S – действие по инстантону между точкой поворота и носителем функции $f(x)$. Многомерное обобщение данного результата дано в работе [15].

Из нашей формулы легко следуют оценки, приведенные в работе [18]. Полученная формула позволяет вычислить не только логарифмический предел, но и величину амплитуды расщепления для любой заданной функции $f(x)$.

2. ВЕЛИЧИНА РАСЩЕПЛЕНИЯ И АМПЛИТУДА ТУННЕЛИРОВАНИЯ

В этом разделе мы рассмотрим случай высоких энергетических уровней. Предположим, что энергия E больше, чем минимумы двухъямного потенциала, и меньше, чем вершина потенциального барьера. Наличие в потенциале двух ям означает, что уравнение $V(x) = E$ имеет четыре простых корня – точки поворота, и $V(x) > E + e$ при достаточно больших x и некотором $e > 0$.

Пусть между точками поворота x_ℓ и x_r находится потенциальный барьер, т. е. $V(x) > E$ при $x_\ell < x < x_r$. Определим точку c из равенства

$$\int_{x_\ell}^c |p(x)| dx = \int_c^{x_r} |p(x)| dx,$$

где $p(x) = \sqrt{E - V(x)}$. Точка c является центром потенциального барьера с точки зрения инстантонного действия. Пусть точки a и b выбраны так, что

$$x_\ell < a < c < b < x_r.$$

Введем два гладких потенциала $V_{\ell,r}$ (см. рис. 2), удовлетворяющих следующим двум условиям:

$$V_\ell(x) \equiv V(x) \quad \text{при} \quad x \leq b, \quad V_r(x) \equiv V(x) \quad \text{при} \quad x \geq a$$

и

$$V_\ell(x) > E + e \quad \text{при} \quad x \geq b, \quad V_r(x) > E + e \quad \text{при} \quad x \leq a$$

для некоторого $e > 0$.

Рис. 2

Определим операторы Шредингера с потенциалами $V_{\ell, r}$:

$$\hat{H}_i = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} + V_i(x), \quad i = \ell, r.$$

Потенциалы $V_{\ell, r}$ являются одноямыми для энергии E , поскольку классическая область движения частицы в каждом из потенциалов $V_{\ell, r}(x)$ представляет собой один интервал. Следовательно, для спектров операторов $\hat{H}_i$ справедливы хорошо известные результаты квазиклассического анализа [4], [19], перечисленные ниже.

I. Вблизи энергии E спектр оператора $\hat{H}_i$ является дискретным и невырожденным. Расстояние между соседними точками спектра имеет порядок $\hbar$.

II. Пусть значение E_i принадлежит спектру оператора $\hat{H}_i$, $i = \ell, r$, и близко к E . Пусть ψ_i – соответствующая нормированная собственная функция. Тогда равномерно по $x \in [a, b]$ справедливы асимптотические формулы

$$\begin{aligned} \psi_\ell(x) &= \frac{C_\ell}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_\ell}^x |p| dx\right) (1 + O(\hbar)), \\ \psi_r(x) &= \frac{C_r}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_r} |p| dx\right) (1 + O(\hbar)), \end{aligned}$$

причем эту асимптотику можно дифференцировать.

III. Константы нормировки $C_{\ell, r}$ можно выбрать следующим образом:

$$C_i = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\omega_i}{\pi}}, \quad i = \ell, r,$$

где ω_i – классическая частота колебаний в потенциальной яме $V_i(x)$ для энергии E .

Результаты I и II носят общий характер и справедливы для произвольного однояменного потенциала, а утверждение III справедливо в случае высоких энергетических уровней.

Операторы $\hat{H}_{\ell, r}$ фактически описывают левую и правую потенциальные ямы исходного оператора $\hat{H}$. Несложно показать (см. ниже доказательство теоремы 1), что спектр оператора $\hat{H}$ вблизи E можно получить с экспоненциальной точностью

при объединении спектров операторов $\hat{H}_\ell$ и $\hat{H}_r$. При таком объединении может возникнуть эффект квазивырождения энергетического уровня, когда энергия E_ℓ экспоненциально близка к энергии E_r . Если квазивырождения не происходит, то в качестве приближенной собственной функции оператора $\hat{H}$ можно взять функцию ψ_ℓ или ψ_r . В случае квазивырождения энергетических уровней в спектре оператора $\hat{H}$ присутствует пара экспоненциально близких точек спектра, а собственные функции приближенно имеют вид линейных комбинаций функций ψ_ℓ и ψ_r .

Пусть ψ – собственная функция оператора $\hat{H}$. Вероятности $P_{\ell,r}(\hbar)$ обнаружить частицу в левой и правой потенциальных ямах могут быть посчитаны как интегралы от $|\psi(x)|^2$ при $x < c$ для левой ямы и при $x > c$ для правой ямы. Из условия нормированности волновых функций получаем

$$P_\ell(\hbar) + P_r(\hbar) = 1.$$

Следовательно, в качестве величины, которая показывает, где сосредоточена волновая функция, можно взять отношение вероятностей $P_r(\hbar)/P_\ell(\hbar)$.

Будем говорить, что волновая функция ψ имеет двойную локализацию, если существует число $\mu > 0$ такое, что

$$\frac{P_r(\hbar)}{P_\ell(\hbar)} = \mu^2 + O(\hbar).$$

Тогда вероятности $P_{\ell,r}(\hbar)$ обнаружить частицу как в левой, так и в правой потенциальной ямах существенно отличны от нуля, и для них справедливы асимптотические формулы

$$\begin{aligned} P_\ell(\hbar) &= p_\ell(1 + O(\hbar)) = \frac{1}{1 + \mu^2}(1 + O(\hbar)), \\ P_r(\hbar) &= p_r(1 + O(\hbar)) = \frac{\mu^2}{1 + \mu^2}(1 + O(\hbar)). \end{aligned}$$

От значения величины μ во многом зависит динамика частицы в потенциале с двумя ямами, как будет показано ниже в разделе 4.

Положим

$$\delta(\hbar) = 4\hbar C_\ell C_r \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_\ell}^{x_r} |p| dx\right).$$

Величина $\delta(\hbar)$ является характерным масштабом экспоненциальной малости для туннельных эффектов в двухъямном потенциале.

В следующей теореме сформулирован критерий резонансного туннелирования и установлена связь между расщеплением энергетических уровней Δ , амплитудой туннелирования μ и расстоянием между E_ℓ и E_r .

ТЕОРЕМА 1. *Для фиксированного неотрицательного числа λ следующие три условия эквивалентны:*

1. *Вблизи энергии E у оператора $\hat{H}$ существует билокализованная собственная функция, и для амплитуды туннелирования справедлива формула*

$$\mu = \sqrt{1 + \lambda^2} \pm \lambda.$$

2. Вблизи энергии E в спектре оператора $\hat{H}$ существует пара экспоненциально близких точек, расстояние между которыми задается асимптотической формулой

$$\Delta = \sqrt{1 + \lambda^2 \delta(\hbar)} (1 + O(\hbar)).$$

3. Для расстояния между точками E_i верна асимптотическая формула

$$|E_r - E_\ell| = \delta(\hbar) (\lambda + O(\hbar)).$$

Перед доказательством теоремы приведем ряд замечаний.

Данная теорема обобщает результаты симметричного случая. Очевидно, в случае симметричного потенциала выполнены все три условия и $\lambda = 0$. В этом случае для расщепления справедлива асимптотическая формула Ландау–Лифшица

$$\Delta = \frac{\omega \hbar}{\pi} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_\ell}^{x_r} |p| dx \right) (1 + O(\hbar)).$$

В общем случае число λ , как и μ , количественно характеризует двойную локализацию собственных функций. Число λ однозначно выражается через μ , поскольку в формуле из условия 1 знак плюс берется, если $\mu > 1$, а знак минус берется, если $\mu < 1$. Для каждого фиксированного λ существуют два значения $\mu = \mu_{1,2}$, при этом $\mu_1 = \mu_2^{-1}$. Два разных значения μ отвечают паре собственных функций, соответствующих паре близких собственных значений оператора $\hat{H}$. Следовательно, из существования одной билокализованной собственной функции с $\mu = \mu_1$ следует наличие второй собственной функции с обратным показателем $\mu = \mu_2 = \mu_1^{-1}$. Если одна собственная функция больше локализована в левой яме ($\mu_1 < 1$), то другая больше локализована в правой ($\mu_2 > 1$), и наоборот.

Если $\lambda = 0$, то $\mu = 1$, и имеет место туннельная транспортировка (см. раздел 4). При $\lambda = 0$ для величины расщепления справедлива асимптотическая формула

$$\Delta = \hbar \frac{\sqrt{\omega_\ell \omega_r}}{\pi} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_\ell}^{x_r} |p| dx \right) (1 + O(\hbar)).$$

При произвольном значении $\lambda \geq 0$ величина $\delta(\hbar)$ может быть вычислена по формуле

$$\delta(\hbar) = 2\hbar^2 \left[\psi_\ell \frac{d\psi_r}{dx} - \psi_r \frac{d\psi_\ell}{dx} \right]_{x=c},$$

это напрямую следует из определения величины δ и асимптотики функций $\psi_{\ell,r}(x)$.

Исключая константу λ из условий 1 и 2 теоремы 1, можно найти уравнение связи между расщеплением энергетических уровней Δ и амплитудой туннелирования μ :

$$\Delta = \frac{1}{2} \left(\mu + \frac{1}{\mu} \right) \delta(\hbar) (1 + O(\hbar)).$$

Выражая μ через $p_{\ell,r}$ и подставляя выражение для $\delta(\hbar)$, получаем

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{\delta(\hbar)}{2\sqrt{p_\ell p_r}} (1 + O(\hbar)), \\ \Delta &= \frac{\hbar}{2\pi} \sqrt{\frac{\omega_\ell \omega_r}{p_\ell p_r}} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_\ell}^{x_r} |p| dx \right) (1 + O(\hbar)). \end{aligned}$$

Величина $\mu + \mu^{-1} = (p_\ell p_r)^{-1/2}$ не зависит от того, для какой из двух собственных функций она вычислена.

Из последних формул хорошо видно, как с ростом расщепления Δ быстро исчезает двойная локализация собственных функций, т.е. одна из вероятностей $p_{\ell,r}$ стремится к нулю. Минимальное расщепление $\Delta \approx \delta(\hbar)$ соответствует максимальной билокализации $p_\ell = p_r = 1/2$ и наоборот.

Также отметим, что теорему 1 можно применять для анализа туннелирования и в случае, когда потенциал зависит от $\hbar$. Тогда необходимо пересчитывать величину $\delta(\hbar)$. Такая зависимость может возникнуть неявно при зависимости потенциала от внешнего параметра.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ТЕОРЕМЫ 1. Пусть a', b' не зависят от $\hbar$ и

$$x_\ell < a < a' < c < b' < b < x_r.$$

Определим две гладкие срезающие функции $\sigma_{\ell,r}(x)$ так, что справедливы условия

$$\sigma_\ell(x) \equiv \begin{cases} 1, & x \leq b', \\ 0, & x \geq b, \end{cases} \quad \sigma_r(x) \equiv \begin{cases} 1, & x \geq a', \\ 0, & x \leq a. \end{cases}$$

Тогда пересечение носителей функций $\sigma_{\ell,r}$ вложено в $[a, b]$ и заведомо содержит отрезок $[a', b']$, а следовательно, и точку c . Из определения $V_{\ell,r}$ следует, что

$$\sigma_i(x)[V(x) - V_i(x)] \equiv 0, \quad \sigma_i(x)[\hat{H} - \hat{H}_i] = 0, \quad i = \ell, r,$$

где во втором равенстве $\sigma_i(x)$ понимается как оператор умножения на функцию.

Для начала докажем, что справедливость любого из трех условий теоремы влечет наличие квазивырождения, т.е. существование энергий E_i в спектре оператора $\hat{H}_i$, $i = \ell, r$, таких, что расстояние между ними экспоненциально мало.

Пусть справедливо условие 1 и ψ – соответствующая собственная функция оператора $\hat{H}$, а E – собственное значение. Пусть

$$u_i = \frac{\sigma_i \psi}{\sqrt{p_i}}, \quad i = \ell, r.$$

Тогда

$$\|u_\ell\|^2 = \frac{1}{p_\ell} \int_{-\infty}^b |\sigma_\ell \psi|^2 dx = 1 + \frac{1}{p_\ell} \int_c^b |\sigma_\ell \psi|^2 dx \approx 1,$$

поскольку интеграл по отрезку $[c, b]$ экспоненциально мал. Аналогично имеем

$$\|u_r\| \approx 1.$$

Покажем, что u_i являются квазимодами для операторов $\hat{H}_i$ с экспоненциальной точностью. Меняя порядок операторов дифференцирования и умножения на функцию $\sigma_i(x)$, легко получить выражение для невязки:

$$(\hat{H}_i - E)u_i = \frac{-\hbar^2}{\sqrt{p_i}} \left(\sigma_i'' + 2\sigma_i' \frac{d}{dx} \right) \psi.$$

Поскольку носители функций $\sigma'_i(x)$ и $\sigma''_i(x)$ вложены в отрезок $[a, b]$, на котором функция $\psi(x)$ и ее производная экспоненциально малы, получаем, что u_i являются квазимодами для $\hat{H}_i$ с экспоненциальной точностью. Таким образом, доказано, что из условия 1 следует квазивырождение спектра.

Пусть справедливо условие 2, существуют экспоненциально расщепленные собственные значения $E_{1,2}$ оператора $\hat{H}$, а $\psi_{1,2}$ – соответствующие собственные функции. Можно считать, что функции $\psi_{1,2}$ не являются билокализованными, иначе было бы справедливо условие 1, из которого следует квазивырождение. Функции $\psi_{1,2}$ не могут быть локализованы в одной яме, поскольку это противоречит их ортогональности. Пусть для определенности ψ_1 локализована в левой яме, а ψ_2 – в правой яме. Тогда вместо $\psi_{1,2}$ и $E_{1,2}$ будем писать $\psi_{\ell, \Gamma}$ и $E_{\ell, \Gamma}$.

Пусть $u_i = \sigma_i \psi_i$. Тогда u_i являются квазимодами для $\hat{H}_i$ с экспоненциальной точностью:

$$\|u_i\| \approx 1, \quad (\hat{H}_i - E_i)u_i = -\hbar^2 \left(\sigma''_i + 2\sigma'_i \frac{d}{dx} \right) \psi_i.$$

Получаем, что квазивырождение следует из условия 2.

Пусть справедливо условие 3. Тогда квазивырождение, очевидно, имеет место, поскольку величина $\delta(\hbar)$ экспоненциально мала.

Мы доказали, что справедливость любого из трех условий теоремы влечет наличие квазивырождения. Предположим, что для некоторого λ справедливо хотя бы одно из условий данной теоремы, следовательно, квазивырождение имеет место. Пусть E_i – собственные значения оператора $\hat{H}_i$, а ψ_i – соответствующие собственные функции, $i = \ell, \Gamma$. Следовательно, величина $|E_\Gamma - E_\ell|$ экспоненциально мала.

Введем ортонормированные функции

$$u_\ell(x) = \gamma_1 \sigma_\ell(x) \psi_\ell(x), \quad u_\Gamma(x) = \gamma_2 (\sigma_\Gamma(x) \psi_\Gamma(x) + \gamma_3 \sigma_\ell(x) \psi_\ell(x)), \\ \langle u_i, u_j \rangle = \delta_{ij}, \quad i, j = \ell, \Gamma.$$

Учитывая нормированность функций $\psi_i(x)$, $i = \ell, \Gamma$, получаем

$$\gamma_{1,2} = 1 + O(\hbar).$$

Из условия ортогональности функций u_1 и u_2 имеем

$$0 = \langle u_\ell, u_\Gamma \rangle = \gamma_1 \gamma_2 \int_a^b \sigma_\ell \sigma_\Gamma \psi_\ell \psi_\Gamma dx + \gamma_2 \gamma_3 \gamma_1^{-1}, \quad \gamma_3 = O(\delta(\hbar)).$$

Покажем, что u_i являются квазимодами для оператора $\hat{H}$, вычислив асимптотику невязки:

$$(\hat{H} - E_\ell)u_\ell = \left[-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}, \sigma_\ell(x) \right] \gamma_1 \psi_\ell(x) + \sigma_\ell(x) \gamma_1 (\hat{H}_\ell - E_\ell) \psi_\ell(x) = \\ = \hbar \sigma'_\ell(x) 2C_\ell \sqrt{|p|} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_\ell}^x |p| dx \right) (1 + O(\hbar)), \\ (\hat{H} - E_\Gamma)u_\Gamma = -\hbar \sigma'_\Gamma(x) 2C_\Gamma \sqrt{|p|} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_\Gamma} |p| dx \right) (1 + O(\hbar)).$$

Введем обозначение

$$\varepsilon = \max \left[C_\ell \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_\ell}^{b'} |p| dx \right), C_r \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{a'}^{x_r} |p| dx \right) \right].$$

Величина ε является экспоненциально малой и при этом ε^2 экспоненциально меньше, чем $\delta(\hbar)$. Получаем оценки

$$\|(\hat{H} - E_i)u_i\| = O(\varepsilon), \quad i = \ell, r.$$

Следовательно, u_ℓ и u_r действительно являются квазимодами.

Теперь предположим, что

$$|E_r - E_\ell| = O(\varepsilon).$$

Тогда можно воспользоваться теоремой 6 (см. приложение). Ниже будет показано, что если последнее равенство несправедливо, то все три условия теоремы не выполняются.

Введем обозначение $L(\hbar) = (E_r - E_\ell)/\delta$. Величина L введена, как в условии 3 доказываемой теоремы, но выполнение этого условия (существование предела $L(\hbar)$ при $\hbar \rightarrow 0$) не предполагается. Пусть $E = (E_\ell + E_r)/2$. Следовательно, имеет место оценка

$$\|(\hat{H} - E)u_i\| \leq \|(\hat{H} - E_i)u_i\| + \frac{|E_r - E_\ell|}{2} \|u_i\| = O(\varepsilon), \quad i = \ell, r.$$

Таким образом, выполнены все условия теоремы 6. Вычислим матричные элементы $m_{i,j} = \langle (\hat{H} - E)u_i, u_j \rangle$, $i, j = \ell, r$:

$$\begin{aligned} m_{\ell,\ell} &= \frac{E_\ell - E_r}{2} + O(\varepsilon^2), & m_{r,r} &= \frac{E_r - E_\ell}{2} + O(\varepsilon^2), \\ m_{\ell,r} &= 2\hbar C_\ell C_r \int_{b'}^b \sigma'_\ell(x) \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_\ell}^{x_r} |p| dx \right) (1 + O(\hbar)) dx = -\frac{\delta}{2} (1 + O(\hbar)). \end{aligned}$$

Таким образом,

$$m = \frac{\delta}{2} \begin{pmatrix} -L & -1 \\ -1 & L \end{pmatrix} (1 + O(\hbar)) + O(\varepsilon^2).$$

Собственные значения матрицы m равны

$$\mu_{1,2} = \pm \frac{\delta}{2} \sqrt{1 + L^2}.$$

Соответствующие собственные векторы имеют вид

$$\begin{pmatrix} -1 \\ L + \sqrt{1 + L^2} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} L + \sqrt{1 + L^2} \\ 1 \end{pmatrix},$$

где множитель $1 + O(\hbar)$ опущен для наглядности. Определим величины

$$\begin{aligned} \tilde{E}_1 &= E + \mu_1 = \frac{E_r + E_\ell}{2} + \frac{\delta}{2} \sqrt{1 + L^2}, \\ \tilde{E}_2 &= E + \mu_2 = \frac{E_r + E_\ell}{2} - \frac{\delta}{2} \sqrt{1 + L^2}. \end{aligned}$$

По теореме 6 для энергий $\tilde{E}_i$ можно построить квазимоды $\tilde{u}_i$, для которых

$$\|(\hat{H} - \tilde{E}_i)\tilde{u}_i\| = O\left(\frac{\varepsilon^2}{\hbar}\right).$$

С точностью до нормировки их главные члены равны

$$v_1 = -u_\ell + (L + \sqrt{1 + L^2})u_r, \quad v_2 = (L + \sqrt{1 + L^2})u_\ell + u_r.$$

Таким образом, в $O(\varepsilon^2/\hbar)$ -окрестностях энергий $\tilde{E}_1$ и $\tilde{E}_2$ имеется по одной точке спектра оператора $\hat{H}$. Расстояние между этими точками можно оценить как

$$\Delta = \sqrt{1 + L^2} \delta(1 + O(\hbar)) + O\left(\frac{\varepsilon^2}{\hbar}\right) = \sqrt{1 + L^2} \delta(1 + O(\hbar)).$$

Величину $O(\varepsilon^2/\hbar)$ можно отбросить, так как отношение ε^2/δ экспоненциально мало. Малость ε^2/δ обеспечивается выбором точки s .

Из теоремы 5 (см. приложение) следует, что для собственной функции ϕ_i оператора $\hat{H}$, соответствующей точке спектра, близкой к $\tilde{E}_i$, справедлива асимптотическая формула

$$\phi_i = v_i(x) + O(\hbar^\infty).$$

Следовательно, ϕ_i являются билокализованными, только если существует число λ такое, что

$$L(\hbar) = \lambda + O(\hbar).$$

Тогда величина μ для ϕ_1 записывается как

$$\mu = \sqrt{1 + \lambda^2} - \lambda,$$

а для ϕ_2 мы имеем

$$\mu = \sqrt{1 + \lambda^2} + \lambda.$$

Полученные результаты справедливы в предположении, что выполнено одно из условий теоремы и $|E_r - E_\ell| = O(\varepsilon)$. Для доказательства эквивалентности всех трех условий покажем, что из условия 3 следуют условия 1 и 2 и обратно.

Пусть выполнено условие 3, т. е. $L(\hbar) = \lambda + O(\hbar)$. Из полученных формул для μ и Δ следует справедливость условий 1 и 2.

Пусть выполнено условие 1 с некоторым λ . Поскольку λ однозначно определяется числом μ (напомним, что $\lambda \geq 0$), имеем

$$|L(\hbar)| = \frac{|E_r - E_\ell|}{\delta(\hbar)} = \lambda + O(\hbar),$$

следовательно, выполнено условие 3.

Аналогично из условия 2 вытекает условие 3, поскольку при справедливости условия 2 величина λ однозначно определяется отношением Δ/δ .

Все предыдущие рассуждения опирались на предположение, что

$$|E_r - E_\ell| = O(\varepsilon).$$

Покажем, что если это не так, то не выполнено ни одно из трех условий теоремы. Условие 3 не выполнено, так как оно влечет $|E_r - E_\ell| = O(\varepsilon)$.

Пусть $u_i = \sigma_i(x)\psi_i(x)$, $i = \ell, r$. Тогда

$$\|(\hat{H} - E_i)u_i\| = O(\varepsilon), \quad i = \ell, r.$$

Из теоремы 4 (см. приложение) следует, что существует собственное значение $\tilde{E}_i$ оператора $\hat{H}$ такое, что

$$|E_i - \tilde{E}_i| = O(\varepsilon), \quad i = \ell, r.$$

Соответствующие собственные функции имеют асимптотику (см. теорему 5)

$$\tilde{\psi}_i = u_i + O(\varepsilon\Delta^{-1}),$$

где Δ – расстояние между двумя близкими точками спектра оператора $\hat{H}$. Очевидна оценка

$$\Delta = |E_\ell - E_r| + O(\varepsilon).$$

Следовательно, отношение Δ/δ неограниченно, и условие 2 не выполнено.

Предположим, что имеет место двойная локализация. Из двойной локализации следует существование предела $\mu^2 \neq 0$ для отношения вероятностей $P_r(\hbar)/P_\ell(\hbar)$. Поскольку отношение Δ/ε неограниченно, функции $\tilde{\psi}_i$ будут близки к u_i при некотором малом $\hbar$. Получаем, что предел отношения вероятностей, если он существует, равен либо нулю, либо бесконечности, что противоречит определению двойной локализации. Теорема полностью доказана.

3. СЛУЧАЙ ЭНЕРГИИ, БЛИЗКОЙ К МИНИМУМУ ПОТЕНЦИАЛА

Аналог теоремы 1 справедлив для нижних энергетических уровней. Необходимо только пересчитать величины C_i и соответственно изменить $\delta(\hbar)$. Следует разделять случаи, когда оба локальных минимума потенциала $V(x)$ соответствуют одной энергии и когда значения $V(x)$ в локальных минимумах не совпадают. Для примера рассмотрим случай совпадения значений $V(x)$ в точках локальных минимумов.

Пусть $\xi_{1,2}$ – координаты двух невырожденных локальных минимумов двухъямного потенциала $V(x)$. Будем считать, что

$$V(\xi_i + x) = \omega_i^2 x^2 (1 + O(x)), \quad i = 1, 2.$$

Тогда для величины δ , если n -й уровень $E_\ell^{(n)}$ левой ямы близок к m -му уровню $E_r^{(m)}$ правой ямы, справедлива асимптотическая формула

$$\delta = 4\hbar \frac{\sqrt{\omega_1\omega_2}}{\sqrt{\pi n!m!}} \left(\frac{2}{\hbar}\right)^{(n+m)/2} J_1^{n+1/2} J_2^{m+1/2} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{\xi_1}^{\xi_2} \sqrt{V(x)} dx\right) (1 + O(\hbar)),$$

где

$$J_1 = \sqrt{\omega_1} \lim_{t \rightarrow \xi_1+0} \left\{ (t - \xi_1) \exp\left(\omega_1 \int_t^c \frac{dx}{\sqrt{V(x)}}\right) \right\},$$

$$J_2 = \sqrt{\omega_2} \lim_{t \rightarrow \xi_2-0} \left\{ (\xi_2 - t) \exp\left(\omega_2 \int_c^t \frac{dx}{\sqrt{V(x)}}\right) \right\}.$$

Если выполнены условия теоремы 1, то $|E_r^{(m)} - E_\ell^{(n)}|$ экспоненциально мало, следовательно, совпадают первые члены разложения по $\hbar$ данных энергий:

$$\omega_1(2n+1) = \omega_2(2m+1).$$

Таким образом, отношение частот колебаний классической частицы в левой и правой ямах есть рациональное число. В связи с этим возникновение туннельных эффектов в двухъямном потенциале часто называют *резонансным туннелированием*. Данный термин не вполне удачен, поскольку рациональность отношения частот является лишь слабым необходимым условием, и из нее не следует возникновение таких эффектов, как туннельная транспортировка и двойная локализация собственных функций.

Следуя методу работы [17], выразим пределы J_1 и J_2 через асимптотику решения системы в вариациях.

Рассмотрим гамильтонову систему, определяющую инстантон,

$$\dot{q} = 2p, \quad \dot{p} = V'(q),$$

с граничными условиями $q(-\infty) = \xi_1$, $q(0) = c$, $q(\infty) = \xi_2$. Эта система получается при изменении знака потенциала. Инстантон можно задать неявной формулой

$$2t = \int_c^q \frac{dx}{\sqrt{V(x)}}.$$

Рассмотрим соответствующую систему в вариациях:

$$\begin{aligned} \ddot{z} &= 2V''(q(t))z, \\ z(\pm\infty) &= 0, \quad z(0) = 1. \end{aligned}$$

Ее решение имеет вид

$$z(t) = \sqrt{\frac{V(q(t))}{V(c)}}.$$

Найдем асимптотику решения системы в вариациях при $t \rightarrow -\infty$:

$$z(t) \sim \frac{1}{\sqrt{V(c)}} \omega_1(q - \xi_1).$$

Из определения J_1 следует, что

$$q - \xi_1 \sim J_1 \omega_1^{-1/2} \exp\left(\omega_1 \int_c^q \frac{dx}{\sqrt{V(x)}}\right), \quad z(t) \sim J_1 \frac{\sqrt{\omega_1}}{\sqrt{V(c)}} e^{2\omega_1 t}.$$

Аналогично найдем асимптотику решения системы в вариациях при $t \rightarrow \infty$:

$$z(t) \sim J_2 \frac{\sqrt{\omega_2}}{\sqrt{V(c)}} e^{-2\omega_2 t}.$$

Таким образом, найдена связь пределов $J_{1,2}$ с асимптотикой решения системы в вариациях для инстантона.

4. ДИНАМИКА ЧАСТИЦЫ В СЛУЧАЕ РЕЗОНАНСНОГО ТУННЕЛИРОВАНИЯ

Рассмотрим оператор

$$\hat{H} = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} + V(x),$$

в котором $V(x)$ является гладкой вещественной функцией, имеющей вид двойной потенциальной ямы.

Рассмотрим динамику частицы в двухъямном потенциале при энергии, близкой к паре квазивыврожденных стационарных энергетических уровней. Пусть справедливы условия теоремы 1, два энергетических уровня $E_{1,2}$ оператора $\hat{H}$ находятся экспоненциально близко друг к другу, а соответствующие собственные функции $\psi_{1,2}$ биллокализованны.

Учитывая условие ортогональности для функций ψ_i , получаем (см. доказательство теоремы 1)

$$\psi_1 = u_\ell + \mu u_r + O(\hbar^\infty), \quad \psi_2 = \mu u_\ell - u_r + O(\hbar^\infty),$$

где $u_{\ell,r}$ сосредоточены только в левой и правой потенциальных ямах соответственно.

Рассмотрим задачу Коши с начальным состоянием, локализованным в левой яме:

$$i\hbar \frac{\partial u}{\partial t} = \hat{H}u, \quad u|_{t=0} = u_\ell.$$

Решение данной задачи Коши с точностью $O(\hbar^\infty)$ имеет вид

$$u = \frac{1}{1 + \mu^2} (e^{-iE_1 t/\hbar} \psi_1 + \mu e^{-iE_2 t/\hbar} \psi_2).$$

Подставляя выражения для ψ_1 и ψ_2 , получаем

$$\begin{aligned} u &= \frac{e^{-iE_1 t/\hbar}}{1 + \mu^2} (u_\ell + \mu u_r + e^{-(i/\hbar)(E_2 - E_1)t} \mu(\mu u_\ell - u_r)) = \\ &= \frac{e^{-iE_1 t/\hbar}}{1 + \mu^2} ((\mu^2 e^{-(i/\hbar)(E_2 - E_1)t} + 1)u_\ell + \mu(1 - e^{-(i/\hbar)(E_2 - E_1)t})u_r). \end{aligned}$$

Полная туннельная транспортиция означает, что существует такой момент времени $t = T$, что решение сосредоточено в иной яме, чем та, в которой сосредоточено начальное условие. Следовательно, полная транспортиция имеет место, если коэффициент перед u_ℓ обращается в нуль. Учитывая, что μ – положительное число, получаем $\mu = 1$. При положительных значениях $\mu \neq 1$ возникает только частичная транспортиция.

Видно, что туннельная транспортиция представляет собой периодический процесс, и его полупериод T – это время, за которое происходит перенос частицы в другую потенциальную яму. Время T экспоненциально велико и имеет вид

$$T = \frac{\pi\hbar}{E_2 - E_1}.$$

Используя формулы для μ и Δ из теоремы 1, для максимальной вероятности обнаружить частицу в правой яме получаем

$$\max_t P_r(t) = \left(\frac{\delta}{\Delta} \right)^2 + O(\hbar^\infty).$$

5. ПРИМЕРЫ НЕСИММЕТРИЧНОЙ ТРАНСПОРТАЦИИ

Классическим примером двухъямного потенциала является полином четвертого порядка. Точное решение для этого примера было изучено в работе [7] с помощью специальных функций.

Рассмотрим оператор $\hat{H}$ с потенциалом

$$V(x, s) = (x - 1)^2(x + 1)^2 + sx,$$

где s – параметр, характеризующий асимметрию. Будем исследовать спектр оператора $\hat{H}$ вблизи E , где $0 < E < 1$. Параметр s меняется в пределах $(0, s_0)$, где $s_0 = s_0(E)$ выбрано так, что уравнение $V(x, s_0) = E$ имеет четыре простых корня. Следовательно, рассматривается случай высоких энергетических уровней.

Как и ранее в разделе 2, введем операторы $\hat{H}_i$, константы $c = c(s)$ и $\delta = \delta(s, \hbar)$. Пусть $E_i^{(n)}$ – точки спектра оператора $\hat{H}_i$, $i = \ell, r$. Квантовые числа $n = n(\hbar)$ выбираются так, что $E_i^{(n)}$ близки к E . При фиксированном малом $\hbar$ энергетические уровни $E_i^{(n)}$ и соответствующие им собственные функции непрерывно зависят от s .

При $s = 0$ оператор $\hat{H}_\ell$ отличается от $\hat{H}_r$ заменой x на $-x$. Отсюда $E_\ell^{(n)} = E_r^{(n)}$. Из теоремы 1 следует бислокализация собственных функций. При увеличении параметра s энергетический уровень $E_\ell^{(n)}$ убывает, а $E_r^{(n)}$ возрастает с точностью $O(\hbar^2)$. Это следует из того, что они приближенно удовлетворяют правилу дискретизации Планка–Бора–Зоммерфельда [4]. Из непрерывной зависимости от s следует существование s_1 такого, что

$$E_\ell^{(n+1)} = E_r^{(n)} \quad \text{при} \quad s = s_1.$$

При $s = s_1$ собственные функции оператора $\hat{H}$, отвечающие собственным значениям с номерами $2n$ и $2n + 1$, бислокализованны, и имеет место транспортация. Аналогичный пример можно рассмотреть и для случая низких энергий.

6. ТУННЕЛЬНОЕ ВОЗМУЩЕНИЕ СПЕКТРА

В данном разделе мы найдем асимптотику возмущения дискретного спектра оператора Шредингера с одноянным потенциалом при добавлении к нему возмущающего потенциала, который полностью сосредоточен вне области движения классической частицы. Рассмотрение ведется в окрестности определенной энергии. Очевидно, что возмущение спектра окажется экспоненциально малым даже для немалого возмущающего потенциала (для рассматриваемой энергии). Основная цель состоит в получении главного члена асимптотики. Предполагается, что при добавлении возмущения потенциал остается одноянным для заданной энергии.

Пусть задан исходный одноянный потенциал $V(x)$ и соответствующий ему оператор $\hat{H}_0$. Пусть E_0 – собственное значение оператора $\hat{H}_0$, а ψ_0 – соответствующая волновая функция. Пусть (x_1, x_2) – область классического движения, т. е. $V(x) < E_0$ при $x \in (x_1, x_2)$. Добавим к исходному оператору возмущение, имеющее вид непрерывной функции $f(x)$, локализованной полностью в классически запрещенной области, а именно

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + f(x), \quad \text{supp } f(x) = [a, b], \quad x_2 < a < b.$$

Для волновой функции $\psi_0(x)$ при $x \in [a, b]$ справедливо разложение ВКБ

$$\psi_0(x) = \frac{C}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x |p| dx\right) (1 + O(\hbar)).$$

Следовательно,

$$\|(\hat{H} - E_0)\psi_0\|^2 = \|f(x)\psi_0\|^2 = \int_a^b f^2(x)\psi_0^2(x) dx = \varepsilon^2,$$

и для ε справедлива оценка

$$\varepsilon \leq C_1 e^{-S/\hbar},$$

где S – действие по инстантону от точки поворота до носителя функции $f(x)$:

$$S = \int_{x_2}^a \sqrt{V(x) - E} dx.$$

Из данной оценки получаем, что у оператора $\hat{H}$ есть точка спектра E , расстояние от которой до E_0 экспоненциально мало (не превосходит ε). Если после добавления $f(x)$ потенциал остается одноямыным для энергий, близких к E_0 , то ψ_0 может служить приближением для собственной функции оператора $\hat{H}$ (см. теорему 5), поскольку у оператора с одноямыным потенциалом расстояние между соседними уровнями имеет порядок $\hbar$.

Найдем следующий член разложения E по ε . Поскольку функция $f(x)$ не предполагается малой, формулы обычной теории возмущений неприменимы. Имеет место только слабая оценка $|E - E_0| \leq \varepsilon$.

Идея построения асимптотики энергии E состоит в применении теории возмущений для поиска спектра оператора $\hat{H}$, где в качестве невозмущенного оператора рассматривается не оператор $\hat{H}_0$, а некоторый специально построенный оператор. Данные идеи близки к идеям, использованным при доказательстве теоремы 6.

ТЕОРЕМА 2. Пусть $f(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow a$. Тогда для энергии E оператора $\hat{H}$ справедлива асимптотическая формула

$$E - E_0 = \langle f(x)\psi_0, \psi_0 \rangle (1 + o(1)).$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Пусть Π – проектор на ψ_0 , а $\Pi' = 1 - \Pi$. Рассмотрим операторы

$$A = \hat{H}_0 + \Pi' f(x) \Pi', \quad B = f(x) \Pi + \Pi f(x) - \Pi f(x) \Pi.$$

Для них справедливы соотношения

$$\begin{aligned} A + B &= \hat{H}_0 + f(x) = \hat{H}, & \|B\| &= O(\varepsilon), \\ A\psi_0 &= E_0\psi_0, & B\psi_0 &= f(x)\psi_0. \end{aligned}$$

Если предположить, что потенциал $V + f(x)$ остается одноямыным для энергий, близких к E_0 , то у оператора $\hat{H}$ существует единственная точка спектра E , экспоненциально близкая к E_0 , а остальные точки спектра находятся на расстоянии порядка $\hbar$.

Следовательно, для поиска асимптотики E можно применить формулу теории возмущений для изолированной точки спектра:

$$E = E_0 + \langle B\psi_0, \psi_0 \rangle + \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{\langle B\psi_0, \phi_k \rangle^2}{E_0 - \lambda_k} + O\left(\frac{\varepsilon^3}{\hbar^2}\right),$$

где $\psi_0, \phi_1, \phi_2, \dots$ – ортонормированный набор собственных функций оператора A , а $E_0, \lambda_1, \lambda_2, \dots$ – соответствующие собственные значения. Члены суммы, для которых энергия λ_k близка к E_0 , не дают вклада в асимптотику, поскольку для них функции ϕ_k экспоненциально малы на носителе функции $f(x)$. Следовательно,

$$E = E_0 + \langle f(x)\psi_0, \psi_0 \rangle + O(\varepsilon^2).$$

Остается доказать, что

$$\varepsilon^2 = \langle f(x)\psi_0, f(x)\psi_0 \rangle = o(\langle f(x)\psi_0, \psi_0 \rangle).$$

Данные оценки верны, поскольку вклад в интеграл $\langle f(x)\psi_0, f(x)\psi_0 \rangle$ дает только малая окрестность точки a и функция $f(x)$ мала в этой окрестности.

Из теоремы 2 можно получить несколько важных следствий.

СЛЕДСТВИЕ 1. *Формула для главного члена асимптотики совпадает с формулой классической теории возмущений, но величина поправки может быть много больше величины малого параметра ε и существенно зависит от того, как функция $f(x)$ стремится к нулю при $x \rightarrow a$.*

СЛЕДСТВИЕ 2. *Справедлива оценка*

$$E - E_0 = \exp\left(-\frac{2S + o(1)}{\hbar}\right).$$

Простая теория возмущений дает значительно более слабую оценку

$$|E - E_0| \leq \varepsilon = \exp\left(-\frac{S + o(1)}{\hbar}\right)$$

и не позволяет вычислить порядок поправки.

7. ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ТУННЕЛЬНОГО ВОЗМУЩЕНИЯ

Как показано в разделе 6, изменение потенциала в классически запрещенной области приводит к экспоненциально малому возмущению спектра. Данные поправки представляют интерес, если в задаче присутствует экспоненциальное квазивыврождение спектра, поскольку тогда малое возмущение энергий может привести к существенному изменению собственных функций, а следовательно, и динамики системы. Простейшей подобной системой является двухъямный потенциал. Учитывая результаты раздела 2, исследование двухъямного потенциала можно свести к исследованию пары одноямных потенциалов, для которых применима теорема 2.

Для начала рассмотрим влияние деформации потенциального барьера на туннелирование. Пользуясь полученными результатами, построим контрпример к работе [13]. Затем приведем независимое доказательство корректности условия 3 теоремы 1, опирающееся на оценки из следствия 2.

Рассмотрим влияние деформации потенциального барьера на резонансное туннелирование в двойной потенциальной яме. Пусть двухъямный потенциал $V(x)$ удовлетворяет требованиям теоремы 1, $E_{1,2}$ – пара квазивырожденных собственных значений оператора $\hat{H}$ и соответствующие собственные функции билокализованны. Добавим к потенциалу V функцию $f(x)$ такую, что носитель $f(x)$ лежит между центром потенциального барьера и точкой поворота. Для определенности можно считать, что возмущение имеет место на правой стороне барьера.

Тогда, используя результаты теоремы 1 и 2, легко доказать следующую теорему.

ТЕОРЕМА 3. *При гладкой деформации одной, для определенности правой, стороны потенциального барьера разрушается двойная локализация собственных функций, и для величины расщепления справедлива формула*

$$\Delta = \langle f(x)\psi_{\Gamma}, \psi_{\Gamma} \rangle (1 + o(1)).$$

Аналогичная задача в случае симметричного потенциала рассматривалась в работе [18], где был получен только показатель экспоненты, такой же, как в оценке из следствия 2.

Теперь покажем с помощью формулы для туннельного возмущения, что результаты, приведенные в работе [13], неверны.

В работе [13] рассматривается двухъямный несимметричный потенциал для энергий, близких к положениям равновесия потенциала. Предполагается, что потенциал является в точности квадратичным в некоторой окрестности областей классического движения, т. е. в некоторых конечных окрестностях минимумов потенциала. Для вычисления величины расщепления применялся метод двухуровневой аппроксимации. В качестве потенциалов левой и правой потенциальных ям выбирались осцилляторы с соответствующими частотами.

Ошибка состоит в том, что при таком выборе потенциалов левой и правой потенциальных ям полученный результат для величины расщепления оказывается меньше величины погрешности данного метода. Из такого подхода следует, что локализация собственных функций и наличие туннельной транспортировки не зависят от выбора гладкого участка потенциального барьера, соединяющего те области, где потенциал квадратичен. Такие вычисления приводят к неверному результату, поскольку деформация потенциального барьера вне областей квадратичности потенциала приведет к разрушению туннелирования (теорема 3). В самом деле, величина расщепления будет экспоненциально больше, чем полученная в работе [13]. В качестве контрпримера можно рассмотреть любой симметричный двухъямный потенциал, удовлетворяющий всем условиям работы [13], к которому добавлено несимметричное возмущение потенциального барьера.

Далее приведем независимое доказательство корректности условий теоремы 1, используя формулы туннельного возмущения спектра. Условие 3 теоремы 1 сформулировано в терминах спектров операторов $\hat{H}_{\ell, \Gamma}$ с одноямыми потенциалами $V_{\ell, \Gamma}(x)$. Выбор потенциалов $V_{\ell, \Gamma}$ не является однозначным, как видно из условий, наложенных на потенциалы $V_{\ell, \Gamma}$. Пусть выбраны другие потенциалы $W_{\ell, \Gamma}$. Тогда они отличаются от исходных потенциалов $V_{\ell, \Gamma}$ только в классически запрещенной области. Как следует из теоремы 1 условие существования числа λ такого, что $|E_{\Gamma} - E_{\ell}| = \delta(\hbar)(\lambda + O(\hbar))$, не зависит от свободы в выборе $V_{\ell, \Gamma}$ и характеризует двухъямный

потенциал V . Докажем этот факт непосредственно, используя формулу для туннельного возмущения.

Пусть

$$\widehat{K}_i = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} + W_i(x), \quad i = \ell, \text{r}.$$

Предположим, что для собственных значений $E_{\ell, \text{r}}$ операторов $\widehat{H}_{\ell, \text{r}}$ справедливо условие 3 теоремы 1, т. е. существует λ такое, что

$$|E_{\text{r}} - E_{\ell}| = \delta(\hbar)(\lambda + O(\hbar)).$$

Пусть $\psi_{\ell, \text{r}}$ – собственные функции, соответствующие собственным значениям $E_{\ell, \text{r}}$. Нужно доказать, что у операторов $\widehat{K}_{\ell, \text{r}}$ существуют собственные значения $k_{\ell, \text{r}}$, близкие к $E_{\ell, \text{r}}$, и такие, что

$$|k_{\text{r}} - k_{\ell}| = \delta(\hbar)(\lambda + O(\hbar)).$$

Введем обозначение

$$f_i(x) = W_i(x) - V_i(x), \quad i = \ell, \text{r}.$$

Тогда из условий, наложенных на потенциалы V_i и W_i , следует, что

$$f_{\ell}(x) \equiv 0 \quad \text{при} \quad x \leq b, \quad f_{\text{r}}(x) \equiv 0 \quad \text{при} \quad x \geq a.$$

Положим

$$S_{\ell} = \int_{x_{\ell}}^b |p(x)| dx, \quad S_{\text{r}} = \int_a^{x_{\text{r}}} |p(x)| dx.$$

Применяя оценку из следствия 2, получаем

$$k_i - E_i = \exp\left(-\frac{2S_i + o(1)}{\hbar}\right).$$

Поскольку точки a и b выбраны так, что $a < c < b$, а точка c является центром потенциального барьера с точки зрения действия,

$$\int_{x_{\ell}}^c |p| dx = \int_c^{x_{\text{r}}} |p| dx,$$

получаем, что величина $|k_i - E_i|$ экспоненциально меньше, чем $\delta(\hbar)$. Следовательно,

$$\frac{|k_{\text{r}} - k_{\ell}|}{\delta} = \frac{|E_{\text{r}} - E_{\ell}|}{\delta} + O(\hbar) = \lambda + O(\hbar),$$

что и требовалось доказать.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Некоторые теоремы из теории линейных операторов

Широко известны следующие утверждения.

ЛЕММА 1 (норма резольвенты). Пусть Γ – гильбертово пространство, оператор A самосопряжен. Тогда, если $\lambda \notin \text{Spectre}(A)$, то

$$\|(A - \lambda)^{-1}\| = \frac{1}{d(\lambda, \text{Spectre}(A))},$$

где d – расстояние на прямой.

ЛЕММА 2. Пусть Γ – гильбертово пространство, оператор A самосопряжен. Пусть задана квазимода u :

$$\|u\| = 1, \quad \|(A - \lambda)u\| \leq \varepsilon.$$

Тогда

$$d(\lambda, \text{Spectre}(A)) \leq \varepsilon.$$

ТЕОРЕМА 4 (равенство числа мод и квазимод). Пусть для самосопряженного оператора A в гильбертовом пространстве Γ имеются n ортонормированных квазимод:

$$\langle u_i, u_j \rangle = \delta_{ij}, \quad \|(A - \lambda)u_i\| \leq \varepsilon, \quad i, j = 1, 2, \dots, n.$$

Тогда существуют как минимум n ортогональных собственных функций ψ_k оператора A с собственными значениями из ε -окрестности λ :

$$(A - \lambda_k)\psi_k = 0, \quad |\lambda - \lambda_k| \leq \varepsilon, \quad k = 1, 2, \dots, n.$$

ТЕОРЕМА 5 (разложение квазимоды). Пусть Γ – гильбертово пространство, оператор A самосопряжен. Пусть задана квазимода $u \in \Gamma$, $\|u\| = 1$, $\|(A - \lambda)u\| \leq \varepsilon$. Предположим, что на интервале $(\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon)$ содержится всего одна точка спектра оператора A :

$$A\psi = \mu\psi, \quad |\lambda - \mu| < \varepsilon.$$

Тогда для квазимоды u имеет место разложение

$$u = \langle u, \psi \rangle \psi + \tilde{u}, \quad \|\tilde{u}\| \leq \frac{\varepsilon}{d},$$

где d – расстояние от λ до спектра A без учета точки μ .

ЗАМЕЧАНИЕ 1. Теорему 5 имеет смысл применять в том случае, когда известно, что $d \gg \varepsilon$. Эта теорема может дать представление о виде точной собственной функции.

Следующая теорема практически идентична теореме, доказанной в работе [9], несколько изменены формулировка и доказательство.

ТЕОРЕМА 6. Пусть в гильбертовом пространстве Γ задан самосопряженный оператор A . Пусть выполнены следующие условия.

1. Для оператора A задан набор из n ортонормированных квазимод:

$$\langle u_i, u_j \rangle = \delta_{ij}, \quad \|(A - \lambda)u_i\| \leq \varepsilon, \quad i, j = 1, 2, \dots, n.$$

2. Пусть d – расстояние от λ до спектра A при условии, что n ближайших точек не учитываются (число точек считается с учетом кратности). Справедлива оценка

$$d > \sqrt{2n\varepsilon}.$$

3. Найдены собственные значения μ_i и соответствующие собственные векторы z_i , $i = \overline{1, n}$, матрицы, состоящей из элементов

$$V_{ij} = \langle (A - \lambda)u_i, u_j \rangle, \quad i, j = 1, 2, \dots, n.$$

Собственные векторы z_i выбраны ортонормированными.

Тогда существуют $y_i \in \Gamma$ такие, что

$$\begin{aligned} y_i &= v_i + w_i, & i &= 1, 2, \dots, n, \\ v_i &= \sum_{j=1}^n z_i^j u_j, & \|w_i\| &\leq \frac{\sqrt{2n\varepsilon}}{d - \sqrt{2n\varepsilon}}, \\ \| (A - \lambda - \mu_i) y_i \| &\leq \frac{4n\varepsilon^2}{d - \sqrt{2n\varepsilon}}. \end{aligned}$$

ЗАМЕЧАНИЕ 2. Если $d \gg \varepsilon$, то условие 2 выполняется автоматически, и вычисление собственных значений матрицы V позволяет получить спектр оператора A с точностью $O(\varepsilon^2/d)$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ТЕОРЕМЫ 6. Из первого условия данной теоремы следует, что на интервале существуют не менее n точек спектра оператора A , а из второго условия данной теоремы следует, что их не более n . Обозначим через ψ_i собственные функции оператора A , отвечающие собственным значениям λ_i из рассмотренного интервала. Тогда d – это расстояние от точки λ до спектра A без учета точек λ_i , $i = 1, \dots, n$.

Пусть E – ортогональный проектор на линейную оболочку векторов u_i , $i = 1, \dots, n$, а $E' = I - E$. Определим операторы

$$V = (A - \lambda)E + E(A - \lambda) - E(A - \lambda)E, \quad A_0 = A - V.$$

Покажем, что V – конечномерный оператор. Пусть $u_1, \dots, u_n, \dots, u_r$ – ортонормированный базис в пространстве, образованном набором векторов $u_1, \dots, u_n$, $(A - \lambda)u_1, \dots, (A - \lambda)u_n$. Пусть функция $\phi \in \Gamma$ ортогональна всем u_i , $i = \overline{1, r}$. Тогда

$$\|E(A - \lambda)\phi\|^2 = \langle E(A - \lambda)\phi, E(A - \lambda)\phi \rangle = \langle (A - \lambda)E(A - \lambda)\phi, \phi \rangle = 0,$$

поскольку функция ϕ ортогональна образу оператора $(A - \lambda)E$. Следовательно, размерность оператора $E(A - \lambda)$ не превосходит $r \leq 2n$. Остальные слагаемые в определении V , очевидно, конечномерны.

Докажем, что $\|V\| \leq \sqrt{2n\varepsilon}$. Очевидно, что

$$\|(A - \lambda)E\| \leq \sqrt{n\varepsilon}.$$

Оценим норму оператора $E(A - \lambda)$. Поскольку $E(A - \lambda)$ сопряжен к $(A - \lambda)E$, имеем

$$\|E(A - \lambda)\| \leq \sqrt{n\varepsilon}.$$

Пусть $\phi \in \Gamma$ и $\|\phi\| = 1$. Тогда

$$\|V\phi\|^2 = \|E'(A - \lambda)E\phi + E(A - \lambda)\phi\|^2 \leq 2n\varepsilon^2 + 2\langle E'(A - \lambda)E\phi, E(A - \lambda)\phi \rangle = 2n\varepsilon^2.$$

Покажем, что для оператора A_0 значение λ есть изолированная точка спектра кратности n . Из определения A_0 и того, что $E u_i = u_i$, $i = \overline{1, n}$, вытекает, что

$$(A_0 - \lambda)u_i = (A - \lambda)u_i - V u_i = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Поскольку $\|V\| \leq \sqrt{2n\varepsilon}$, любая собственная функция оператора A является квазимодой оператора A_0 и наоборот. Поэтому на интервале $(\lambda - d + \sqrt{2n\varepsilon}, \lambda + d - \sqrt{2n\varepsilon})$ оператор A_0 имеет ровно n точек спектра с учетом кратности. В противном случае возникает противоречие с условием 2 данной теоремы. Из леммы 1 получаем

$$\|(A_0 - \lambda)^{-1} E'\| \leq (d - \sqrt{2n\varepsilon})^{-1}.$$

Таким образом, мы имеем представление оператора A в виде суммы оператора A_0 и малого конечномерного оператора V . Спектр и собственные векторы оператора A_0 в окрестности точки λ известны. Для получения поправок к собственным векторам и числам оператора A можно применить теорию возмущений в случае изолированного вырожденного собственного значения λ .

Пусть v_i такие, что $E v_i = v_i$, являются собственными функциями оператора EVE . Найдутся n таких функций v_i , так как оператор EVE конечномерен и имеет размерность n :

$$EV v_i = \mu_i v_i, \quad \|v_i\| = 1, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Пусть $w_i = -(A_0 - \lambda)^{-1} E' V v_i$. Из определений v_i и w_i следует, что

$$\begin{aligned} A_0 v_i &= A_0 E v_i = \lambda v_i, \\ (V - \mu_i) v_i &= (E' + E)(V - \mu_i) v_i = E' V v_i, \quad (A_0 - \lambda) w_i = -E' V v_i, \\ |\mu_i| &\leq \|V\| \leq \sqrt{2n\varepsilon}, \quad \|V - \mu_i\| \leq \|V\| + |\mu_i| \leq 2\sqrt{2n\varepsilon}, \\ \|w_i\| &= \|(A_0 - \lambda)^{-1} E' V v_i\| \leq \|(A_0 - \lambda)^{-1} E'\| \|V\| \|v_i\| \leq \frac{\sqrt{2n\varepsilon}}{d - \sqrt{2n\varepsilon}}, \\ \|(A - \lambda - \mu_i)(v_i + w_i)\| &= \|(A_0 - \lambda + V - \mu_i)(v_i + w_i)\| = \\ &= \|(V - \mu_i) w_i\| \leq \|(V - \mu_i)\| \|w_i\| \leq \frac{4n\varepsilon^2}{d - \sqrt{2n\varepsilon}}. \end{aligned}$$

Таким образом, мы получили, что $v_i + w_i$ являются квазимодами с собственными значениями $\lambda + \mu_i$, где $i = 1, 2, \dots, n$.

Искать v_i и μ_i можно, используя матричные элементы оператора V в базисе, содержащем векторы u_i , $i = 1, 2, \dots, n$. Тогда

$$V_{i,j} = \langle V u_i, u_j \rangle = \langle (A - \lambda) E u_i, u_j \rangle = \langle (A - \lambda) u_i, u_j \rangle.$$

Собственные векторы этой матрицы суть коэффициенты разложения вектора v_i по векторам u_j , а собственными значениями являются именно μ_i , $i = 1, 2, \dots, n$. Теорема доказана.

Благодарности. Автор благодарен М. В. Карасеву за постановку задачи, плодотворные обсуждения и помощь в подготовке статьи. Работа выполнена на кафедре прикладной математики МИЭМ в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

Список литературы

- [1] M. Razavy, *Quantum Theory of Tunneling*, World Sci., Singapore, 2003.
- [2] J. Ankerhold, *Quantum Tunneling in Complex Systems. The Semiclassical Approach*, Springer Tracts in Modern Physics, **224**, Springer, Berlin, 2007.
- [3] F. Hund, *Z. Phys.*, **40**:10 (1927), 742–764.
- [4] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика*, т. 3: *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Наука, М., 1974.
- [5] С. Ю. Доброхотов, В. Н. Колокольников, В. П. Маслов, *ТМФ*, **87**:3 (1991), 323–375.
- [6] A. Gangopadhyay, M. Dzero, V. Galitski, *Phys. Rev. B*, **82**:2 (2010), 024303, 13 pp., arXiv: 1005.0652.
- [7] С. Ю. Славянов, В. Лай, *Специальные функции. Единая теория, основанная на анализе особенностей*, Невский Диалект, СПб, 2002.
- [8] M. M. Nieto, V. P. Gutschick, C. M. Bender, F. Cooper, D. Strottman, *Phys. Lett. B*, **163**:5–6 (1985), 336–342.
- [9] Т. Ф. Панкратова, “Квазимоды и экспоненциальное расщепление собственных значений”, *Проблемы математической физики*, т. 11: *Дифференциальные уравнения и теория рассеяния*, Изд-во Ленинградского ун-та, Л., 1986, 167–177.
- [10] B. Helffer, J. Sjöstrand, *Commun. Partial Differential Equations*, **9**:4 (1984), 337–408.
- [11] B. Helffer, J. Sjöstrand, *Ann. Inst. H. Poincaré*, **42**:2 (1985), 127–212.
- [12] Т. Ф. Панкратова, *Зап. научн. сем. ЛОМИ*, **195** (1991), 103–112.
- [13] D.-Y. Song, *Ann. Phys.*, **323**:12 (2008), 2991–2999, arXiv: 0803.3113.
- [14] S. Agmon, *Lectures on Exponential Decay of Solutions of Second-Order Elliptic Equations: Bounds on Eigenfunctions of N-Body Schrödinger Operators*, Mathematical Notes, **29**, Princeton Univ. Press, Princeton, NJ, 1982.
- [15] B. Simon, *J. Funct. Anal.*, **63**:1 (1985), 123–136.
- [16] B. Simon, *Bull. AMS*, **8**:2 (1983), 323–326.
- [17] С. Ю. Доброхотов, В. Н. Колокольников, *ТМФ*, **94**:3 (1993), 426–434.
- [18] G. Jona-Lasinio, F. Martinelli, E. Scoppola, *Commun. Math. Phys.*, **80**:2 (1981), 223–254.
- [19] М. В. Федорюк, *Асимптотические методы для линейных обыкновенных дифференциальных уравнений*, Наука, М., 1977.

Поступила в редакцию 17.03.2013,
после доработки 15.07.2013