Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Е. В. Выборный, Расщепление энергий при динамическом туннелировании, *ТМФ*, 2014, том 181, номер 2, 337–348

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf8771>

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: 52.6.47.48

26 апреля 2023 г., 18:28:26

© 2014 г.

Е. В. Выборный*

ОБ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОМ РАСЩЕПЛЕНИИ ПРИ ДИНАМИЧЕСКОМ ТУННЕЛИРОВАНИИ

Предложен операторный метод вычисления квазиклассической асимптотики величины расщепления энергий в общем случае туннелирования между симметричными орбитами в фазовом пространстве. С применением данного подхода для частицы на окружности получена асимптотика величины туннельного расщепления энергий, связанного с надбарьерным отражением от потенциала. В качестве примера рассмотрен квантовый маятник в роторном режиме.

Ключевые слова: динамическое туннелирование, туннельное расщепление, уравнение Шредингера, квазиклассическое приближение, надбарьерное отражение.

DOI: 10.4213/tmf8771

1. ВВЕДЕНИЕ

Туннелирование является одним из базовых квантовых эффектов и представляет интерес для многих областей современной физики [1], [2]. Основным проявлением туннелирования является проникновение частицы через потенциальный барьер, разделяющий две области классического движения в конфигурационном пространстве. Хорошо известно, что туннелирование приводит к расщеплению энергетических уровней [3]–[7] в случае зеркально-симметричного двухъямного потенциала; аналогичный эффект возможен и при отсутствии симметрии [8]–[11]. Другим проявлением туннельного эффекта является отражение частицы при движении выше потенциального барьера, которое также можно рассматривать как туннелирование через классически запрещенную область (барьер) в импульсном представлении [12], [13].

В общем случае туннелирование может происходить между двумя различными траекториями в фазовом пространстве – так называемое динамическое туннелирование. Динамическое туннелирование возникает в различных квантово-механических моделях и активно изучается в последнее время [14]–[16]. Очень интересные “динамические” случаи связаны с присутствием магнитного поля (см. работы [17]–[19]). Одной из важных задач является вычисление туннельного расщепления энергий в случае динамического туннелирования. Исследование влияния туннелирования

*Национальный исследовательский университет “Высшая школа экономики”, Москва, Россия. E-mail: evgeniy.bora@gmail.com

на структуру спектра проводилось также с использованием методов адиабатического приближения для оператора Шредингера с быстро осциллирующим потенциалом (см. работы [20], [21]).

Самый простой пример динамического туннелирования дает задача о движении частицы по окружности под действием потенциального поля V в случае, когда ее энергия выше барьера $\max V(x)$ (ротормый режим). Классическая частица в такой ситуации будет вращаться (пробегать всю окружность) в одном из двух возможных направлений. В квантовой механике оказывается возможным существование пар состояний, в каждом из которых частица “вращается” одновременно в двух направлениях, и возникает туннельное расщепление уровня энергии, отвечающего данной паре.

Вычисление туннельного расщепления дискретного спектра частицы на окружности эквивалентно задаче о вычислении ширины лагун – промежутков между зонами в блоховском спектре оператора Шредингера на прямой с периодическим потенциалом (см., например, монографии [22] или [23]). Случай $V(x) = \cos x$ отвечает квантовому маятнику [24], а соответствующее уравнение Шредингера эквивалентно уравнению Матье. В случае, когда потенциал аналитический и топология линий Стокса имеет вид, как при $V(x) = \cos x$, асимптотика ширины лагун была получена в работе Дыхне [25], полное строгое доказательство и разбор еще нескольких случаев представлен в работе Симоняна [26] (см. также книгу [27]). Общее описание структуры спектра для этой ситуации приведено в работе [17], а в работе [28] дана глубокая интерпретация формулы Дыхне–Симоняна в геометрических терминах комплексифицированного фазового пространства.

Существует несколько различных асимптотических режимов в задаче об оценке ширины лагун (см. соответствующие замечания в работах [29], [30]). Во многих работах в качестве большого параметра выступает номер лагуны, тогда энергия (центр лагуны) стремится к бесконечности. При соответствующей перенормировке видно, что данный режим является квазиклассическим [4], но включает в себя дополнительное предположение о малости потенциала по сравнению с полной энергией. Можно показать, что при таком предположении из формулы Дыхне–Симоняна [25], [26] следует известная формула Харрелла–Аврона–Саймона [29], [30] для ширины зон неустойчивости уравнения Матье. Существует также ряд глубоких результатов (см., например, в работе [31]) о связи гладкости потенциала со скоростью убывания ширины лагун при росте энергии. В случае аналитического потенциала известно, что ширина лагун убывает экспоненциально [32], а в случае потенциала конечной гладкости – по степенному закону [33].

В настоящей работе мы предлагаем единый подход к вычислению расщепления энергий (см. раздел 2) в общем случае туннелирования между двумя симметричными орбитами в фазовом пространстве, обобщающий формулы для симметричной двойной ямы [4], [5]. С помощью данного подхода получена асимптотическая формула для величины расщепления энергий оператора Шредингера на окружности в случае произвольного достаточно гладкого потенциала (теорема 1). В рассматриваемой задаче динамического туннелирования полученную нами формулу можно рассматривать как импульсный (интегрально-разностный) аналог известной (интегрально-дифференциальной) формулы Лифшица–Герринга [4], [34], которая применяется в задачах о координатном туннелировании. В случае аналитического потенциала полученная формула приводит к альтернативному доказательству формулы Дыхне–Симоняна (см. раздел 3), а в случае потенциала конечной гладкости позволяет получить оценки, предложенные в статье [33].

2. ТУННЕЛЬНОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ ЭНЕРГИЙ

Рассмотрим одномерное стационарное уравнение Шредингера на окружности

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

$$\psi(x + 2\pi) = \psi(x), \quad (2)$$

где $\hbar$ – малый параметр квазиклассического приближения, а $V(x) \in C^2(\mathbb{R})$ – периодический потенциал, $V(x + 2\pi) = V(x)$. Соответствующий оператор Шредингера имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + V(x).$$

Степенную по параметру $\hbar$ асимптотику фундаментальной системы решений уравнения (1) для энергий E выше максимума потенциала $V(x)$ можно получить с помощью метода ВКБ (см., например, [17], [27], [28]):

$$\varphi_1(x) = \sqrt{\frac{\omega}{p(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x) dx\right) [1 + O(\hbar)], \quad (3)$$

$$\varphi_2(x) = \sqrt{\frac{\omega}{p(x)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x) dx\right) [1 + O(\hbar)],$$

где $p(x) = \sqrt{2(E - V(x))}$ – классический импульс, $p(x) > 0$, а ω – классическая частота колебаний:

$$\omega^{-1} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{dx}{p(x)}.$$

Асимптотические оценки (3) равномерны по x и допускают дифференцирование. Состояния $\varphi_{1,2}$ нормированы, состояние φ_1 соответствует движению частицы по окружности против часовой стрелки (положительное направление оси x), а φ_2 – по часовой стрелке.

Используя условие периодичности (2), получаем аналог правила дискретизации Планка–Бора–Зоммерфельда для частицы на окружности:

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sqrt{2(E - V(x))} dx = n\hbar + O(\hbar^2), \quad (4)$$

где $n \sim 1/\hbar$ – целое число такое, что соответствующая энергия E существенно больше максимума потенциала. Надбарьерное отражение от потенциала (туннелирование в импульсном представлении), вообще говоря, приводит к малому расщеплению энергий, удовлетворяющих правилу (4). Следовательно, для энергий существенно выше максимума потенциала спектр оператора $\hat{H}$ состоит из пар близких точек, а расстояние между соседними парами имеет порядок $\hbar$. Соответствующие собственные функции являются линейными комбинациями функций φ_1 и φ_2 .

Пусть E_1, E_2 – пара собственных значений оператора $\hat{H}$, а ψ_1 и ψ_2 – соответствующие собственные функции:

$$\hat{H}\psi_1 = E_1\psi_1, \quad \hat{H}\psi_2 = E_2\psi_2.$$

Пусть $\hat{\sigma}$ – некоторый самосопряженный оператор. Тогда, умножая скалярно первое равенство на $\hat{\sigma}\psi_2$ справа, а второе – на $\hat{\sigma}\psi_1$ слева и используя самосопряженность операторов $\hat{H}$ и $\hat{\sigma}$, получаем

$$\langle \hat{\sigma}\hat{H}\psi_1, \psi_2 \rangle = E_1 \langle \hat{\sigma}\psi_1, \psi_2 \rangle, \quad \langle \hat{H}\hat{\sigma}\psi_1, \psi_2 \rangle = E_2 \langle \hat{\sigma}\psi_1, \psi_2 \rangle.$$

Если оператор $\hat{\sigma}$ выбран так, что $\langle \hat{\sigma}\psi_1, \psi_2 \rangle \neq 0$, то

$$\Delta = E_2 - E_1 = \frac{\langle [\hat{H}, \hat{\sigma}]\psi_1, \psi_2 \rangle}{\langle \hat{\sigma}\psi_1, \psi_2 \rangle}, \quad (5)$$

где $[\hat{H}, \hat{\sigma}]$ – коммутатор операторов $\hat{H}$ и $\hat{\sigma}$.

Формула (5) является обобщением классических формул для вычисления туннельного расщепления в различных задачах квантовой механики. Например, из формулы (5) можно получить формулу Герринга [34] для многомерного симметричного двухъямного потенциала, если взять $\hat{\sigma} = \sigma(\hat{x})$, где функция $\sigma(x)$ равна единице с одной стороны от плоскости симметрии и нулю – с другой. Аналогично можно получить классическую формулу для величины расщепления в одномерной двойной симметричной потенциальной яме [4] и формулу для ширин зон спектра периодического оператора Шредингера, находящихся ниже максимума потенциала (см. монографию [35], раздел VI.55, задача 3).

В общем случае туннелирования между различными областями фазового пространства оператор $\hat{\sigma}$ должен отделять состояния, локализованные в одной области фазового пространства, от состояний, локализованных в другой симметричной области. Тогда несложно показать, что для знаменателя в (5) справедлива приближенная формула

$$\langle \hat{\sigma}\psi_1, \psi_2 \rangle \approx \frac{\alpha}{2}, \quad |\alpha| = 1,$$

где фазовый множитель α определяется выбором глобальных фазовых множителей состояний ψ_i . Выражение в числителе формулы (5) можно упрощать, используя известные формулы для коммутатора псевдодифференциальных операторов [36].

В качестве примера рассмотрим задачу о расщеплении в двухъямном симметричном потенциале $V(x) = V(-x)$ на прямой [4]. Если взять $\hat{\sigma} = \theta(\hat{x})$, где $\theta(x)$ – функция Хевисайда, то

$$[\hat{H}, \hat{\sigma}] = -\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{d^2}{dx^2}, \theta(x) \right] = -\frac{\hbar^2}{2} \left(\delta'(x) + 2\delta(x) \frac{d}{dx} \right),$$

где $\delta(x) = \theta'(x)$ – дельта-функция Дирака. Следовательно,

$$\langle [\hat{H}, \hat{\sigma}]\psi_1, \psi_2 \rangle = -\frac{\hbar^2}{2} (\psi_1' \bar{\psi}_2 - \psi_1 \bar{\psi}_2')|_{x=0}.$$

Если $\psi_{1,2}(x)$ – действительные функции, причем $\psi_1(x)$ – четная, а $\psi_2(x)$ – нечетная функция, то

$$\langle [\hat{H}, \hat{\sigma}] \psi_1, \psi_2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2} \psi_1(0) \psi_2'(0), \quad \langle \hat{\sigma} \psi_1, \psi_2 \rangle \approx \frac{1}{2}.$$

Применяя формулу (5), получаем формулу для величины расщепления:

$$\Delta = \hbar^2 \psi_1(0) \psi_2'(0).$$

Если в эту формулу подставить ВКБ-асимптотику состояний $\psi_{1,2}$, то получим классическую формулу [4] для величины расщепления в симметричном двухъямном потенциале:

$$\Delta = \frac{\omega \hbar}{\pi} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^a |p| dx\right),$$

где $a > 0$ – точка поворота, ω – частота классических колебаний.

Для рассматриваемой задачи о частице на окружности, следуя предложенному методу, возьмем $\hat{\sigma} = \sigma(\hat{p})$, где

$$\sigma(p) = \begin{cases} 1, & p > 0, \\ 1/2, & p = 0, \\ 0, & p < 0. \end{cases}$$

Подставляя $\hat{\sigma}$ в формулу (5) и производя необходимые упрощения, получаем следующую теорему.

ТЕОРЕМА 1. Пусть $E_{1,2}$ – пара близких собственных значений оператора $\hat{H}$, отвечающих роторному режиму. Пусть соответствующие собственные функции $\psi_{1,2}$ выбраны действительными и нормированы так, что

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= \sqrt{\frac{2\omega}{p(x)}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x) dx\right) + O(\hbar), \\ \psi_2(x) &= \sqrt{\frac{2\omega}{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x) dx\right) + O(\hbar). \end{aligned} \quad (6)$$

Тогда для расщепления энергий справедлива асимптотическая формула

$$\Delta = \frac{1 + O(\hbar)}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} dx_1 \int_0^{2\pi} (V(x_2) - V(x_1)) \operatorname{ctg}\left(\frac{x_2 - x_1}{2}\right) \psi_1(x_1) \psi_2(x_2) dx_2. \quad (7)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Пусть π_k – проектор на состояние с импульсом $p = k\hbar$:

$$\pi_k \psi(x) = e^{ikx} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \psi(x) e^{-ikx} dx.$$

Следовательно,

$$\hat{\sigma} = \sum_{k=1}^{+\infty} \pi_k + \frac{\pi_0}{2}.$$

Очевидно, справедливы следующие коммутационные соотношения

$$\begin{aligned} [e^{ix}, \pi_k] &= e^{ix} (\pi_k - \pi_{k-1}), \\ [e^{ix}, \hat{\sigma}] &= -e^{ix} \pi_0 + \frac{1}{2} e^{ix} (\pi_0 - \pi_{-1}) = -\frac{1}{2} e^{ix} (\pi_0 + \pi_{-1}). \end{aligned}$$

Поскольку потенциал $V(x)$ является периодической функцией, можно считать, что $V(x) = v(e^{ix})$. Используя известную формулу для коммутатора, получаем

$$[\hat{H}, \hat{\sigma}] = [V(x), \hat{\sigma}] = [v(e^{ix}), \hat{\sigma}] = -\frac{1}{2} e^{3ix} \cdot (\pi_0 + \pi_{-1}) \cdot \delta v(e^{ix}, e^{ix}),$$

где $\delta v(z_1, z_2)$ – разностная производная функции $v(z)$,

$$\delta v(z_1, z_2) = \frac{v(z_1) - v(z_2)}{z_1 - z_2},$$

а верхние номера определяют порядок действия операторов.

Поскольку

$$\langle \pi_k \psi, \varphi \rangle = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} dx_1 \int_0^{2\pi} e^{-ikx_1} e^{ikx_2} \psi(x_1) \overline{\varphi(x_2)} dx_2,$$

получаем, что

$$\langle [\hat{H}, \hat{\sigma}] \psi_1, \psi_2 \rangle = -\frac{1}{2(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} dx_1 \int_0^{2\pi} e^{ix_2} (1 + e^{ix_1} e^{-ix_2}) \delta v(e^{ix_1}, e^{ix_2}) \psi_1(x_1) \psi_2(x_2) dx_2.$$

Используя тригонометрическую формулу

$$\operatorname{ctg} \frac{x_2 - x_1}{2} = i \frac{e^{ix_2} + e^{ix_1}}{e^{ix_2} - e^{ix_1}}$$

и равенство

$$\delta v(e^{ix_1}, e^{ix_2}) = \frac{V(x_1) - V(x_2)}{e^{ix_1} - e^{ix_2}},$$

получаем

$$\langle [\hat{H}, \hat{\sigma}] \psi_1, \psi_2 \rangle = \frac{i}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} dx_1 \int_0^{2\pi} (V(x_2) - V(x_1)) \operatorname{ctg} \left(\frac{x_2 - x_1}{2} \right) \psi_1(x_1) \psi_2(x_2) dx_2.$$

С учетом формулы (5) остается показать, что

$$\langle \hat{\sigma} \psi_1, \psi_2 \rangle = \frac{i}{2} + O(\hbar).$$

Данная оценка следует непосредственно из (6). Теорема доказана.

Очевидно, что ВКБ-асимптотики вида (6) не являются достаточно точными для вычисления интеграла в формуле (7), но они дают представление о характере подынтегрального выражения. Интеграл в (7) – это интеграл от быстроосциллирующей функции без стационарных точек. Следовательно, если потенциал $V(x)$ гладкий, то расщепление будет стремиться к нулю быстрее любой степени $\hbar$.

Если потенциал $V(x)$ – аналитическая функция, то асимптотику интеграла (7) можно найти, используя метод перевала [37]. Стационарные точки определяются из равенства $p(x_1) = p(x_2) = 0$, т.е. совпадают с комплексными точками поворота уравнения (1). Следовательно, основной вклад в величину расщепления дают комплексные точки поворота, что согласуется с общей теорией надбарьерного отражения [4], [38]–[40].

В формуле (7) можно перейти от x - к p -представлению. Тогда получаем

$$\Delta = 2[1 + O(\hbar)] \operatorname{Im} \sum_{n=1}^{\infty} \overline{\tilde{V}(n)} \sum_{k=1}^n (\tilde{\psi}_1(n-k+1) \tilde{\psi}_2(k-1) + \tilde{\psi}_1(n-k) \tilde{\psi}_2(k)), \quad (8)$$

где $\tilde{f}(k)$ – k -й коэффициент разложения функции $f(x)$ в ряд Фурье:

$$\tilde{f}(k) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(x) e^{-ikx} dx.$$

Из формулы (8) следует, что если потенциал $V(x)$ является тригонометрическим многочленом или если коэффициенты $\tilde{V}(n)$ убывают достаточно быстро, то основной вклад в величину расщепления дают слагаемые с конечными n и соответственно с импульсами $p = n\hbar$, близкими к нулю. Заметим, что импульс $p = 0$ является центром классически запрещенной зоны в p -представлении.

3. КВАНТОВЫЙ МАЯТНИК

В качестве примера применения теоремы 1 рассмотрим квантовый маятник. Гамильтониан квантового маятника имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \gamma \cos x.$$

Квантовый маятник является одной из классических моделей квантовой механики [24], [41], [42], а стационарное уравнение Шредингера (1) эквивалентно уравнению Матве. В настоящем разделе показано, как из общей формулы для расщепления (см. теорему 1) можно получить квазиклассическую формулу Дыхне–Симоняна (см. формулу (19) ниже).

Рассмотрим пару близких собственных значений $E_{1,2}$. Пусть соответствующие собственные функции $\psi_{1,2}$ выбраны, как в теореме 1, т. е. функции $\psi_{1,2}$ действительны, $\psi_1(x)$ – четная функция, а $\psi_2(x)$ – нечетная. Тогда, подставляя потенциал $V(x) = \gamma \cos x$ в формулу (8), получаем

$$\Delta = \gamma \operatorname{Im} \{ \tilde{\psi}_1(1) \tilde{\psi}_2(0) + \tilde{\psi}_1(0) \tilde{\psi}_2(1) \} [1 + O(\hbar)], \quad (9)$$

где

$$\tilde{\psi}_j(n) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \psi_j(x) e^{-inx} dx, \quad j = 1, 2. \quad (10)$$

Формула для расщепления, аналогичная формуле (9), применялась в работе [30] при дополнительном предположении о малости потенциала по сравнению с полной энергией, т. е. при $\gamma \sim \hbar$.

Стационарное уравнение Шредингера (1) в p -представлении принимает вид

$$\frac{p^2}{2} \tilde{\psi}(n) + \frac{\gamma}{2} (\tilde{\psi}(n+1) + \tilde{\psi}(n-1)) = E \tilde{\psi}(n), \quad (11)$$

где $p = n\hbar$. Уравнение (11) является рекуррентным уравнением второго порядка с медленно меняющимися коэффициентами. Используя дискретный метод ВКБ [43], [44] или операторные методы [36], можно найти формальные асимптотические решения этого уравнения вида

$$\frac{1}{\sqrt{V'(x(p))}} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{p_0}^p x(p) dp \right).$$

Учитывая явный вид потенциала, получаем

$$u_{\pm}(n) = \left(\left(\frac{E}{\gamma} - \frac{(n\hbar)^2}{2\gamma} \right)^2 - 1 \right)^{-1/4} \exp \left(\pm \frac{1}{\hbar} \int_0^{n\hbar} \operatorname{arccch} \left(\frac{E}{\gamma} - \frac{p^2}{2\gamma} \right) dp \right) [1 + O(\hbar)], \quad (12)$$

где $u_+(n) = u_-(-n)$ и $\operatorname{arccch} z = \ln(z + \sqrt{z^2 - 1}) > 0$ при $z > 1$. В статьях [44], [45] дано строгое обоснование подобных асимптотик. Асимптотики (12) справедливы в области классически запрещенных значений импульса между двумя точками поворота, т. е. для n таких, что $|n\hbar| \leq p_0 - \varepsilon$, где $\varepsilon > 0$ – некоторое фиксированное число, $\pm p_0$ – точки поворота, $p_0 = \sqrt{2(E - \gamma)}$.

Решения $u_{\pm}(n)$ являются линейно независимыми и образуют фундаментальную систему решений уравнения (11) для заданной энергии $E > \gamma$. Разложим состояния $\tilde{\psi}_{1,2}$ по данной системе.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 1. Состояния $\psi_{1,2}$ в p -представлении имеют вид

$$\tilde{\psi}_1(n) = C_1(u_+(n) + u_-(n)), \quad \tilde{\psi}_2(n) = iC_2(u_+(n) - u_-(n)), \quad (13)$$

где C_i – действительные нормировочные константы,

$$\begin{aligned} C_1 &= \sqrt{\frac{\omega\hbar}{4\pi\gamma}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^{p_0} \operatorname{arccch}\left(\frac{E}{\gamma} - \frac{p^2}{2\gamma}\right) dp\right) [1 + O(\hbar)], \\ C_2 &= -\sqrt{\frac{\omega\hbar}{4\pi\gamma}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^{p_0} \operatorname{arccch}\left(\frac{E}{\gamma} - \frac{p^2}{2\gamma}\right) dp\right) [1 + O(\hbar)]. \end{aligned} \quad (14)$$

ЗАМЕЧАНИЕ 1. Поскольку фундаментальная система решений $u_{\pm}(n)$ зависит от энергии E , энергия E равна E_j в разложении (13) для $\tilde{\psi}_j(n)$. В асимптотических формулах (12) и (14) можно положить $E = (E_1 + E_2)/2$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Поскольку функции $\psi_{1,2}(x)$ выбраны действительными и при этом $\psi_1(x)$ – четная функция, а $\psi_2(x)$ – нечетная, их коэффициенты Фурье удовлетворяют следующим соотношениям:

$$\tilde{\psi}_1(n) = \tilde{\psi}_1(-n) = \overline{\tilde{\psi}_1(n)}, \quad \tilde{\psi}_2(n) = -\tilde{\psi}_2(-n) = -\overline{\tilde{\psi}_2(n)}.$$

Следовательно, справедливо разложение (13).

Для определения нормировочных констант C_i существует несколько методов. Например, можно построить глобальные асимптотики в p -представлении, используя правила перехода через простую точку поворота, предложенные в работе [43]. С другой стороны, нормировочные константы можно найти, переходя из x - в p -представление. Состояния $\psi_{1,2}$ в x -представлении нормированы и имеют вид

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1(x) + \varphi_2(x)), \quad \psi_2(x) = \frac{1}{i\sqrt{2}}(\varphi_1(x) - \varphi_2(x)). \quad (15)$$

Переходя в p -представление, получаем

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_1(n) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1(x) + \varphi_2(x)) e^{-inx} dx, \\ \tilde{\psi}_2(n) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{1}{i\sqrt{2}}(\varphi_1(x) - \varphi_2(x)) e^{-inx} dx. \end{aligned} \quad (16)$$

Получим асимптотику интегралов (16), используя формулы (3) для $\varphi_{1,2}(x)$. Подынтегральное выражение в (16) быстро осциллирует, а стационарные точки фазы становятся комплексными, если импульс $p = n\hbar$ отвечает классически запрещенной

зоне. Применяя метод перевала [37], получаем

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_1(n) = & \sqrt{\frac{\omega\hbar}{4\pi\gamma}} \left(\left(\frac{E}{\gamma} - \frac{(n\hbar)^2}{2\gamma} \right)^2 - 1 \right)^{-1/4} \times \\ & \times \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{n\hbar}^{p_0} \operatorname{arcch} \left(\frac{E}{\gamma} - \frac{p^2}{2\gamma} \right) dp \right) [1 + O(\hbar)]. \end{aligned} \quad (17)$$

Поскольку комплексный контур интегрирования, возникающий в методе перевала, должен лежать в области применимости асимптотик (3), асимптотика (17) справедлива для n таких, что

$$\varepsilon < \hbar n < \sqrt{2(E - \gamma)} - \varepsilon.$$

Согласуя асимптотические формулы (13) и (17), получаем выражение для C_1 . Формулу для C_2 можно получить аналогично. Предложение доказано.

Подставляя асимптотику состояний $\tilde{\psi}_{1,2}$ в (9), получаем итоговую формулу для величины туннельного расщепления энергий квантового маятника:

$$\Delta = -\frac{\omega\hbar}{\pi} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{-p_0}^{p_0} \operatorname{arcch} \left(\frac{E}{\gamma} - \frac{p^2}{2\gamma} \right) dp \right) [1 + O(\hbar)]. \quad (18)$$

Знак минус в данной формуле показывает, что четное состояние $\psi_1(x)$ обладает большей энергией, чем нечетное состояние $\psi_2(x)$, что согласуется с общей теорией уравнения Хилла с четным потенциалом.

Интеграл в показателе экспоненты в (18) можно переписать иначе. Например, если от $x \, dp$ перейти к $p \, dx$, получим

$$\Delta = -\frac{\omega\hbar}{\pi} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{-\operatorname{arcch}(E/\gamma)}^{\operatorname{arcch}(E/\gamma)} \sqrt{2(E - \gamma \operatorname{ch} x)} \, dx \right) [1 + O(\hbar)], \quad (19)$$

где $\sqrt{2(E - \gamma \operatorname{ch} x)}$ – туннельный импульс, т. е. классический импульс

$$p = \sqrt{2(E - V(x))}$$

при чисто мнимых значениях координаты x . Таким образом, интеграл в соотношении (18) берется по инстантону, т. е. путь, который лежит в комплексифицированном лагранжевом многообразии $p^2/2 + V(x) = E$ и соединяет две классические траектории движения. Точки $\pm p_0$ – это конец и начало инстантона, они лежат на классических траекториях движения с положительным и отрицательным импульсами соответственно (см. работу [28]).

Благодарности. Автор благодарен М. В. Карасеву за постановку задачи, плодотворные обсуждения и помощь в подготовке статьи. Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 12-01-00627_а).

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] E. M. Harrell, *Commun. Math. Phys.*, **75**:3 (1980), 239–261.
- [6] С. Ю. Доброхотов, В. Н. Колокольцов, В. П. Маслов, *ТМФ*, **87**:3 (1991), 323–375.
- [7] J. Brüning, S. Yu. Dobrokhoto, E. S. Semenov, *Regul. Chaotic Dyn.*, **11**:2 (2006), 167–180.
- [8] Е. В. Выборный, *ТМФ*, **178**:1 (2014), 107–130.
- [9] B. Helffer, J. Sjöstrand, *Commun. Partial Differ. Equ.*, **9** (1984), 337–408.
- [10] B. Helffer, J. Sjöstrand, *Ann. Inst. H. Poincaré Phys. Théor.*, **42**:2 (1985), 127–212.
- [11] B. Helffer, J. Sjöstrand, *Math. Nachr.*, **124** (1985), 263–313.
- [12] R. L. Jaffe, *Amer. J. Phys.*, **78** (2010), 620–623.
- [13] N. T. Maitra, E. J. Heller, *Phys. Rev. A*, **54**:6 (1996), 4763–4769.
- [14] M. J. Davis, E. J. Heller, *J. Chem. Phys.*, **75**:1 (1981), 246–254.
- [15] W. K. Hensinger, H. Häffner, A. Browaeys, N. R. Heckenberg, K. Helmerson, C. McKenzie, G. J. Milburn, W. D. Phillips, S. L. Rolston, H. Rubinsztajn-Dunlop, B. Upcroft, *Nature*, **412**:6842 (2001), 52–55.
- [16] J. Le Deunff, A. Mouchet, *Phys. Rev. E*, **81**:4 (2010), 046205, 18 pp.
- [17] J. Brüning, S. Yu. Dobrokhoto, K. V. Pankrashkin, *Russ. J. Math. Phys.*, **9**:1 (2002), 14–49.
- [18] Й. Брюнинг, С. Ю. Доброхотов, Р. В. Некрасов, *ТМФ*, **175**:2 (2013), 206–225.
- [19] S. Yu. Dobrokhoto, A. Yu. Anikin, “Tunneling, Librations and Normal Forms in a Quantum Double Well with a Magnetic Field”, *Nonlinear Physical Systems: Spectral Analysis, Stability and Bifurcations*, eds. O. N. Kirillov, D. E. Pelinovsky, John Wiley & Sons, New York, 2014, 85–110.
- [20] A. Fedotov, F. Klopp, *Ann. Sci. École Norm. Sup. (4)*, **38**:6 (2005), 889–950, arXiv: math-ph/0502039.
- [21] A. Fedotov, F. Klopp, *Mém. Soc. Math. Fr. (N.S.)*, **104** (2006), 1–108, arXiv: math-ph/0408006.
- [22] M. S. P. Eastham, *The Spectral Theory of Periodic Differential Equations*, Scottish Academic Press, Edinburgh; Hafner Press, New York, 1973.
- [23] W. Magnus, S. Winkler, *Hill’s Equation*, Interscience Tracts in Pure and Applied Mathematics, **20**, John Wiley & Sons, New York, 1966.
- [24] E. U. Condon, *Phys. Rev.*, **31**:5 (1928), 891–894.
- [25] А. М. Дыхне, *ЖЭТФ*, **40**:5 (1961), 1423–1426.
- [26] С. Г. Симонян, *Диффер. уравнения*, **6**:7 (1970), 1265–1272.
- [27] М. В. Федорюк, *Асимптотические методы для линейных обыкновенных дифференциальных уравнений*, Наука, М., 1983.
- [28] S. Yu. Dobrokhoto, A. I. Shafarevich, *Math. Phys. Anal. Geom.*, **2**:2 (1999), 141–177.
- [29] M. E. Harrell, *Amer. J. Math. Suppl.*, 1981, 139–150.
- [30] J. Avron, B. Simon, *Ann. Phys.*, **134** (1981), 76–84.
- [31] J. Pöschel, *Math. Ann.*, **349**:2 (2011), 433–458.
- [32] E. Trubowitz, *Commun. Pure Appl. Math.*, **30**:3 (1977), 321–337.

- [33] H. Hochstadt, *Proc. Amer. Math. Soc.*, **14** (1963), 930–932.
- [34] C. Herring, *Rev. Modern Phys.*, **34**:4 (1962), 631–645.
- [35] Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Теоретическая физика*, т. 9: *Статистическая физика. Часть 2. Теория конденсированного состояния*, Наука, М., 1978.
- [36] В. П. Маслов, *Операторные методы*, Наука, М., 1973.
- [37] М. В. Федорюк, *Метод перевала*, Наука, М., 1977.
- [38] В. Л. Покровский, С. К. Саввиных, Ф. Р. Улинич, *ЖЭТФ*, **34**:5 (1958), 1272–1277.
- [39] В. Л. Покровский, С. К. Саввиных, Ф. Р. Улинич, *ЖЭТФ*, **34**:6 (1958), 1629–1631.
- [40] В. Л. Покровский, И. М. Халатников, *ЖЭТФ*, **40**:6 (1961), 1713–1719.
- [41] M. Leibscher, B. Schmidt, *Phys. Rev. A*, **80**:1 (2009), 012510, 16 pp.
- [42] M. Ayub, K. Naseer, M. Ali, F. Saif, *J. Russ. Laser Res.*, **30**:3 (2009), 205–223.
- [43] П. А. Браун, *ТМФ*, **37**:3 (1978), 355–370.
- [44] А. Б. Васильева, “О соответствии между некоторыми свойствами решений линейных разностных систем и обыкновенных дифференциальных уравнений”, *Труды семинара по теории дифференциальных уравнений с отклоняющимся аргументом*, **5**, Изд-во УДН, М., 1967, 21–44.
- [45] J. S. Geronimo, D. T. Smith, *J. Approx. Theory*, **69**:3 (1992), 269–301.

Поступила в редакцию 17.07.2014