Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. Ю. Аникин, С. Ю. Доброхотов, М. И. Кацнельсон,
Нижняя часть спектра двумерного оператора Шредин-
гера с периодическим по одной переменной потенциа-
лом и приложения к квантовым димерам, *ТМФ*, 2016,
том 188, номер 2, 288–317

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf9135>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru под-
разумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.209.52.79

26 апреля 2023 г., 16:52:06

© 2016 г.

А. Ю. Аникин^{*†‡}, С. Ю. Доброхотов^{*†},
М. И. Кацнельсон^{§¶}

НИЖНЯЯ ЧАСТЬ СПЕКТРА ДВУМЕРНОГО ОПЕРАТОРА ШРЕДИНГЕРА С ПЕРИОДИЧЕСКИМ ПО ОДНОЙ ПЕРЕМЕННОЙ ПОТЕНЦИАЛОМ И ПРИЛОЖЕНИЯ К КВАНТОВЫМ ДИМЕРАМ

Изучается квазиклассическая асимптотика спектра двумерного оператора Шредингера с потенциалом, периодическим по переменной x и растущим на бесконечности по переменной y . Показано, что нижняя часть спектра имеет зонную структуру, причем некоторые зоны могут перекрываться. Вычислены размеры этих зон и найдены дисперсионные соотношения, связывающие энергию и квазиимпульс. Ключевую роль в полученных асимптотиках играют либрации – неустойчивые периодические траектории гамильтоновой системы с перевернутым потенциалом. Предложен эффективный численный алгоритм расчета размеров зон. Изучаются приложения полученных формул к задаче о квантовых димерах.

Ключевые слова: периодический оператор Шредингера, спектр, туннельный эффект, спектральные зоны, дисперсионные соотношения.

DOI: 10.4213/tmf9135

1. ВВЕДЕНИЕ

Эта работа посвящена изучению спектра оператора Шредингера

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{y^2}{2} - \alpha \cos \beta x \cos(y - y_0) \quad (1)$$

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты № 14-01-00521, 15-01-03747).

^{*}Институт проблем механики им. А. Ю. Ишлинского РАН, Москва, Россия.
E-mail: anikin83@inbox.ru, dobr@ipmnet.ru

[†]Московский физико-технический институт, Москва, Россия

[‡]Московский технический университет им. Н. Э. Баумана, Москва, Россия

[§]Institute for Molecules and Materials, Radboud University, Nijmegen, The Netherlands.
E-mail: M.Katsnelson@science.ru.nl

[¶]Уральский федеральный университет им. Первого Президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

в квазиклассическом приближении $\hbar \rightarrow +0$. Здесь $\alpha, \beta > 0$, $y_0 \pmod{2\pi}$ – параметры. Оператор (1) служит упрощенной моделью для исследования квантовых эффектов при одномерном движении двухатомной молекулы по поверхности твердого тела [1]. Для краткости ниже мы будем называть такую систему квантовым димером.

С другой стороны, оператор (1) дает пример достаточно простой двумерной квантовой системы с потенциалом, периодическим по одной переменной и растущим на бесконечности по другой. Такие системы, в отличие от систем с периодическим на решетке потенциалом (см. [2]), мало изучались в математической литературе. Переменные в соответствующей спектральной задаче не разделяются, что делает ее нетривиальной, однако асимптотические методы позволяют эффективно вычислить некоторые ее спектральные характеристики.

Цель этой работы – исследование нижней части спектра оператора $\hat{H}$. А именно, нас будут интересовать значения энергии, которые лежат вблизи минимума потенциала и отвечают блоховским функциям по переменной x , т.е. таким, что $\psi(x + 2\pi/\beta, y) = e^{2\pi i q} \psi(x, y)$. Вещественный параметр $q \pmod{1}$ называется квазиимпульсом.

Связь оператора (1) с квантовыми димерами следующая. Оператор Шредингера, описывающий квантовый димер,двигающийся по периодической одномерной подложке, имеет вид [1]

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) + \frac{K^2}{2} (x_2 - x_1 - l)^2 + U_0 (2 - \cos kx_1 - \cos kx_2),$$

где m – масса, K^2 – жесткость, U_0 – глубина потенциального рельефа, $2\pi/k$ – период потенциала подложки, l – равновесное расстояние между атомами в молекуле. Используя новые координаты $x = k(x_1 + x_2)/2$, $y = k(x_2 - x_1 - l)/2$ и вводя новые параметры $\alpha = U_0 k^2 / 2K^2$, $\hbar^2 = k^4 \hbar^2 / 8mK^2$, $y_0 = -kl/2$, мы можем написать $\hat{\mathcal{H}} = (K^2/k^2) \hat{H} + 2U_0$, где $\hat{H}$ имеет вид (1) с $\beta = 1$.

Заменяя квантовые импульсы (операторы) $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, $-i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$ на классические p_x , p_y , получим соответствующий (1) классический гамильтониан

$$H = \frac{1}{2} (p_x^2 + p_y^2) + U(x, y), \quad U = \frac{y^2}{2} - \alpha \cos \beta x \cos(y - y_0), \quad (2)$$

где конфигурационным пространством будет цилиндр:

$$Z = \left\{ x \left(\pmod{\frac{2\pi}{\beta}} \right), y \in \mathbb{R} \right\}.$$

Подчеркнем, что эта гамильтонова система неинтегрируема, более того, существуют такие области в фазовом пространстве, где поведение ее траекторий хаотично (см. [1]). В силу хорошо известного соответствия между свойствами классических и квантовых систем большая часть спектра оператора $\hat{H}$, по-видимому, также имеет весьма сложную и нерегулярную структуру. Тем не менее структура нижней части спектра – основное и слабозвужденные состояния – вполне регулярна и состоит из зон и лакун, которые с учетом наличия малого параметра $\hbar$ в задаче могут быть описаны с помощью достаточно явных асимптотических формул.

Рис. 1. Точки глобального минимума функции U . Горизонтальная ось – ось x , вертикальная – ось y .

Потенциал U вблизи точки глобального минимума $(\tilde{x}, \tilde{y})$ приближенно может быть заменен потенциалом гармонического осциллятора, что позволяет найти дискретный набор точек

$$E_{mn} = U_{\min} + \omega_1 h \left(\frac{1}{2} + m \right) + \omega_2 h \left(\frac{1}{2} + n \right) + O(h^2), \quad m, n \in \mathbb{Z}_+, \quad (3)$$

где $U_{\min} = U(\tilde{x}, \tilde{y})$, а ω_1, ω_2 – частоты малых колебаний, т. е. квадратные корни из собственных значений матрицы вторых производных $d^2 U(\tilde{x}, \tilde{y})$.

В силу периодичности потенциала спектр оператора (1) непрерывен, и точки (3) определяют положение спектральных зон. Длины таких зон экспоненциально малы при $h \rightarrow 0$, и приближение гармонического осциллятора их не описывает; здесь нужно учитывать туннельные эффекты. Отметим, что точки глобального минимума потенциала U зависят от параметров α, β, y_0 . Следовательно, зонная структура спектра оператора (1) тоже зависит от этих параметров.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 1. Множество точек глобального минимума функции $U(x, y)$ на цилиндре Z может состоять из одной точки или двух точек. Именно, имеют место следующие случаи.

Случай 1. Если $|y_0| < \pi/2$, имеется единственная точка глобального минимума $x = 0, y = y_*$, где y_* – ближайшее к нулю решение уравнения $y + \alpha \sin(y - y_0) = 0$. Если $\pi/2 < |y_0| \leq \pi$, то также имеется единственная точка глобального минимума $x = \pi/\beta, y = y_*$, где y_* – ближайшее к нулю решение уравнения $y - \alpha \sin(y - y_0) = 0$.

Случай 2. Если $y_0 = \pi/2$ или $y_0 = -\pi/2$, то имеются две точки глобального минимума $(0, y_*)$ и $(\pi/\beta, -y_*)$, где y_* – ближайшее к нулю решение уравнения $y - \alpha \cos y = 0$ или $y + \alpha \cos y = 0$ соответственно.

Доказательство предложения 1 приводится в приложении А.

ЗАМЕЧАНИЕ 1. Ясно, что случай 1 – это случай общего положения. В обоих случаях потенциал обладает осевой симметрией: $U(-x, y) = U(x, y)$. В случае 2 есть еще и дополнительная центральная симметрия $U(\pi - x, -y) = U(x, y)$. Выделим особо случай 0, когда $y_0 = 0$ или $y_0 = \pi$.

Предложение 1 проиллюстрировано на рис. 1 (для $\beta = 1$).

Оказывается, что структура нижней части спектра следующая. В случае 1 каждому *квантовому вектору* $(m, n) \in \mathbb{Z}_+^2$ соответствует одна спектральная зона, состоящая из значений E , отвечающих блоховским по переменной x функциям. Более того, каждому значению квазиимпульса q отвечает ровно одно значение E , и, таким образом, определена функция $E = E_{mn}(q)$, называемая *дисперсионным соотношением*. В случае 2 каждому квантовому вектору соответствуют уже две аналогичные зоны.

Простое объяснение этому факту можно дать, рассмотрев пример, где переменные разделяются:

$$\tilde{U} = \alpha(1 - \cos x) + V(y). \quad (4)$$

В п. 2.2 мы рассмотрим два случая: $V = y^2/2$ (случай А) и $V = (y^2 - a^2)^2/2$ (случай Б), похожие на случаи 1 и 2 соответственно. Мы легко убедимся, что в случае А каждому квантовому вектору отвечает одна зона, а в случае Б – две.

Задачи вычисления длин зон и нахождения дисперсионных соотношений совсем не тривиальны, и мы представим в этой работе два подхода к их решению. Математически аккуратный подход сводит вопрос к задаче с потенциалом с несколькими ямами на цилиндре, для которой уже применима теория Элффера–Сёстранда (см. [3]). Этот подход работает в случае рациональных квазиимпульсов q . Другой метод [4], представляющий собой многомерное обобщение метода, описанного в [5], [6], позволяет выводить правильные формулы на физическом уровне строгости (в дальнейшем мы будем называть его методом или подходом Герринга). В то же время последний подход представляется полезным ввиду своей простоты. Мы будем использовать его для объяснения “на пальцах” вида дисперсионных соотношений в случае 1.

Отметим, что рассматриваемая периодическая задача очень близка к задаче о расщеплении спектра для потенциала с двумя симметричными ямами, которая подробно изучалась в работах [3], [7]–[11]. В обоих случаях исследование квазиклассических экспоненциально малых (или туннельных) эффектов приводит к гамильтоновой системе: $H = (p_x^2 + p_y^2)/2 - U(x, y)$ с “перевернутым” потенциалом. Важную роль играют специальные траектории такой гамильтоновой системы, называемые инстантонами и либрациями. В одномерном случае инстантон – это сепаратриса или двоякоасимптотическое движение, отвечающее минимуму потенциала $U(x, y)$, а либрация – это периодическая траектория, лежащая вблизи инстантона. Аналогичные объекты возникают и в многомерном, в частности двумерном, случае, однако их существование уже не так очевидно (см. ниже раздел 3).

Асимптотика расщепления нижних собственных значений в задаче с симметричной двойной ямой может быть записана в двух видах: “через инстантон” [8], [9] или “через либрацию” [10], [11]. В показателе экспоненты записывается механическое действие соответственно на инстантоне или на либрации. В свою очередь, предэкспоненциальный множитель выражается в терминах движений, трансверсальных к инстантону либо либрации. Важно отметить, что хотя две формулы эквивалентны – переход от одной к другой представляет собой задачу из классической механики, вид предэкспоненциального множителя в записи “через инстантон” значительно хуже. Он привязывается к задаче рассеяния для уравнения в вариациях – краевой

задаче с условиями на бесконечности. Использование такой формулы в практических расчетах ведет к трудоемким вычислениям. В случае очень большой размерности этот метод оказывается вовсе неприменим из-за так называемой проблемы детерминантов [12]. Ввиду своей громоздкости (особенно в многомерном случае) формула расщепления “через инстантон” здесь приводиться не будет (читатель может ее найти в работе [8]).

С другой стороны, формула для расщепления “через либрацию” (см. [10], [11]) значительно проще:

$$\Delta E = b \frac{\omega \hbar}{\pi} e^{-S/\hbar} (1 + O(\hbar)).$$

Здесь S – действие на некоторой либрации, называемой *туннельной*, ω – одна из частот гармонических колебаний, а b – некоторая универсальная (не зависящая от потенциала) константа. (Более точные формулировки последуют ниже.) В одномерном случае туннельная либрация – это либрация, отвечающая энергии данного состояния. В многомерном случае это уже неверно, и туннельная либрация находится из неявного уравнения, которое апеллирует к инвариантному объекту – показателю Флоке либрации. Эта формула проста и эстетична, что с физической точки зрения отражает тот факт, что нулевая энергия не имеет смысла в квантовой механике, в отличие от энергии нижнего состояния. Отметим также сходство данной формулы с формулой Ландау–Лифшица (см. [5], разд. VII.50, задача 3) для верхних уровней одномерной задачи.

В настоящей работе будет показано, как записывать асимптотики “через либрацию” для длин зон и дисперсионных соотношений в двумерной периодической задаче. Также будет предложен эффективный численный алгоритм для практической реализации этих асимптотик. Для случая двойной ямы схожие вычисления проводились в работе [13].

Работа имеет следующую структуру. В разделе 2 мы напоминаем хорошо известные факты о структуре нижней части спектра одномерного периодического оператора Шредингера и переписываем дисперсионные соотношения для нижних спектральных зон “через либрацию”. Затем исследована структура спектра и дисперсионные соотношения для случаев А и Б. Раздел 3 посвящен описанию инстантонов и либраций в двумерной периодической задаче.

Основной результат приведен в разделе 4, именно: в теоремах 3, 4 и 5 описаны дисперсионные соотношения (в частности, длины зон) для случаев 1 и 2.

Раздел 5 посвящен численным расчетам длин зон. В разделе 6 показано, как вывести дисперсионные соотношения в случае 1 с помощью подхода Герринга. В разделе 7 изложен метод матрицы взаимодействия Элффера–Сёстранда. В разделе 8 доказаны теоремы из раздела 4, а также выведены дисперсионные соотношения “через либрацию” для нижней зоны в одномерном случае (теорема 1) без требования зеркальной симметрии $x \rightarrow -x$.

2. ПРИМЕРЫ С РАЗДЕЛЕНИЕМ ПЕРЕМЕННЫХ

В этом разделе мы изучим спектральные зоны и дисперсионные соотношения в случаях А и Б. Для начала напомним структуру спектра одномерной периодической задачи.

2.1. Одномерная периодическая задача Штурма–Лиувилля. Рассмотрим одномерную периодическую задачу (уравнение Матье):

$$\hat{H}_1 \Phi = \mathcal{E} \Phi, \quad \hat{H}_1 = -\frac{h^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + v(x), \quad v(x) = \frac{\omega_1^2}{2} (1 - \cos x). \quad (5)$$

Спектр $\hat{H}_1$ состоит из тех значений $\mathcal{E}$, которым соответствуют нетривиальные решения Φ , ограниченные на $\mathbb{R}$. Известно, что спектр положителен и состоит из зон $[\mathcal{E}_m^-, \mathcal{E}_m^+]$, $m = 0, 1, \dots$, разделенных лакунами $(\mathcal{E}_m^+, \mathcal{E}_{m+1}^-)$ (см. [2]). Собственное подпространство, соответствующее каждому значению $\mathcal{E} \in [\mathcal{E}_m^-, \mathcal{E}_m^+]$, порождается блоховскими решениями $\Phi^m(x, q)$, т. е. решениями со свойством

$$\Phi^m(x + 2\pi, q) = e^{2\pi i q} \Phi^m(x, q), \quad (6)$$

где число $q \in [0, 1)$ – квазиимпульс. Если $q = 0$ или $q = 1/2$, то собственное подпространство одномерно и состоит из вещественнозначных периодических функций $\Phi^m(x, 0)$ или антипериодических функций $\Phi^m(x, 1/2)$. Для остальных q оно двумерно и порождено функциями $\Phi^m(x, q)$ и $\Phi^m(x, 1 - q) \equiv \overline{\Phi^m(x, q)}$.

Все эти свойства имеют место без предположения о малости параметра h . Теперь изучим подробнее нижние спектральные зоны при $h \rightarrow 0$. Для грубого описания этих зон и собственных функций можно использовать приближение гармонического осциллятора около точки $x_k = 2\pi k$. Тогда m -я зона расположена вблизи энергии $\mathcal{E}_m(q) = h\omega_1(1/2 + m) + O(h^2)$.

Построим функции $w_m(x) = \mathbf{H}_m(\omega_1 x / \sqrt{h}) e^{-\omega_1 x^2 / 2h}$, а также $w_m^k(x) = C_m w_m(x - x_k)$, где $\mathbf{H}_m$ – полиномы Эрмита, а C_m – нормировочные константы. Каждая функция w_m^k локализована в окрестности точки x_k . Грубое приближение к блоховской функции имеет вид

$$\tilde{\Phi}^m(x, q) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} w_m^k(x) e^{2\pi i k q}. \quad (7)$$

Тем самым, каждая функция $\tilde{\Phi}^m(x, q)$ локализована в окрестности набора точек x_k и определяет так называемую “степенную” асимптотику по параметру h : справедливо равенство $(\hat{H}_1 - \mathcal{E})\tilde{\Phi}^m(x, q) = O(h^{3/2})$.

Асимптотика такого типа не позволяет найти экспоненциально малую длину зоны, а также зависимость $\mathcal{E}_m(q)$. Вместо этого нужно использовать более точные асимптотики типа ВКБ, заменяя w_m следующими функциями:

$$w_m(x) = A_m(x, h) e^{-\theta(x)/h}, \quad \theta(x) = \left| \int_{x_k}^{x_k+x} \sqrt{2v(z)} dz \right|. \quad (8)$$

Таким образом, $\theta(x)$ – значение действия Мопертюи–Якоби вдоль инстантона (см. рис. 2). Амплитуда $A_m(x, h)$ – гладкая функция, которая находится из уравнения переноса, близкая к $\mathbf{H}_m(\omega_1(x - x_k)/\sqrt{h})$ около x_k . Заметим, что сумма (7) есть известное представление блоховских функций через функции Ванье, а равенство (8) определяет асимптотику функции Ванье.

Оказывается, что если главный член функции $A_m(x, h)$, а также $\theta(x)$ из асимптотики (8) известны на отрезке $[-\pi, \pi]$, то длина зоны и дисперсионные соотношения

Рис. 2. Вверху – график перевернутого потенциала $-v(x)$. Внизу – фазовый портрет, т.е. линии уровня функции $p^2/2 - v(x) = E$ на фазовой плоскости. Значению $E = 0$ отвечает инстантон, значению $E = -\mathcal{E}_m$ отвечают либрации. Функция $\theta(x)$ – площадь под графиком инстантона, $S_m(h)$ – половина площади области, ограниченной либрацией с энергией $E = \mathcal{E}_m$.

могут быть легко найдены. Более подробно эти выкладки мы обсудим ниже, а здесь лишь сформулируем окончательный результат.

Пусть $S_m(h)$ – действие Мопертью–Якоби вдоль либрации с полной энергией $E = -\mathcal{E}_m$ (см. рис. 2), т.е.

$$S_m(h) = \int_{x_-(h,m)}^{x_+(h,m)} \sqrt{2v(x) - h\omega_1(2m+1)} dx, \quad (9)$$

где $x_{\pm}(h, m)$ – точки из интервала $x_k < x_-(h, m) < x_+(h, m) < x_{k+1}$, в которых подынтегральная функция в (9) обращается в нуль.

ТЕОРЕМА 1. Для спектра оператора (5) справедлива асимптотика

$$\mathcal{E}_m(q) - \mathcal{E}_m(0) = (-1)^m b_m \frac{\omega_1 h}{\pi} e^{-S_m(h)/h} (1 - \cos 2\pi q) (1 + o(1)), \quad (10)$$

где b_m – константы, не зависящие от потенциала (см. ниже (17)).

Кривая дисперсионных соотношений на плоскости (E, q) изображена на рис. 3.

ЗАМЕЧАНИЕ 2. Формула (10) по виду схожа с формулой Ландау–Лифшица для асимптотики размеров верхних зон периодической одномерной задачи (см. [6], разд. VI. 55, задача 3). Дисперсионные соотношения для нижних зон, записанные “через инстантон”, хорошо известны из работ [14].

ЗАМЕЧАНИЕ 3. В разделе 6 формула (10) выводится методом Герринга. В разделе 8 приводится аккуратное доказательство методом Элффера–Сёстранда. Заметим, что преимущество второго подхода состоит еще и в том, что он работает в случае отказа от симметрии $x \rightarrow -x$.

2.2. Случаи А и Б. Случай А. Легко видеть, что спектр оператора $\hat{H}$ может быть представлен в виде $E = E_{mn}(q) = \mathcal{E}_m(q) + \tilde{\mathcal{E}}_n$, где $\tilde{\mathcal{E}}_n = h\omega_2(n + 1/2)$, и $\mathcal{E}_m(q)$ – зонный спектр одномерного периодического оператора Штурма–Лиувилля. Здесь

Рис. 3. Дисперсионные соотношения: квазиимпульсы и энергия. Концы зон соответствуют периодическим или антипериодическим блоховским функциям.

$m = 0, 1, \dots$ – номера зон, а $q \pmod{1}$ – квазиимпульс. Собственные функции Φ оператора $\hat{H}$ – это произведения $\Phi^m(x, q)\tilde{\Phi}^n(y)$ собственных функций $\tilde{\Phi}^n(y)$ гармонического осциллятора и блоховских функций $\Phi^m(x, q)$ (см. структуру спектра на рис. 4а).

Таким образом, спектр состоит из зон. При дополнительном условии нерезонансности (т.е. если ω_1 и ω_2 рационально независимы) зоны не пересекаются для достаточно малых h .

Случай Б. Теперь $V(y)$ – потенциал вида симметричной двойной ямы. Соответствующий одномерный оператор Шредингера был изучен в большом количестве работ (см. [3], [14]–[16]). Его спектр дискретен, и собственные числа, лежащие около минимумов потенциала, распадаются на совпадающие асимптотически при $h \rightarrow 0$ пары значений $\tilde{\mathcal{E}}_n^\pm$. Главный член их асимптотических разложений определяется приближением гармонического осциллятора, а разница между этими значениями (расщепление) экспоненциально мала:

$$\tilde{\mathcal{E}}_n^\pm = \omega_2 h \left(n + \frac{1}{2} \right) + O(h^2), \quad \tilde{\mathcal{E}}_n^+ - \tilde{\mathcal{E}}_n^- = \tilde{Q}_n(1 + o(1)), \quad h \rightarrow 0.$$

ЗАМЕЧАНИЕ 4. На самом деле главный член $\tilde{Q}_n$ имеет форму, похожую на правую часть в (10) с соответствующими изменениями (см. [15], [3]).

Следовательно, спектр в случае Б имеет вид $E = E_{nm}(q) = \tilde{\mathcal{E}}_n^\pm + \mathcal{E}_m(q)$. Как и в случае А он состоит из зон, которые теперь уже могут пересекаться (если расщепление $\tilde{\mathcal{E}}_n^+ - \tilde{\mathcal{E}}_n^-$ достаточно мало по сравнению с длиной зоны $\mathcal{E}_m(1/2) - \mathcal{E}_m(0)$) (см. структуру спектра на рис. 4б).

Рис. 4. Спектры в случаях А (а) и Б (б). Зоны спектра одномерного периодического оператора показаны на горизонтальной оси. На вертикальных осях показаны дискретные спектры гармонического осциллятора в случае А и оператора с потенциалом $V(y)$ типа двойной ямы в случае Б. В обоих случаях отрезки получаются суммированием соответствующих значений на двух осях. Спектр двумерного оператора получается проецированием этих отрезков на горизонтальную ось.

Как было отмечено выше, структура спектра в случае 1 близка к случаю А, а случай 2 похож на случай Б. Укажем, однако, на одно существенное различие между случаями Б и 2. Из-за более богатой симметрии в случае 2 имеет место точное вырождение спектра для некоторых значений энергии. Именно, оказывается, что концы зон, соответствующие $q = 1/2$, совпадают (точно). Такого эффекта, вообще говоря, нет в случае Б, где можно лишь найти условия для “асимптотического”, но не точного вырождения.

3. ИНСТАНТОНЫ И ЛИБРАЦИИ В ДВУМЕРНОЙ ЗАДАЧЕ

Всюду в этом разделе мы работаем со следующей классической системой, которую естественно называть туннельной. Это лагранжева система $L = T + U$ с перевернутым потенциалом $V = -U$ и стандартной кинетической энергией $T = (\dot{x}^2 + \dot{y}^2)/2$. Конфигурационное пространство Z есть цилиндр $x \pmod{2\pi/\beta}$, $y \in \mathbb{R}$. Такая система эквивалентна системе Ньютона: $\ddot{x} = \partial U/\partial x$, $\ddot{y} = \partial U/\partial y$.

Зафиксируем некоторое значение энергии E . Обозначим через V_E область классически допустимых движений с энергией E : $V_E = \{x \in Z: V(x) \leq E\}$. В дальнейшем для нас представляют интерес особые траектории туннельной системы, достигающие границы ∂V_E , а именно: 1) либрации, т. е. периодические траектории с энергией E , достигающие ∂V_E дважды за период; 2) инстантоны – двоякоасимптотические (гомоклинические или гетероклинические) траектории, соединяющие два неустойчивых равновесия, отвечающих максимумам функции V . (Напомним, что решение называется гомоклиническим, если оно стремится к одной и той же точке, когда $t \rightarrow \pm\infty$, и гетероклиническим – если стремится к разным точкам.)

С первого взгляда вопрос о существовании инстантонов и либраций напоминает известную задачу о замкнутых геодезических на римановом многообразии. Вопрос существования таких геодезических решается в рамках теории Морса (см. [17]). Эти

Рис. 5. Инстантоны в случаях 0 (а), 1 (б), 2 (в). Вертикальные сплошные линии – $x = 2\pi n/\beta$, вертикальные штриховые линии – оси симметрии $x = (2n+1)\pi/\beta$. Горизонтальные пунктирные линии – это линии, задаваемые равенствами $y = \pm y_*$. г – Инстантон изображен жирной линией, либрация – тонкой. Штриховые линии – две компоненты линии уровня потенциала.

результаты, однако, напрямую к задаче нахождения либраций (а также инстантонов) неприменимы, поскольку либрации доходят до границы V_E , где метрика вырождается.

ТЕОРЕМА 2 [18], [19]. Пусть M – компакт, и V_E не содержит положений равновесия. Пусть $V_E/\partial V_E$ – топологическое факторпространство (т. е. пространство, полученное из V_E стягиванием ∂V_E в точку). Тогда число различных либраций не превосходит числа образующих фундаментальной группы $\pi(V_E/\partial V_E)$.

ЗАМЕЧАНИЕ 5. Формально в нашем случае предположение о компактности нарушено. Это препятствие, однако, легко преодолевается возмущением потенциала при больших y и затем компактификацией цилиндра Z .

ЗАМЕЧАНИЕ 6. Точно такой же подход позволяет доказывать существование гомоклинических и гетероклинических траекторий. Разница состоит лишь в локальном анализе вблизи максимумов функции V (см. [18], [19]).

Напомним, что действие Мопертюи–Якоби вдоль траектории γ лагранжевой системы $L = T + U$ с энергией $-E$ определяется следующим образом:

$$d = \int_{\gamma} \sqrt{2(U(x) - E)} ds.$$

Здесь $ds^2 = dx^2 + dy^2$ – стандартная евклидова метрика. Ниже под действием мы всегда будем понимать действие Мопертюи–Якоби. Метрика $\sqrt{2(U(x) - E)} ds$ называется метрикой Якоби (или метрикой Агмона в квазиклассическом контексте).

На самом деле либрации и инстантоны, о которых идет речь в теореме 2, представляют собой кратчайшие пути между соответствующими компонентами связности множества ∂V_E относительно метрики Якоби.

Вернемся к туннельной классической системе. В случае 0 имеется только одна яма z_1 , система имеет инвариантную плоскость $y = \dot{y} = 0$, и, следовательно, инстантон и либрации суть решения одномерной задачи. В этом простом случае теоремой 2 можно и не пользоваться. Ясно, что либрации и инстантон существуют и проецируются на линию $y = 0$ в конфигурационном пространстве (см. рис. 5а).

В случае 1 также имеется единственная яма z_1 на цилиндре Z . Но ситуация здесь становится более сложной по сравнению со случаем 0, и найти инстантоны и либрации аналитически уже не удастся. Группа $\pi(V_E/\partial V_E)$ изоморфна группе целых

чисел $\mathbb{Z}$, ее образующая представляет из себя нестягиваемый цикл на цилиндре. По теореме 2 этот цикл определяет инстантон – гомоклиническую к z_1 траекторию (см. рис. 5б), и семейство аналогичных либраций, охватывающих цилиндр.

Инстантоны и либрации допускают симметрию $x \rightarrow -x$, и, следовательно, они пересекают линию симметрии под прямым углом. Отметим также, что инстантоны и либрации, вообще говоря, не проецируются на одну и ту же кривую в конфигурационном пространстве (см. рис. 5г).

В случае 2 потенциал обладает помимо осевой симметрии $x \rightarrow -x$ еще и центральной симметрией $y \rightarrow -y$, $x \rightarrow \pi/\beta - x$. Как следует из предложения 1, потенциал имеет две ямы z_1 и z_2 , и пространство $V_E/\partial V_E$ гомотопически эквивалентно цилиндру с ручкой (соединяющей z_1 и z_2). Тогда $\pi(V_E/\partial V_E)$ – свободная группа с двумя образующими. Согласно теореме 2 существует гетероклинический инстантон, соединяющий z_1 и z_2 . Благодаря осевой симметрии мы немедленно получаем другой инстантон (они изображены сплошными линиями на рис. 5в). Они соответствуют двум независимым циклам на $V_E/\partial V_E$. Существование других инстантонов, вообще говоря, гарантировать нельзя, тем не менее нестягиваемый гомоклинический к z_1 инстантон может существовать при условии, что ямы z_1 и z_2 расположены достаточно далеко друг от друга. (Более точно, расстояние между ними в метрике Якоби должно быть больше, чем расстояние между двумя ближайшими прообразами z_1 на накрывающей плоскости $\mathbb{R}^2$.) Это может случиться, когда β принимает большие значения. Численный анализ показывает, что для $\beta = 1$ (случай, интересный в приложениях для димеров) гомоклинических инстантонов нет. Гомоклинические инстантоны изображены на рис. 5в штриховыми линиями.

Таким образом, гетероклинические инстантоны имеют центральную симметрию (в частности, они пересекают ось x в точках $x = \pm\pi(2n+1)/2\beta$), а гомоклинические инстантоны имеют осевую симметрию. При этом осевая симметрия переводит гетероклинический инстантон в другой гетероклинический инстантон, а центральная симметрия переводит гомоклинический инстантон в другой гомоклинический инстантон.

4. ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Приступим к изучению спектральных зон оператора (1). Для удобства перейдем от потенциала U к $U - U_{\min}$ с глобальным минимумом $U = 0$. Обозначаться этот потенциал будет по-прежнему U . Напомним, что частоты гармонических колебаний обозначаются $\omega_{1,2}$; они могут быть легко вычислены:

$$\omega_1 = \sqrt{\beta r}, \quad \omega_2 = \sqrt{1+r}, \quad \text{где } r = \alpha |\cos(y_* - y_0)|.$$

(Таким образом, ω_1 отвечает оси x , а ω_2 – оси y .) Обозначим меньшую из частот ω_- , а большую – ω_+ .

В дальнейшем будут предполагаться выполненными следующие условия невырожденности:

- 1) частоты ω_1 и ω_2 рационально независимы;
- 2) имеет место неравенство $\omega_+ > 2\omega_-$;
- 3) в случае 1 на цилиндре Z существует единственный инстантон, в случае 2 на Z существуют не более двух гомоклинических и не более двух гетероклинических инстантонов.

4) каждый инстантон подходит к положению равновесия z_k в неособом направлении, т. е. в направлении оси, отвечающей ω_- ;

5) асимптотические многообразия неустойчивых положений равновесия z_k пересекаются трансверсально вдоль каждого инстантона.

Обсудим достаточные условия для выполнения некоторых из предположений в физически интересном случае $\beta = 1$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 2. *Предположим, что $\beta = 1$, $r \leq 1/3$ и $r \neq q_1^2/(q_1^2 - q_2^2)$ для любых $q_1, q_2 \in \mathbb{Z}$. Тогда $\omega_- = \omega_1$, и предположения 1, 2 и 4 выполнены.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Условия 1, 2 легко проверяются. Чтобы установить выполнение условия 4, отметим, что в особом направлении, которое в условиях предложения отвечает частоте ω_2 , к неустойчивому равновесию подходят только два асимптотических решения. (В самом деле, положение равновесия на двумерном устойчивом многообразии имеет особенность типа “узел”.) Из уравнений движения туннельной системы легко видеть, что вдоль этого решения координата x остается постоянной, следовательно, оно не является инстантоном. ■

ЗАМЕЧАНИЕ 7. По-видимому, условие 2 носит технический характер и не является существенным. В таком случае требование $r \leq 1/3$ также становится несущественным для дальнейшего.

ЗАМЕЧАНИЕ 8. Условия 3 и 5 удовлетворяются в случае общего положения, однако проверка их выполнения в конкретном случае представляет собой нетривиальную задачу, которой мы здесь заниматься не будем.

Введем важные конструкции, в терминах которых описывается спектр.

Согласно предположению 3 туннельная система $L = T + U$ имеет инстантон γ с нулевой энергией: $E = T - U = 0$. Вблизи этого инстантона существует семейство либраций γ_ε с энергиями $T - U = -\varepsilon < 0$. Пусть $\lambda(\varepsilon) > 0$ – нетривиальный показатель Флоке либрации. Несложно видеть, что уравнение

$$\varepsilon + \frac{h}{2}\lambda(\varepsilon) = \frac{h}{2}(\omega_-(2m+1) + \omega_+) \quad (11)$$

имеет единственное решение $\varepsilon = \varepsilon_m(h)$ для каждого $m = 0, 1, 2, \dots$ при достаточно малых h и ε . Тем самым задана последовательность значений энергии $\varepsilon = \varepsilon_m(h)$ или последовательность либраций $\gamma_{\varepsilon_m(h)}$. Будем называть их туннельными либрациями.

ЗАМЕЧАНИЕ 9. Ясно, что в одномерном случае туннельные либрации – это периодические траектории с энергиями нижних квантовых состояний, взятых со знаком минус.

Отметим, что задача поиска блоховских функций с $q = 0$ (т. е. $2\pi/\beta$ -периодических по x) эквивалентна задаче поиска собственных функций оператора Шредингера на цилиндре Z . Далее, для поиска блоховских функций с $q = 1/2$ (т. е. $2\pi/\beta$ -антипериодических по x) можно изучать оператор на двукратном цилиндре $Z_{(2)} = \{x \pmod{4\pi/\beta}, y \in \mathbb{R}\}$. Определив его собственные функции, мы, конечно, найдем не только антипериодические, но и периодические блоховские функции. В более общей формулировке: изучение блоховских функций с рациональными квазиимпульсами приводит к N -кратному цилиндру $Z_{(N)} = \{x \pmod{2N\pi/\beta}, y \in \mathbb{R}\}$.

В дальнейшем строгие утверждения о спектре будут формулироваться только для случая рациональных квазиимпульсов.

ТЕОРЕМА 3. Пусть выполнены предположения 1–5 и имеет место случай 1. Множество значений $E \in [0, Ch]$, для которых существуют рациональное число $q \in [0, 1]$ и функция $\psi \in L^2(Z_{(N)})$ такая, что

$$\widehat{H}\psi = E\psi, \quad \psi\left(x + \frac{2\pi}{\beta}, y\right) = e^{2\pi i q} \psi(x, y), \quad (12)$$

состоит из элементов $E = E_\nu(q)$, где $\nu = (\nu_-, \nu_+) \in \mathbb{Z}_+^2$, для которых справедлива асимптотика

$$E_\nu(q) = \omega_- \left(\nu_- + \frac{1}{2} \right) h + \omega_+ \left(\nu_+ + \frac{1}{2} \right) h + O(h^2). \quad (13)$$

При этом:

а) каждому $E = E_\nu(q)$ отвечает ровно одна с точностью до умножения на константу функция, удовлетворяющая (12) при данном q ;

б) $E_\nu(q) = E_\nu(1 - q)$;

в) имеют место дисперсионные соотношения

$$E_\nu(q) - E_\nu(0) = 2\mathcal{A}(h)(\cos 2\pi q - 1)(1 + o(1)); \quad (14)$$

г) существуют такие константы $\kappa_k = \kappa_k(\nu)$ и $C_1, C_2 > 0$, что

$$C_1 h^{\kappa_1} e^{-d_0/h} \leq |\mathcal{A}(h)| \leq C_2 h^{\kappa_2} e^{-d_0/h}, \quad (15)$$

где d_0 – действие на (единственном с точностью до симметрии) инстантоне;

д) если $\nu_+ = 0$, то

$$|\mathcal{A}(h)| = b_{\nu_-} \frac{\omega_- h}{\pi} e^{-S(\varepsilon_{\nu_-}(h))/h} (1 + o(1)), \quad h \rightarrow 0, \quad (16)$$

где $S(\varepsilon_m(h))$ – действие вдоль полупериода туннельной либрации $\gamma_{\varepsilon_m(h)}$, и

$$b_m = \frac{2^{-m} \sqrt{\pi} (2m+1)^{(2m+1)/2}}{m! e^{m+1/2}}. \quad (17)$$

КОММЕНТАРИЙ 1. Таким образом, в случае 1 спектр имеет зонную структуру: каждому квантовому вектору $\nu \in \mathbb{Z}_+^2$ отвечает зона, расположенная в соответствии с приближением гармонического осциллятора (13). Дисперсионные соотношения имеют вид (14). Для длины зоны в общем случае можно написать оценку сверху и снизу (15) в терминах инстантонного действия. В случае квантовых векторов таких, что $\nu_+ = 0$, длина зоны имеет асимптотику, записываемую в терминах действия на туннельной либрации (16).

Перейдем к случаю 2. Пусть d_{het} – действие вдоль гетероклинического инстантона, и d_{hom} – действие вдоль гомоклинического инстантона. Если гомоклинических инстантонов нет, то положим формально $d_{\text{hom}} = \infty$. Ниже рассматриваются две ситуации общего положения: $d_{\text{het}} < d_{\text{hom}}$ и $d_{\text{hom}} < d_{\text{het}}$.

ТЕОРЕМА 4. Пусть выполнены предположения 1–5 и имеет место случай 2, причем $d_{\text{het}} < d_{\text{hom}}$ (в том числе $d_{\text{hom}} = \infty$). Тогда множество значений $E \in [0, Ch]$, для которых существуют рациональное число $q \in [0, 1]$ и функция $\psi \in L^2(Z_{(N)})$ такая, что имеет место (12), состоит из элементов $E = E_\nu^+(q)$ и $E = E_\nu^-(q)$, где $\nu = (\nu_-, \nu_+) \in \mathbb{Z}_+^2$, для которых справедлива асимптотика (13). При этом:

а.1) если $q \neq 1/2$, то каждому $E = E_\nu^\pm(q)$ отвечает ровно одна с точностью до умножения на константу функция, удовлетворяющая (12) при данном q ;

а.2) $E_\nu^+(1/2) = E_\nu^-(1/2)$, и этому значению отвечает двумерное пространство функций, удовлетворяющих (12) при $q = 1/2$;

б) $E_\nu(q) = E_\nu(1 - q)$;

в) имеют место дисперсионные соотношения

$$E_\nu^\pm(q) - E_\nu^\pm\left(\frac{1}{2}\right) = \pm \mathcal{A}(h)(1 + \cos 2\pi q)(1 + o(1)), \quad h \rightarrow 0; \quad (18)$$

г) справедливы оценки (15), где $d_0 = d_{\text{het}}$;

д) если $\nu_+ = 0$, то справедлива асимптотика (16); либрации выбираются вблизи гетероклинического инстантона.

КОММЕНТАРИЙ 2. Таким образом, в случае 2 при $d_{\text{het}} < d_{\text{hom}}$ каждому квантовому вектору $\nu \in \mathbb{Z}_+^2$ отвечает пара зон $I_\nu^\pm = \bigcup_{q \in [0, 1]} E_\nu^\pm(q)$, как и ранее, расположенных в соответствии с приближением гармонического осциллятора. Эти зоны примыкают друг к другу крайними точками, отвечающими $q = 1/2$, в которых имеет место точное вырождение. Дисперсионные соотношения и длина каждой из двух зон находятся по формулам, схожим с формулами в случае 1. Дисперсионные соотношения, приведенные в теореме 4, задают на плоскости (E, q) кривые, изображенные на рис. 6а.

ТЕОРЕМА 5. Пусть выполнены предположения 1–5 и имеет место случай 2, причем $d_{\text{hom}} < d_{\text{het}}$. Тогда множество значений $E \in [0, Ch]$, для которых существуют рациональное число $q \in [0, 1]$ и функция $\psi \in L^2(Z_{(N)})$ такая, что имеет место (12), состоит из элементов $E = E_\nu^+(q)$ и $E = E_\nu^-(q)$, где $\nu = (\nu_-, \nu_+) \in \mathbb{Z}_+^2$, для которых справедлива асимптотика (13). При этом:

а.1) если $q \neq 1/2$, то каждой паре (ν, q) отвечает не более чем двумерное пространство функций, удовлетворяющих (12) при данном q и $E = E_\nu^\pm(q)$;

а.2) $E_\nu^+(1/2) = E_\nu^-(1/2)$, и этому значению отвечает двумерное пространство функций, удовлетворяющих (12) при $q = 1/2$;

б) $E_\nu(q) = E_\nu(1 - q)$;

Рис. 6. Дисперсионные соотношения в случае 2 ($d_{\text{het}} < d_{\text{hom}}$ (а), $d_{\text{hom}} < d_{\text{het}}$ (б)).

в) имеют место дисперсионные соотношения

$$E_{\nu}^{\pm}(q) - E_{\nu}^{\pm}\left(\frac{1}{2}\right) = 2\mathcal{A}(h)(1 + \cos 2\pi q)(1 + o(1)), \quad h \rightarrow 0; \quad (19)$$

г) справедливы оценки (15), где $d_0 = d_{\text{hom}}$;

д) если $\nu_+ = 0$, то справедлива асимптотика (16); либрации выбираются вблизи гомоклинического инстантона.

КОММЕНТАРИЙ 3. Таким образом, в случае 2 при $d_{\text{hom}} < d_{\text{het}}$ каждому квантовому вектору $\nu \in \mathbb{Z}_+^2$ отвечает пара перекрывающихся зон $I_{\nu}^{\pm} = \bigcup_{q \in [0,1)} E_{\nu}^{\pm}(q)$, как и ранее, расположенных в соответствии с приближением гармонического осциллятора. В концах этих зон, отвечающих $q = 1/2$, происходит точное вырождение. Дисперсионные соотношения и длины зон вычисляются, как и ранее. Эти зоны практически слипаются; возможно, что точное вырождение имеет место для всех значений q , а не только для $q = 1/2$. Именно поэтому в теореме утверждается, что паре E и q , возможно, отвечает двумерное пространство блоховских функций. В случае если вырождения нет, то, как и в теореме 4, каждому E и $q \neq 1/2$ отвечает единственная блоховская функция. В целом отметим, что такие эффекты представляются нам очень тонкими – методы их исследования нам неизвестны. Дисперсионные соотношения, приведенные в теореме 5, задают на плоскости (E, q) кривые, изображенные на рис. 6б.

ЗАМЕЧАНИЕ 10. Численный анализ позволяет нам утверждать, что для димеров, т.е. при $\beta = 1$, в случае 2 всегда реализуется ситуация из теоремы 4, причем гомоклинических инстантонов не существует.

5. ЧИСЛЕННЫЕ РАСЧЕТЫ

Асимптотическая формула (16) хороша тем, что практически все ее составляющие могут быть достаточно легко найдены численно с заданной точностью. Основная трудность состоит в нахождении туннельной либрации.

Рис. 7. Численное нахождение либраций. В случае 1 (а) использована пристрелка с линии $x = \pi$ с начальной скоростью, направленной параллельно оси x . Модуль вектора скорости определяется энергией E . Варьируемый параметр a – начальное значение координаты y . В случае 2 для “вертикальной” либрации (б) пристрелка ведется из точки $x = \pi/2$, $y = 0$ с модулем скорости, определяемым энергией E . Варьируемый параметр a – угол пристрелки.

5.1. Поиск туннельной либрации. Либрация с заданной энергией $-E < 0$ может быть найдена численно сравнительно легко благодаря симметрии, а также из-за малой размерности задачи. Методы поиска слегка различаются для случаев 1 и 2. Для простоты мы положим $\beta = 1$.

В случае 1 (см. рис. 7а) будем считать, что y_0 выбрано так, что ямы располагаются на прямых $x = 2\pi n$. Решим задачу Коши со следующими начальными условиями:

$$x(0) = \pi, \quad y(0) = a, \quad p_x(0) = \sqrt{2(U(\pi, a) - E)}, \quad p_y = 0.$$

Параметр a можно варьировать. Либрация определяется равенством $a = a_0$, если траектория возвращается назад на линию $x_0 = \pi$ и пересекает ее в точке $y = a_0$. В малой окрестности a_0 можно построить отображение $A = \mathcal{P}(a)$, где $y = A$ – y -координата последующего пересечения с линией $x = \pi$. Ясно, что $\mathcal{P}(a_0) = a_0$.

Чтобы найти либрацию численно, мы стартуем из малого отрезка $[a_1, a_2]$ такого, что $\mathcal{P}(a_1) > a_1$ и $\mathcal{P}(a_2) < a_2$, и используем метод деления отрезка пополам, пока не достигнем нужной точности.

В случае 2 (см. рис. 7б) тот же метод может быть применен для отыскания “горизонтальной” либрации, которая близка к гомоклиническому инстантону. Чтобы найти “вертикальную” либрацию, близкую к гетероклиническому инстантону, мы выбираем начальные условия в виде

$$x(0) = \frac{\pi}{2}, \quad y(0) = 0, \quad p_x = r \cos a, \quad p_y = r \sin a,$$

где $r = \sqrt{2(U(\pi/2, 0) - E)}$.

Теперь варьируемым параметром a будет служить угол пристрелки. Как и выше, определим отображение $Y = \mathcal{P}(a)$, где $y = Y$ – y -координата следующего пересечения траектории с линией $x = \pi/2$. Либрация соответствует решению $\mathcal{P}(a_0) = 0$. Вновь мы стартуем с малого отрезка $[a_1, a_2] \ni a_0$ и затем используем метод деления отрезка пополам.

Рис. 8. Уровни энергии $E_\nu(h)$. Самое нижнее значение – это $E_{\min}$, затем $E_\nu(h)$ для $\nu = \nu_0, \nu_1, \nu_2$, значение $E = 0$ – это следующая критическая точка функции $U(x, y)$.

Отметим, что в обоих случаях отображение $\mathcal{P}$ достаточно чувствительно к малым изменениям аргумента, поскольку либрации – неустойчивые траектории. Например, отрезок $[a_1, a_2]$, содержащий либрацию, может иметь длину порядка 10^{-2} или 10^{-3} .

Теперь для нахождения туннельной либрации перепишем уравнение (11) в виде

$$\varepsilon = f(\varepsilon), \quad f(\varepsilon) = \frac{h\omega_1}{2} + \frac{h(\omega_2 - \lambda(\varepsilon))}{2}.$$

Его решение мы будем искать с помощью метода итераций:

$$\varepsilon_0 = \frac{h\omega_1}{2}, \quad \varepsilon_n = f(\varepsilon_{n-1}).$$

На каждом шаге нам нужно находить либрацию с заданной энергией и также вычислять ее положительный показатель Флоке. Конкретные вычисления (см. ниже) показывают, что итерационный процесс быстро сходится. Уже первая итерация дает достаточно высокую точность.

5.2. Численные результаты. Проиллюстрируем наш метод на следующем примере. Выберем $\alpha = 1$, $y_0 = \pi/2$ (случай 2) и различные $h \in [0.05, 0.09]$. Таким образом, параметр h не слишком мал, но и не слишком велик. При таком выборе параметра квазиклассическое приближение вполне удовлетворительно, а туннельные эффекты еще ощутимы.

В этом примере минимальное значение энергии $E_{\min} = -0.400488$, $\omega_1 = 0.859700$, $\omega_2 = 1.318743$. Длины зон ΔE_0 , ΔE_1 , ΔE_2 вычисляются с помощью предъявленных выше асимптотических формул с квантовыми векторами $\nu_k = (k, 0)$, $k = 0, 1, 2$ (напомним, что первые компоненты соответствуют направлению инстантона). Положение этих зон изображено на рис. 8. Некоторые из зон нельзя рассматривать как нижние; тем не менее правая часть (16) может быть найдена численно, хотя она будет, вообще говоря, сильно отличаться от левой части, когда мы уходим из окрестности дна ямы.

В табл. 1, 2, 3 (для $\nu = \nu_0, \nu_1, \nu_2$ соответственно) приведены энергии либраций в процессе реализации итерационного процесса, описанного выше. Обратим внимание на его быструю сходимость даже в случае, когда состояния находятся достаточно далеко от дна ямы.

Таблица 1

Итерация	$h = 0.05$	$h = 0.06$	$h = 0.07$	$h = 0.08$	$h = 0.09$
0	-0.378996	-0.374698	-0.370399	-0.366101	-0.361802
1	-0.377707	-0.373156	-0.368607	-0.36406	-0.359514
2	-0.377709	-0.373158	-0.36861	-0.364063	-0.359519

Таблица 2

Итерация	$h = 0.05$	$h = 0.06$	$h = 0.07$	$h = 0.08$	$h = 0.09$
0	-0.336011	-0.323116	-0.31022	-0.297325	-0.284429
1	-0.334764	-0.32163	-0.308499	-0.29537	-0.282242
2	-0.334765	-0.321632	-0.308501	-0.295372	-0.282244

Таблица 3

Итерация	$h = 0.05$	$h = 0.06$	$h = 0.07$	$h = 0.08$	$h = 0.09$
0	-0.293026	-0.271534	-0.250041	-0.228548	-0.207056
1	-0.291807	-0.270083	-0.24836	-0.226639	-0.204918
2	-0.291807	-0.270083	-0.248361	-0.22664	-0.204919

Как только либрация найдена, длина зоны также легко находится (см. рис. 9, где приведены окончательные результаты численных расчетов).

Рис. 9. Длины зон в логарифмической шкале.

В заключение этого раздела подчеркнем, что разработанный алгоритм хорошо работает для сколь угодно малых значений h , хотя, разумеется, улучшение точности требует большего числа итераций.

6. СПЕКТРАЛЬНЫЕ ЗОНЫ, ФУНКЦИИ ВАНЬЕ И ИХ АСИМПТОТИКИ

В этом разделе некоторые результаты работы, сформулированные в разделе 4, будут объяснены “на пальцах”. Мы не будем придавать этим рассуждениям строгий математический смысл, поскольку ниже последуют аккуратные доказательства другим методом. Для простоты мы ограничимся одномерным случаем (теорема 1), однако рассуждения можно обобщить и на случай 1.

Напомним полезную формулу, которая связывает блоховскую функцию $\Phi^m(x, q)$ с функциями Ванье (см. [6]). Поскольку функции $\Phi^m(x, q)$ являются 1-периодическими по переменной q , их можно разложить в ряд Фурье:

$$\Phi^m(x, q) = \sum_{l \in \mathbb{Z}} c_l(x) e^{2\pi i q l}, \quad (20)$$

где из условия Блоха (6) следует, что $c_l(x) = c_0(x - 2\pi l)$. Функция c_0 называется функцией Ванье и обозначается $\zeta^m(x)$. Таким образом,

$$\Phi^m(x, q) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \zeta^m(x - 2\pi l, y) e^{2\pi i q l}. \quad (21)$$

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 3. *Функции Ванье $\zeta^m(x)$ являются:*

- 1) *четными;*
- 2) *экспоненциально убывающими при $x \rightarrow \infty$;*
- 3) *квази модами, т. е. удовлетворяют уравнению Шредингера с экспоненциально малой по $\hbar$ ошибкой.*

СЛЕДСТВИЕ 1. *Для функций Ванье ζ^m справедливо приближение типа ВКБ:*
 $\zeta^m = (A + O(\hbar)) e^{-S(x)/\hbar}.$

ЗАМЕЧАНИЕ 11. Это приближение близко к гауссовой экспоненте ($S = \alpha x^2/2$) в окрестности минимума потенциала $v(x)$.

Идея доказательства предложения 3 приведена в приложении В.

Определим нормализованную функцию Ванье: $\zeta_0^m = \zeta^m / \|\zeta^m\|$. Следующий результат представляет из себя версию формулы Ландау–Лифшица (см. [5]).

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 4. *Дисперсионные соотношения для m -й зоны одномерного оператора Шредингера (5) записываются следующим образом (для любого $0 < q < 1$):*

$$E_m(q) - E_m(0) = -2\hbar^2 \zeta_0^m(\pi) \zeta_0^{m'}(\pi) (1 - \cos 2\pi q) (1 + o(1)). \quad (22)$$

Идея доказательства предложения 4 приведена в приложении В.

Для вывода теоремы 1 из предложения 4 нужно найти значения $\zeta_0^m(\pi)$ и $(\zeta_0^m)'(\pi)$ из уравнения Гамильтона–Якоби и уравнения переноса с достаточной точностью. Детали этого рассуждения мы отложим до раздела 8.

7. МАТРИЦА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

В этом разделе мы напомним основные факты из теории Элффера–Сёстранда, изложенной в работе [3], о квазиклассических асимптотиках оператора Шредингера с потенциалом, имеющим конечное число ям. Оператор действует в $L^2(M)$, где для наших целей в качестве многообразия M можно взять цилиндр или окружность, т. е.

$$M = \left\{ x \left(\bmod \frac{2\pi N}{\beta} \right), y \in \mathbb{R}^{n-1} \right\}, \quad n = 1, 2.$$

Предположим, что потенциал $\tilde{U}$ – такая гладкая функция, что $\tilde{U} \rightarrow \infty$ при $y \rightarrow \infty$. Никаких предположений о симметрии мы пока не делаем. Пусть $z_1, \dots, z_m \in M$ –

точки глобального минимума функции $\tilde{U}$ (ямы), и пусть они все нерезонансны, т. е. для всех $1 \leq l \leq m$

$$\sum_{j=1}^n k_j \omega_{l,j} \neq 0 \quad \text{для всех} \quad 0 \neq k \in \mathbb{Z}^n,$$

где $\omega_{l,j}$ – частоты гармонического осциллятора, отвечающего l -й яме.

Хорошо известно, что с погрешностью $O(h^\infty)$ спектр оператора $\hat{H}$ (а точнее, его нижняя часть) есть объединение спектров Spec_l , $l = 1, \dots, m$, связанных с каждой ямой.

Именно, возьмем любую малую окрестность Ω_l ямы z_l , затем домножим функцию $\tilde{U}$ на гладкую срезающую функцию с носителем в Ω_l . Тогда Spec_l – есть спектр оператора Шредингера с условиями Дирихле на $\partial\Omega_l$.

Главные члены собственных значений из Spec_l определяются из приближения гармонического осциллятора:

$$\text{Spec}_l = \left\{ \sum_{j=1}^n \frac{\omega_{l,j} h}{2} (2\nu_j + 1) + O(h^2), \nu = (\nu_1, \dots, \nu_n) \in \mathbb{Z}_+^n \right\}.$$

Заметим, что в силу предположения о нерезонансности все главные члены в Spec_l различны.

Предположим, что нижние части спектров Spec_l совпадают с погрешностью $O(h^\infty)$ (например, вследствие симметрии, но не обязательно). Тогда спектр $\hat{H}$ является m -кратно почти вырожденным (с точностью до $O(h^\infty)$).

Зафиксируем $\nu \in \mathbb{Z}_+^n$ и определим I – маленький (порядка $\sim h^2$) интервал, содержащий в точности одно собственное значение каждого множества Spec_l , отвечающее данному ν .

Обозначим через $d_E(u, v)$ расстояние между точками u и v на цилиндре M относительно метрики Якоби $\sqrt{2(\tilde{U}(x, y) - E)} ds$. Определим расстояние между ямами следующим образом: $\sigma_0 = \min_{j \neq k} d_0(z_j, z_k)$. Зафиксируем малое $\delta > 0$ и выберем произвольное $\sigma \in (0, \sigma_0 - \delta)$.

Обозначим через $B(z, r) \subset M$ шар радиуса r с центром z в смысле метрики Якоби d_0 . Определим $B_k = B(z_k, \delta)$ и $M_j = M \setminus \bigcup_{k \neq j} B_k$, и пусть $\hat{H}_j$ будет самосопряженным расширением оператора $\hat{H}$ на $L^2(M_j)$ с условиями Дирихле на границе. Спектр $\text{Spec } \hat{H}_j$ невырожден, и $I \cap \text{Spec } \hat{H}_j$ содержит единственный элемент $\mathcal{E}_j$. Пусть ψ_j – соответствующие нормализованные собственные функции.

ТЕОРЕМА 6 [3]. 1. При введенных предположениях $I \cap \text{Spec } \hat{H}$ содержит в точности m собственных значений (с учетом кратностей).

2. Матрица P оператора $\hat{H}|_{\mathcal{V}_\nu}$, где $\mathcal{V}_\nu$ – линейная оболочка собственных функций, отвечающих собственным значениям из п. 1, в некотором ортонормированном базисе имеет вид

$$P = \text{diag}(\mathcal{E}_1, \dots, \mathcal{E}_m) + W + O(e^{-2\sigma/h}).$$

Здесь матрица $W = (w_{jk})$ имеет элементы

$$w_{jk} = \frac{h^2}{2} \int_{\partial\Omega_{j_k}} \left(\psi_j \frac{\partial \psi_k}{\partial n} - \psi_k \frac{\partial \psi_j}{\partial n} \right) dS + O(e^{-2\sigma/h}), \quad (23)$$

где $\Omega_{jk} \subset M$ – такая область, что

$$z_j \in \Omega_{jk}, \quad z_k \notin \Omega_{jk}, \quad \partial\Omega_{jk} \subset M_j \cap M_k,$$

а n – внешняя нормаль к поверхности $\partial\Omega_{jk}$.

Матрица P называется матрицей взаимодействия.

ЗАМЕЧАНИЕ 12. Базис из теоремы 6 близок к почти ортонормированной системе $\psi_1, \dots, \psi_n$.

ЗАМЕЧАНИЕ 13. Можно показать, что $w_{jk} = w_{kj}$.

Для практических вычислений функции ψ_j в (23) можно заменить туннельными асимптотиками ВКБ:

$$\tilde{\psi}_j(z) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l^j(z) e^{-S_j(z)/h},$$

где фаза S_j есть не что иное, как расстояние в метрике Якоби: $S_j(z) = d_0(z_j, z)$, а функции A_l^j находятся из стандартных уравнений переноса. Несмотря на то что $\tilde{\psi}_j$ – лишь квазимоды (т. е. удовлетворяют уравнению Шредингера с малой погрешностью), в работе [3] показано, что они близки к настоящим собственным функциям ψ_j . Поэтому утверждение теоремы 6 остается верным при замене собственных функций на квазимоды.

8. ДОКАЗАТЕЛЬСТВА ОСНОВНЫХ ТЕОРЕМ

Начнем с доказательства теоремы 1 при $m = 0$ и $q = 1/2$ с помощью подхода, изложенного в разделе 7. Для наших рассуждений не существенно, что потенциал имеет вид (5). Нам достаточно потребовать, чтобы функция $v(x)$ была гладкой периодической с единственной точкой глобального минимума. Вновь обратим внимание на то, что симметрия $x \rightarrow -x$ не предполагается. Случай произвольного q будет рассмотрен ниже (подробнее см. приложение Г).

Перейдем к доказательству теорем из раздела 4. Для упрощения вида формул, не ограничивая общности, будем считать, что $\beta = 1$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ТЕОРЕМЫ 3. Сначала мы выведем требуемые оценки и асимптотики для длин спектральных зон (т. е. рассмотрим случай $q = 1/2$). Для этого рассмотрим оператор $\hat{H}$ на цилиндре $Z_{(2)}$. Согласно теореме 6 оператор $\hat{H}|_{\mathcal{V}_\nu}$ задается матрицей

$$P = \mathcal{E}I + W + O(e^{-2\sigma/h}) \equiv \begin{pmatrix} \mathcal{E} & w_{12} \\ w_{12} & \mathcal{E} \end{pmatrix} + O(e^{-2\sigma/h}).$$

Собственные векторы и значения матрицы $\mathcal{E}I + W$ имеют вид

$$v_1 = (1, 1), \quad v_2 = (1, -1), \quad \lambda_1 = \mathcal{E} - w_{12}, \quad \lambda_2 = \mathcal{E} + w_{12}.$$

Следовательно, пространство $\mathcal{V} = \mathcal{V}_\nu$ можно разложить в прямую сумму одномерных инвариантных подпространств $\mathcal{V}^{(1)}$, $\mathcal{V}^{(2)}$, отвечающих λ_1 и λ_2 .

Введем следующий оператор симметрии: $G\psi(x, y) = \psi(x + 2\pi, y)$. Ясно, что его собственные значения – это $\{\pm 1\}$. Поскольку оператор $\hat{H}$ коммутирует с G , пространства $\mathcal{V}^{(1)}$ и $\mathcal{V}^{(2)}$ инвариантны относительно G . Поэтому $\mathcal{V}^{(1)}$ и $\mathcal{V}^{(2)}$ порождаются 4π -периодическими функциями. Из вида собственных векторов матрицы $\mathcal{E}I + W$, используя замечание 12, мы легко видим, что $\mathcal{V}^{(1)}$ порождено 2π -периодическими, а $\mathcal{V}^{(2)}$ – 2π -антипериодическими функциями.

Итак, мы нашли две точки спектра, отвечающие блоховским функциям с $q = 0$ и $q = 1/2$. Длина зоны есть не что иное, как разность собственных значений матрицы P , т. е. имеет асимптотику $2w_{12}$. Используя симметрию $x \rightarrow -x$, получим

$$E_\nu\left(\frac{1}{2}\right) - E_\nu(0) = 2w_{12}(1 + o(1)) = h^2(1 + o(1)) \int_\Sigma \left(\psi_1 \frac{\partial \psi_2}{\partial x} - \psi_2 \frac{\partial \psi_1}{\partial x} \right) dy, \quad h \rightarrow 0,$$

где Σ – малый отрезок прямой $x = \pi$, содержащий точку пересечения с инстантоном. Легко видеть, что это то же самое выражение, которое возникает в задаче о двойной яме. Теперь можно применить известные оценки [7] и получить утверждение “г” и асимптотики (см. [10], [11], [20]) для доказательства утверждения “д”. А именно, случай 0 при $m = 0$ был рассмотрен в [10], случай 1 – позднее в [11]. Обобщение для произвольного m получено в [20].

Теперь выведем дисперсионные соотношения. Возьмем $q = l/N$ для $N = 2n$ и цилиндр $Z_{(N)}$, тогда потенциал имеет N ям и $W = w_{12}\Omega_N$, где

$$\Omega_N = (\omega_{jk}) \in \mathbb{R}^{N^2} : \omega_{jk} = 0, \quad \text{кроме} \quad \omega_{j, j+1} = \omega_{j+1, j} = 1, \quad (24)$$

где $1 \leq j \leq N$, а индексы понимаются по модулю N . Собственные векторы и значения этой матрицы имеют вид

$$v_k = (1, e^{\pi i k/n}, e^{2\pi i k/n}, \dots, e^{\pi i k(2n-1)/n}), \quad \lambda_k = 2w_{12} \cos \frac{\pi k}{n}, \quad (25)$$

где $k = 0, \dots, 2n - 1$.

Следовательно, пространство $\mathcal{V} = \mathcal{V}_\nu$ можно разложить в прямую сумму инвариантных подпространств $\mathcal{V}^{(0)}, \dots, \mathcal{V}^{(n)}$, отвечающих λ_k и λ_{2n-k} , причем

$$\dim \mathcal{V}^{(0)} = \dim \mathcal{V}^{(n)} = 1, \quad \dim \mathcal{V}^{(k)} = 2, \quad 1 < k < n.$$

Введем оператор симметрии, действующий по тому же правилу, что и раньше: $G\psi(x, y) = \psi(x + 2\pi, y)$, но уже в пространстве $L^2(Z_{(N)})$. Ясно, что его собственные значения – это корни из единицы $2n$ -й степени. Поскольку оператор $\hat{H}$ коммутирует с G , пространства $\mathcal{V}^{(k)}$ также инвариантны относительно G . Поэтому $\mathcal{V}^{(0)}$ и $\mathcal{V}^{(n)}$ порождаются блоховскими функциями с $q = k/2n$. Поскольку

$$v_0 = (1, 1, \dots, 1), \quad v_n = (1, -1, \dots, 1, -1),$$

используя замечание 12, мы легко видим, что $\mathcal{V}^{(0)}$ порождено блоховскими функциями с $q = 0$, а $\mathcal{V}^{(n)}$ – блоховскими функциями с $q = 1/2$.

Заметим, что собственные значения оператора $G|_{\mathcal{V}^{(k)}}$ при $1 \leq k < n$ отличны от 1 и -1 . В самом деле, подпространство $\mathcal{V}$, порожденное блоховскими функциями с $q = 0, 1/2$, двумерно (это легко увидеть, если рассмотреть оператор на цилиндре $Z_{(2)}$ с двумя ямами). Поэтому собственные значения оператора $G|_{\mathcal{V}^{(k)}}$ – пара

комплексно-сопряженных корней из единицы $2n$ -й степени. Из (25), а также замечания 12 следует, что $\mathcal{V}^{(k)}$ порождены парой блоховских функций с $q = k/2n$, $(2n - k)/2n$, а соответствующее собственное значение имеет кратность 2.

Тем самым установлены дисперсионные соотношения для всех $q \in \mathbb{Q}$, и теорема 3 доказана. ■

ЗАМЕЧАНИЕ 14. Ясно, что то же самое дисперсионное соотношение (14) выполнено в одномерном случае. Значение w_{12} может быть вычислено, как в приложении Г, и мы приходим к правой части формулы (П.10), деленной на два, при $n \geq 2$. Последнее следует из того, что теперь $\partial\Omega_{12}$ пересекает инстантон не в двух, а лишь в одной точке. Отсюда следует утверждение теоремы 1 для $m = 0$ и любого рационального q .

Доказательство теорем 4 и 5 приведено в приложении Д.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Доказательство предложения 1

Прежде всего заметим, что глобальный минимум потенциала отрицателен: $U_{\min} < 0$. В самом деле,

$$\min \left\{ U(0, 0), U\left(\frac{\pi}{\beta}, 0\right) \right\} \leq -\alpha |\cos y_0|.$$

Тогда в случае 1 имеем $U_{\min} < 0$. В случае 2 функция $U(0, y)$ имеет первый порядок малости при $y = 0$, поэтому вновь $U_{\min} < 0$.

Критические точки функции $U(x, y)$ находятся из следующих уравнений:

$$y + \alpha \cos \beta x \sin(y - y_0) = 0, \quad (\text{П.1})$$

$$\sin \beta x \cos(y - y_0) = 0. \quad (\text{П.2})$$

Определим Y – множество точек (x, y) , в которых U достигает значения $U_{\min}$. Также определим множества

$$V_{\pm} = \{y: y \pm \alpha \sin(y - y_0) = 0, \pm \cos(y - y_0) > 0\},$$

$$W_+ = \{(0, y): y \in V_+\}, \quad W_- = \left\{ \left(\frac{\pi}{\beta}, y \right): y \in V_- \right\}$$

и положим $y_* = \min_{y \in V_+ \cup V_-} |y|$.

ЛЕММА 1.

$$Y = \{(0, y): |y| = y_*, y \in V_+\} \cup \left\{ \left(\frac{\pi}{\beta}, y \right): |y| = y_*, y \in V_- \right\}.$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Будем искать глобальный минимум среди критических точек. Из (П.2) следует, что $\sin x = 0$ (поскольку $U \geq 0$, если $\cos(y - y_0) = 0$). Из (П.1) очевидно, что все критические точки, в которых $U < 0$, лежат в $W_+ \cup W_-$. Далее,

$$U(x, y) = \frac{y^2}{2} - \sqrt{\alpha^2 - y^2} \quad \forall (x, y) \in W_+ \cup W_-.$$

Таким образом, чем ближе y к нулю, тем меньше значение U . ■

ЛЕММА 2. Существует не более одного $y \in V_+$ такого, что $|y| = y_*$. То же самое верно и для V_- .

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Предположим противное, т. е. $\pm y_* \in V_+$. Тогда

$$\pm y_* + \alpha \sin(\pm y_* - y_0) = 0, \quad \cos(\pm y_* - y_0) > 0,$$

или, суммируя равенства, получаем

$$\sin(y_* - y_0) - \sin(y_* + y_0) = -2 \sin y_0 \cos y_* = 0.$$

Следовательно, либо $y_0 = 0$ (и тогда, очевидно, $y_* = 0$), либо $y_* = \pi/2 + \pi n$. В последнем случае мы получаем одновременно два противоречащих друг другу неравенства: $\sin y_0 > 0$ и $\sin y_0 < 0$. ■

ЛЕММА 3. $V_- \cap V_+ = \emptyset$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. В противном случае величина $\cos(y_* - y_0)$ одновременно отрицательна и положительна. ■

Из доказанных лемм следует, что Y содержит либо один, либо два элемента. В последнем случае остается одна возможность: $Y = \{(0, \pm y_*), (0, \mp y_*)\}$. Тогда

$$\pm y_* \pm \alpha \sin(\pm y_* - y_0) = 0, \quad \pm \cos(\pm y_* - y_0) > 0,$$

или $\sin y_* \cos y_0 = 0$, откуда следует $\cos y_0 = 0$. В самом деле, равенство $y_* = \pi n$ невозможно, так как $\cos(\pi n - y_0) = \cos(-\pi n - y_0)$. Следовательно, $y_0 = \pi/2$.

Предложение 1 доказано.

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

Предложение 3: идея доказательства

1. Утверждение п. 1 очевидно, поскольку $v(x)$ также является четной функцией.
2. Утверждение п. 2 вытекает из следующего представления:

$$\zeta^m(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^1 \Theta^m(x, q) e^{iqx} dq,$$

где функция $\Theta^m(x, q) = \Phi^m(x, q) e^{-iqx}$ 2π -периодична по x . Теперь, используя интегрирование по частям, мы можем видеть, что $\zeta^m(x) = O(1/x^\infty)$.

3. Чтобы доказать утверждение п. 3, подставим разложение (20), а также разложение для энергии

$$E_m(q) = \sum_{l \in \mathbb{Z}} \varepsilon_l^m e^{2\pi i l q}$$

в уравнение Шредингера, тогда получим соотношения

$$\hat{H}c_k(x) = \sum_{l+s=k} \varepsilon_l^m c_s. \quad (\text{П.3})$$

Однако, поскольку длины зон экспоненциально малы, все ε_l при $l \neq 0$ также экспоненциально малы. Поэтому можно записать следующее приближение:

$$\hat{H}c_k(x) \approx \varepsilon_0^m c_k$$

с экспоненциально малой ошибкой, и, следовательно, c_k являются квазимодами оператора $\hat{H}$.

ПРИЛОЖЕНИЕ В

Предложение 4: идея доказательства

Для вычисления асимптотики длины зоны нам нужно хорошее приближение для функции Ванье ζ_0^m лишь на отрезке $-\pi \leq x \leq \pi$. Домножим ζ_0^m на гладкую срезающую функцию χ_0 с носителем $[-2\delta - \pi, \pi + 2\delta]$ и равную единице при $-\delta - \pi \leq x \leq \pi + \delta$ (полученную функцию будем по-прежнему обозначать ζ_0^m). Такая операция не влияет на главный член асимптотики. Поэтому разложение (21) допускает следующее приближение при $x \in [-\pi, \pi]$:

$$\Phi^m(x, q) = \zeta_0^m(x) + \zeta_0^m(x - 2\pi)e^{2\pi iq} + \zeta_0^m(x + 2\pi)e^{-2\pi iq}. \quad (\text{П.4})$$

Для упрощения обозначений, в дальнейшем будем писать $\Phi(q)$, ζ_0 и $E(q)$ вместо $\Phi^m(x, q)$, ζ_0^m и $E_m(q)$ соответственно. Используя подход Герринга, проинтегрируем тождество

$$-\frac{h^2}{2}(\Phi(0)\Delta\Phi(q) - \Phi(q)\Delta\Phi(0)) = (E(q) - E(0))\Phi(q)\Phi(0)$$

в пределах $-\pi \leq x \leq \pi$, тогда по формуле Грина получаем

$$E(q) - E(0) = -\frac{h^2(\Phi(0)\Phi(q)' - \Phi(q)\Phi(0)')|_{-\pi}^{\pi}}{2 \int_{-\pi}^{\pi} \Phi(0)\Phi(q) dx}. \quad (\text{П.5})$$

Поскольку функции $\Phi(q)$ локализованы вблизи $x = 0$, знаменатель, очевидно, близок к единице. Определим

$$\zeta_+ = \zeta_0^m(\pi), \quad \zeta_- = \zeta_0^m(-\pi), \quad \zeta'_+ = (\zeta_0^m)'(\pi), \quad \zeta'_- = (\zeta_0^m)'(-\pi).$$

После подстановки (П.4) в (П.5) мы получаем

$$E(q) - E(0) \sim -\frac{h^2}{2}[(\zeta_+ + \zeta_-)(\zeta'_+ + \zeta'_-e^{2\pi iq}) - (\zeta_+ + \zeta_-e^{2\pi iq})(\zeta'_+ + \zeta'_-) + (\zeta_- + \zeta_+)(\zeta'_- + \zeta'_+e^{-2\pi iq}) + (\zeta_- + \zeta_+e^{-2\pi iq})(\zeta'_- + \zeta'_+)]. \quad (\text{П.6})$$

Ясно, что $\zeta_+ = \zeta_-$ и $\zeta'_+ = -\zeta'_-$, и мы приходим к нужному соотношению (22).

ПРИЛОЖЕНИЕ Г

Одномерный случай без симметрии $x \rightarrow -x$

Применим теорему 6 к оператору (5) на окружности $x \pmod{4\pi}$. Ясно, что собственные значения матрицы P — это $E_0(0)$, $E_0(1/2)$, и с учетом симметрии $x \rightarrow x + 2\pi$ получаем

$$E_0(0) = \mathcal{E} + w_{12} + O\left(-\frac{2\sigma}{h}\right), \quad E_0\left(\frac{1}{2}\right) = \mathcal{E} - w_{12} + O\left(-\frac{2\sigma}{h}\right)$$

(поскольку периодическая собственная функция отвечает собственному вектору матрицы P , близкому к $(1, 1)$, а антипериодическая — к $(1, -1)$).

Таким образом, проблема сводится к нахождению асимптотики для $w = w_{12}$:

$$w = \frac{h^2}{2}(\psi_1\psi'_2 - \psi_2\psi'_1)|_a^b, \quad -2\pi < b < 0 < a < 2\pi. \quad (\text{П.7})$$

Ее можно получить, подставляя ВКБ-приближения для ψ_j в (П.7). А именно, для $j = 1, 2$ возьмем $\phi_j(x) = h^{-1/4}A_j(x)e^{-S_j(x)/h}$, где $S_j(x) = d(z_j, x)$, а A_j находится из уравнения переноса:

$$\frac{dA_j}{dx} + \frac{A_j S''}{2} = \frac{\omega}{2}A_j. \quad (\text{П.8})$$

Определим $\tilde{w}_{a,b} = (h^2/2)(\phi_1\phi'_2 - \phi_2\phi'_1)|_{a,b}$ и вычислим $\tilde{w} = \tilde{w}_b$. Предположим, что $x = x_0(t)$ – инстантон, параметризованный следующим образом:

$$x_0 \rightarrow 0, \quad t \rightarrow -\infty, \quad x_0(t) \rightarrow 2\pi, \quad t \rightarrow +\infty, \quad x_0(0) = b,$$

тогда

$$|\tilde{w}| = h^{1/2}A_1(x_0(0))A_2(x_0(0))|\dot{x}_0(0)|e^{-\sigma_0/h}(1 + o(1)), \quad h \rightarrow 0, \quad (\text{П.9})$$

где σ_0 – длина инстантона в метрике Якоби. Определим также $a_j(t) = A_j(x_0(t))$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 5. *Имеет место асимптотика*

$$|\tilde{w}| = \left(\frac{h\omega\gamma_-\gamma_+}{\pi} \right)^{1/2} e^{-\sigma_0/h}(1 + o(1)), \quad h \rightarrow 0,$$

где $\gamma_{\pm} = \lim_{t \rightarrow \pm\infty} |\dot{x}_0(t)|e^{\mp\omega t}$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Из (П.8) следует, что

$$a_1(t) = a_1(0) \exp \left[-\frac{1}{2} \int_0^t S''(x_0(\tau)) d\tau \right] e^{-\omega t/2} = a_1(0) \left| \frac{\dot{x}_0(0)}{\dot{x}_0(t)} \right|^{1/2} e^{-\omega t/2},$$

а из приближения гармонического осциллятора имеем $\lim_{t \rightarrow -\infty} a_1(t) = (\omega/\pi)^{1/4}$, и мы получаем

$$a_1(0) = \left(\frac{\omega}{\pi \dot{x}_0^2} \right)^{1/4} \sqrt{\gamma_-}.$$

Схожие вычисления для $a_2(0)$ завершают доказательство.

Следующий шаг – подставить действие $S_{h,0}$ из (9) в экспоненту. В работе [11] показано, что

$$\sigma_0 = S_{h,0} + \frac{h}{2} + h \ln 2 + \frac{h\omega(T_h^- + T_h^+)}{2} + o(h),$$

где $T_h^{\pm} > 0$ – время движения по инстантону $x_0(t)$ от точки $x_{\pm}(h, 0)$ до b (см. (9)).

Таким образом,

$$|\tilde{w}| = \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar \omega \gamma_- \gamma_+}{\pi e} \right)^{1/2} e^{\omega(T_h^- + T_h^+)/2} e^{-S_{h,0}/\hbar} (1 + o(1)).$$

Далее,

$$\gamma_{\pm} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} e^{\omega T^{\pm}(\varepsilon)} |\dot{x}_0(T^{\pm}(\varepsilon))| = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} e^{\omega T^{\pm}(\varepsilon)} \sqrt{2\varepsilon},$$

где $T^{\pm}(\varepsilon) = T_{2\varepsilon/\omega}^{\pm}$. Поэтому

$$e^{\omega T_h^{\pm}} = \frac{\gamma_{\pm}}{\sqrt{\omega \hbar}} (1 + o(1))$$

и, наконец,

$$|\tilde{w}_b| = \frac{\omega \hbar}{2\sqrt{\pi e}} e^{-S_{h,0}/\hbar} (1 + o(1)).$$

Аналогичная формула верна для $\tilde{w}_a$, и

$$\tilde{w}_b - \tilde{w}_a = b_0 \frac{\omega \hbar}{\pi} e^{-S_{h,0}/\hbar} (1 + o(1)), \quad (\text{П.10})$$

где b_0 задано формулой (17).

Чтобы доказать, что формула (П.10) дает правильную асимптотику для w , мы заметим, что

$$\psi_j(x) = \phi(x) + O(\hbar^{3/4} e^{-S_j(x)/\hbar}), \quad \psi'_j(x) = \phi'(x) + O(\hbar^{-1/4} e^{-S_j(x)/\hbar})$$

равномерно по x (см. [3]). Следовательно, асимптотика (П.9) верна также и для ψ_1 , ψ_2 . Тем самым, утверждение теоремы 1 доказано при $m = 0$ и $q = 1/2$.

ПРИЛОЖЕНИЕ Д

Доказательства теорем 4 и 5

Сначала изучим периодические и антипериодические по x собственные функции. На цилиндре $Z_{(2)}$ потенциал U имеет четыре ямы, обозначенные следующим образом:

$$z_1 = (0, y_*), \quad z_2 = (\pi, -y_*), \quad z_3 = (2\pi, y_*), \quad z_4 = (3\pi, -y_*).$$

Обозначим $A = w_{12}$ и $B = w_{13}$, тогда главный член матрицы P равен

$$W = \begin{pmatrix} \mathcal{E} & A & B & A \\ A & \mathcal{E} & A & B \\ B & A & \mathcal{E} & A \\ A & B & A & \mathcal{E} \end{pmatrix}, \quad (\text{П.11})$$

Рис. 10. Спектральные зоны в случае 2. Белые и черные точки определяют периодические и антипериодические состояния соответственно. Если $d_{\text{het}} < d_{\text{hom}}$ (а), то зоны имеют длину $2A$ и примыкают друг к другу; если $d_{\text{hom}} < d_{\text{het}}$ (б), то зоны перекрываются и имеют длину $2B$.

и, следовательно, собственные значения и векторы имеют вид

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \mathcal{E} - B + 2A, & v_1 &= (1, 1, 1, 1), \\ \lambda_2 &= \mathcal{E} - B - 2A, & v_2 &= (1, -1, 1, -1), \\ \lambda_{3,4} &= \mathcal{E} + B, & v_3, v_4 &\in \text{Span}((1, 0, -1, 0), (0, 1, 0, -1)). \end{aligned} \quad (\text{П.12})$$

Докажем, что собственные значения матрицы P , отвечающие $\lambda_{3,4}$, в точности вырождаются. Введем оператор симметрии $G_1\psi(x, y) = \psi(x + \pi, -y)$. Ясно, что $\hat{H}$ коммутирует с G_1 , и $G_1^4 = \text{Id}$. Как и выше, разложим четырехмерное пространство $\mathcal{V}$ в прямую сумму $\hat{H}$ -инвариантных подпространств $\mathcal{V}^{(j)}$ для $j = 0, 1, 2$. Среди них два одномерных пространства — $\mathcal{V}^{(0)}$ и $\mathcal{V}^{(1)}$ — связаны с λ_1 и λ_2 , и одно двумерное $\mathcal{V}^{(2)}$ — с $\lambda_{3,4}$. Пространства $\mathcal{V}^{(j)}$ также G_1 -инвариантны.

Поэтому из (П.12) и из замечания 12 мы легко получаем, что $\mathcal{V}^{(j)}$ при $j = 0, 1$ порождены такими функциями $\psi_{1,2}$, что $G_1\psi_1 = \psi_1$ и $G_1\psi_2 = -\psi_2$. Обе функции блоховские с квазиимпульсом $q = 0$.

Поскольку подпространство в $\mathcal{V}$, порожденное блоховскими функциями с $q = 0$, двумерно, собственные значения оператора $G_1|_{\mathcal{V}^{(2)}}$ равны $\pm i$. Поэтому $\mathcal{V}^{(2)}$ отвечает собственному значению кратности 2 (с квазиимпульсом $q = 1/2$).

Случай $d_{\text{het}} < d_{\text{hom}}$. Возьмем $\sigma = d_{\text{het}}/2$, тогда $B = 0$, и из замечания 12 мы видим, что двукратное собственное значение $\lambda_{3,4}$ с квазиимпульсом $q = 1/2$ лежит посередине между собственными значениями $\lambda_{1,2}$, отвечающими квазиимпульсу $q = 0$ (см. рис. 10а). Разности $|\lambda_{1,2} - \lambda_{3,4}|$ равны $2A \sim e^{-d_{\text{het}}/h}$ и могут быть сведены к тому же самому интегралу, который возникал в теореме 3. Поэтому A допускает асимптотику из правой части (16).

В более общей формулировке: будем искать блоховские собственные функции с рациональными квазиимпульсами, а именно $q = k/2n$, где $k = 0, \dots, 2n - 1$. Другими словами, мы изучаем $4n$ собственных функций $\hat{H}$ на цилиндре $Z_{(2n)}$. Тогда в теореме 6 можно взять $W = A\Omega_{4n}$ (см. (24)). Из вида собственных значений и собственных векторов этой матрицы

$$v_k = (1, e^{\pi i k/2n}, e^{2\pi i k/2n}, \dots, e^{\pi i k(4n-1)/2n}), \quad \lambda_k = 2A \cos \frac{\pi k}{2n},$$

следуют дисперсионные соотношения (18).

Теорема 4 доказана.

Случай $d_{\text{hom}} < d_{\text{het}}$. Возьмем $\sigma = d_{\text{hom}}/2$ и вновь начнем с $Z_{(2)}$. Тогда в (П.11) получаем $A = 0$, и из (П.12) и замечания 12 следует, что $\lambda_{1,2}$ – пара периодических состояний, а $\lambda_{3,4}$ – двоянное антипериодическое состояние. Разница $|\lambda_{1,2} - \lambda_{3,4}| \sim 2B$. Теперь, взяв $\sigma = d_{\text{hom}}/2$, мы можем легко вычислить $|\lambda_1 - \lambda_2| \sim 4A$ (см. рис. 106).

Вновь будем искать блоховские функции с рациональными квазиимпульсами, а именно $q = k/2n$, где $k = 0, \dots, 2n-1$. Оператор W из теоремы 6 теперь уже обладает двумя $2n$ -мерными инвариантными подпространствами (связанными с четными и нечетными элементами). На каждом пространстве оператор W определяется матрицей $B\Omega_{2n}$, которая была изучена выше.

Отсюда легко вытекают дисперсионные соотношения (19). Теорема 5 доказана.

Благодарности. Авторы благодарны С. В. Болотину, Д. В. Трещеву, А. И. Шафаревичу и А. Фазолино за полезные дискуссии. А. Ю. Аникин и С. Ю. Доброхотов благодарят Institute for Molecules and Materials at Radboud University за гостеприимство и возможность сделать часть этой работы во время визитов в институт.

Список литературы

- [1] C. Fusco, A. Fasolino, T. Janssen, *Eur. Phys. J. B*, **31**:1 (2003), 95–102; E. Pijper, A. Fasolino, *Phys. Rev. B*, **72**:16 (2005), 165328, 5 pp.
- [2] И. М. Гельфанд, *Докл. АН СССР*, **73**:6 (1950), 1117–1120; М. Г. Крейн, *Докл. АН СССР*, **73**:3 (1950), 445–448; М. Рид, Б. Саймон, *Методы современной математической физики*, т. 4: Анализ операторов, Мир, М., 1982; B. Simon, *Ann. Phys.*, **158**:2 (1984), 415–420; М. М. Скриганов, *Тр. МИАН СССР*, **171** (1985), 3–122; P. Kuchment, *Floquet Theory for Partial Differential Equations*, Birkhäuser, Basel, 1993; Д. В. Косыгин, А. А. Минасов, Я. Г. Синай, *УМН*, **48**:4(292) (1993), 3–130.
- [3] B. Helffer, J. Sjöstrand, *Commun. Partial Differ. Equations*, **9**:4 (1984), 337–408; *Ann. Inst. H. Poincaré Phys. Théor.*, **42**:2 (1985), 127–212.
- [4] C. Herring, *Rev. Modern Phys.*, **34**:4 (1962), 631–645.
- [5] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Курс теоретической физики*, т. 3: Квантовая механика. Нерелятивистская теория, Физматлит, М., 2004.
- [6] Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Статистическая физика. Часть 2. Теория конденсированного состояния*, Физматлит, М., 2004.
- [7] A. Martinez, *J. Math. Pures App.*, **66**:2 (1987), 195–215; *Bull. Soc. Math. Fr.*, **116**:2 (1988), 199–229.
- [8] С. Ю. Доброхотов, В. Н. Колокольцов, В. П. Маслов, *ТМФ*, **87**:3 (1991), 323–375.
- [9] B. Simon, *Ann. Math.*, **120** (1984), 89–118; В. П. Маслов, *Тр. МИАН*, **163** (1984), 150–180; С. Ю. Доброхотов, В. Н. Колокольцов, *ТМФ*, **94**:3 (1993), 426–434; 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*, Mechanical Engineering and Solid Mechanics Series, eds. O. N. Kirillov, D. E. Pelinovsky, John Wiley and Sons, Hoboken, NJ; ITSE, London, 2014, 85–110.
- [10] J. Brüning, S. Yu. Dobrokhoto, E. S. Semenov, *Regul. Chaotic Dyn.*, **11**:2 (2006), 167–180.
- [11] A. Yu. Anikin, *Russ. J. Math. Phys.*, **20**:1 (2013), 1–10; А. Ю. Аникин, *ТМФ*, **175**:2 (2013), 193–205.
- [12] M. I. Katsnelson, M. van Schilfgaarde, V. P. Antropov, B. N. Harmon, *Phys. Rev. A*, **54**:6 (1996), 4802–4809.
- [13] Й. Брюнинг, С. Ю. Доброхотов, Р. В. Некрасов, *ТМФ*, **175**:2 (2013), 206–225.

- [14] E. M. Harrell, *Ann. Phys.*, **119**:2 (1979), 351–369; A. Outassourt, *J. Func. Anal.*, **72**:1 (1987), 65–93; M. I. Weinstein, J. B. Keller, *SIAM J. Appl. Math.*, **47**:5 (1987), 941–958.
- [15] E. M. Harrell, *Commun. Math. Phys.*, **60**:1 (1978), 73–95; *Commun. Math. Phys.*, **75**:3 (1980), 239–261.
- [16] С. Ю. Славянов, *Дифференц. уравнения*, **5**:2 (1969), 313–325; E. Gildener, A. Patrascioiu, *Phys. Rev. D*, **16**:2 (1977), 423–430; A. M. Polyakov, *Nucl. Phys. B*, **120**:3 (1977), 429–456; G. Jona-Lasinio, F. Martinelli, E. Scoppola, *Commun. Math. Phys.*, **80**:2 (1981), 223–254; J. M. Combes, P. Duclos, R. Seiler, *J. Func. Anal.*, **52**:2 (1983), 257–301; Т. Ф. Панкратова, *Докл. АН СССР*, **276**:4 (1984), 795–798.
- [17] Дж. У. Милнор, *Теория Морса*, ЛКИ, М., 2008; Г. Зейферт, В. Трельфалль, *Вариационное исчисление в целом*, РХД, М., 2000.
- [18] С. В. Бологин, В. В. Козлов, *ПММ*, **42**:2 (1978), 245–250; *Вестн. Моск. ун-та. Сер. 1. Матем. Механ.*, 1980, № 4, 84–89.
- [19] В. И. Арнольд, В. В. Козлов, А. И. Нейштадт, *Математические аспекты классической и небесной механики*, Эдиториал УРСС, М., 2002.
- [20] A. Anikin, M. Rouleux, “Multidimensional tunneling between potential wells at non degenerate minima”, *Days on Diffraction 2014* (St. Petersburg, May 26–30, 2014), eds. O. V. Motygin, A. P. Kiselev, L. I. Goray, A. Ya. Kazakov, A. S. Kirpichnikova, IEEE, New York, 2014, 17–22.

Поступила в редакцию 23.12.2015