



НАНОСТРУКТУРЫ

математическая физика и моделирование



Nanostructures. Mathematical physics & modelling

НАНОСТРУКТУРЫ

математическая физика и моделирование

Nanostructures.
Mathematical Physics & Modelling

2015, volume 12(1)

Наноструктуры. Математическая физика и моделирование

Объединенная редколлегия:

Д.В. Быков, И.В. Волович, В.Л. Голо, В.В. Гусаров, П.Н. Дьячков, М.В. Карасев (зам. главного редактора), Ю.А. Косевич, Ю.Е. Лозовик, М.А. Мазо, В.П. Маслов (главный редактор), А.В. Махиборода (ответств. секретарь), А.Ю. Морозов, С.А. Никитов, Ю.И. Сезонов, А.К. Скуратов, И.С. Смирнов, Р.А. Сурис, В.А. Тулин, В.Е. Фортов, А.Р. Хохлов, А.В. Чаплик, Л.А. Чернозатонский, К.В. Шайтан; иностранные члены: А.С. Бакай, А. Шимизу; информационное обеспечение наноиндустрии: В.Н. Азаров, А.Д. Иванников, Ю.Л. Ижванов, В.П. Кулагин, А.Н. Тихонов

Электронная версия журнала размещается на сайте
<http://nano-journal.ru>

Адрес редакции:

Москва 109028, Б. Трехсвятительский пер., 3/12,
НИУ ВШЭ, Московский институт электроники и математики,
nano@miem.edu.ru

Москва

© 2015, Европейский центр по качеству

Содержание

Е.В. Выборный

**Координатное и импульсное туннелирование в одномерных
квантовых системах с дискретным спектром 5**

Ranjan Chaudhury

**Tautomeric mutation in DNA. A theoretical comparative study and synthesis
between various proposed quantum models 85**

Информация и правила для авторов 99

Contents

E.V. Vybornyi

**Coordinate and momentum tunneling in one-dimensional quantum systems
with discrete spectrum 5**

Ranjan Chaudhury

**Tautomeric mutation in DNA. A theoretical comparative study and synthesis
between various proposed quantum models 85**

The information and rules for authors 99

КООРДИНАТНОЕ И ИМПУЛЬСНОЕ ТУННЕЛИРОВАНИЕ В ОДНОМЕРНЫХ КВАНТОВЫХ СИСТЕМАХ С ДИСКРЕТНЫМ СПЕКТРОМ

Е.В. Выборный

*Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»,
Москва, Россия*

evgeniy.bora@gmail.com

Поступила 10.01.2015

В работе рассмотрена задача о построении квазиклассической асимптотики дискретного спектра и соответствующих стационарных состояний одномерного оператора Шредингера при резонансном туннелировании. Рассмотрены две основных модели: туннелирование в несимметричном двуканальном потенциале на прямой и импульсное туннелирование частицы в потенциальном поле на окружности. Для несимметричного двуканального потенциала построен критерий возникновения туннельного резонанса, получены необходимые и достаточные условия билокализации стационарных состояний, построены явные асимптотические формулы для величины расщепления в случае высоких энергетических уровней и для энергий, близких к положениям равновесия потенциала. Для задачи о динамическом туннелировании предложен общий операторный метод построения асимптотических формул для величины туннельного расщепления энергий. В задаче о туннелировании частицы на окружности предложенный метод позволил получить единую формулу для величины туннельного расщепления, применимую как в случае аналитического потенциала, так и для потенциала конечной гладкости. В качестве примера рассмотрена задача об импульсном туннелировании квантового маятника.

УДК 517.927.2:530.145

1 Введение

Туннельный эффект является одним из базовых квантово-механических эффектов и играет существенную роль в различных областях современной физики, в том числе в квантовой теории поля, спектроскопии молекул, а также в квантовой химии и некоторых вопросах биологии. Задача об аналитическом описании туннельных эффектов для различных квантово-механических моделей имеет богатую историю,

которая берет свое начало с момента становления квантовой механики [1, 2]. Детальный обзор классических результатов и приложений изложен, например, в книгах [3–6]. Современный рост интереса к изучению квантового туннелирования связан также с прогрессом в нанoeлектронике (см., например, [7]), где возникает возможность использования квантовых эффектов для качественно новых технологий, например, туннелирование в управляемом двумном потенциале часто используется как модель построения кубитов [8–10].

Одним из проявлений туннельного эффекта является проникновение квантовой частицы через потенциальный барьер, разделяющий две области классического движения в конфигурационном пространстве, — так называемое координатное туннелирование. Например, в симметричном двумном потенциале туннелирование через потенциальный барьер приводит к малому расщеплению энергетических уровней и двойной локализации волновых функций стационарных состояний квантовой частицы.

Другим проявлением туннельного эффекта является отражение квантовой частицы при движении выше потенциального барьера, которое также можно рассматривать как туннелирование через классически запрещенную область (барьер) в импульсном представлении [11–13]. Одним из проявлений импульсного туннелирования является малое расщепление спектра оператора Шредингера квантовой частицы, движущейся в потенциальном поле по окружности в роторном режиме, то есть с энергией, превышающий максимум потенциала.

Координатное и импульсное туннелирование являются частными случаями общего эффекта туннелирования между двумя различными траекториями в фазовом пространстве — так называемого динамического туннелирования. Динамическое туннелирование возникает в различных квантовомеханических моделях и активно изучается в последнее время [14–17]. Очень интересные динамические случаи туннелирования связаны с присутствием магнитного поля [18–20]. Исследование влияния туннелирования на структуру спектра проводилось также с использованием методов адиабатического приближения для оператора Шредингера с быстро осциллирующим потенциалом [21, 22].

Поскольку точное аналитическое описание туннельных эффектов удастся построить только в простых модельных случаях, для исследования данного круга задач обычно применяются асимптотические методы.

В настоящей работе туннельный эффект анализируется для одномерного оператора Шредингера с действительным потенциалом:

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

в приближении по малому параметру квазиклассического приближения $\hbar > 0$. В качестве основных моделей рассмотрена квантовая частица на прямой ($x \in \mathbb{R}$) в двумном потенциале и квантовая частица в потенциальном поле на окружности ($x \in \mathbb{S}$) в роторном режиме.

Общая спектральная теория оператора Шредингера $\hat{H}$ хорошо развита для достаточно обширного класса потенциалов (см., например, [23–25]). В данной работе рассматривается дискретный спектр оператора $\hat{H}$, а потенциал $V(x)$ предполагается достаточно гладким там, где это необходимо.

В разделе 2 настоящей работы представлен детальный обзор известных результатов и методов исследования туннелирования в одномерных системах с дискретным спектром, а в разделах 3 и 4 представлено подробное изложение новых результатов (частично данные результаты были ранее представлены автором в работах [26–28] и совместно с М. В. Карасевым в работах [29, 30]) для задачи о резонансном туннелировании в несимметричном двуюмном потенциале и для задачи о расщеплении энергий при динамическом туннелировании соответственно. Ниже во введении приведен краткий обзор рассматриваемых задач.

Координатное туннелирование

Одной из базовых моделей координатного туннелирования является движение квантовой частицы в двуюмном потенциале на прямой.

Хорошо известны результаты для случая зеркально-симметричного двуюмного потенциала. В этом случае спектр состоит из пар экспоненциально (при $\hbar \rightarrow 0$) близких точек, а соответствующие волновые функции стационарных состояний являются симметричными и антисимметричными. Следовательно, состояние, локализованное только в одной из двух потенциальных ям, не является стационарным, а представляется в виде линейной комбинации пары стационарных состояний с близкими значениями энергий. Это приводит к эффекту туннельной транспортировки. Состояние начинает совершать туннельные переходы между ямами и в определенные моменты времени становится практически полностью локализованным в другой потенциальной яме, чем яма, в которой оно было сосредоточено в начальный момент времени (см., например, [3, 5, 31]). Подобный эффект также называют резонансным туннелированием, так как в отличие от обычного туннелирования, когда лишь малая часть волны проходит через потенциальный барьер, в этом случае наблюдается полный переход состояния через потенциальный барьер. Частота подобных туннельных переходов определяется величиной малого расщепления энергетических уровней спектра оператора Шредингера.

Асимптотическая формула для величины туннельного расщепления энергий в случае симметричного потенциала была получена в работе [32] для высоких энергетических уровней и в работе [33] для случая нижних энергетических уровней (см. также [34–39]). Величина туннельного расщепления пары нижних энергетических уровней известна также и в случае многомерного симметричного потенциала [40–43].

С физической точки зрения большой интерес представляет также случай несимметричного потенциала [3, 5, 7, 9, 44, 45]. Тогда задача существенно усложняется, однако примеры, рассмотренные численно, по-прежнему демонстрируют возможность возникновения резонансного туннелирования при определенных настройках потенциала [6, 31, 44, 46, 47].

Одной из основных задач настоящей работы является построение и строгое обоснование асимптотики спектра и стационарных состояний оператора Шредингера $\hat{H}$ с несимметричным двуюмным потенциалом и определение условий, при которых эти состояния являются бислокализованными, то есть условий туннельного резонанса. Данные вопросы были рассмотрены на физическом уровне строгости в работах [1, 3, 31, 45], а некоторые строго обоснованные результаты были получены в [41, 43, 48]. Подробное изложение известных результатов и открытых проблем в случае несимметричного двуюмного потенциала приведено ниже в разделе 2.2.

Важный класс примеров туннельного резонанса возникает при рассмотрении двумных несимметричных потенциалов, зависящих от внешнего параметра. Предположим, что одна из потенциальных ям двумного потенциала является фиксированной “физической” потенциальной ямой, а вторая — является варьируемой пробной ямой, ее глубина и ширина являются внешними управляемыми параметрами. Состояние в начальный момент времени сосредоточено в заданной физической потенциальной яме. Возникновение резонансного туннелирования при определенной настройке пробного потенциала называют эффектом туннельного захвата состояния, поскольку тогда состояние начинает совершать туннельные переходы между потенциальными ямами. Критические значения внешних параметров, при которых возникает туннельный захват состояния, представляют интерес с физической точки зрения [45], они были рассмотрены численно для конкретного двумного потенциала в работе [44]. В настоящей работе (см. раздел 3.6) рассмотрена задача о построении явных аналитических формул для значений параметров настройки пробного потенциала, при которых происходит туннельный захват состояния в случае прямоугольной пробной потенциальной ямы.

При рассмотрении туннелирования в несимметричном двумном потенциале особую важность приобретает обоснование полученных результатов, поскольку некоторые работы, опубликованные ранее в физической литературе, содержат противоречивые выводы. Например, в работе Сонга [49] сделана попытка найти необходимые и достаточные условия возникновения резонансного туннелирования и построить квазиклассические формулы для соответствующих энергетических уровней и стационарных состояний, но эта работа не согласуется с результатами, представленными и строго доказанными ранее в работе [48]. Ниже в разделе 3.8 показано, что работа [49] содержит существенные ошибки, которые приводят к принципиально неверному результату.

Сложность построения квазиклассического приближения для туннельных эффектов в задаче о несимметричном двумном потенциале связана с тем, что многие формулы “стандартного” квазиклассического приближения, такие как правила квантования энергетических уровней, правила перехода через точку поворота, формулы теории возмущений и другие, используемые на физическом уровне строгости как точные, в действительности являются асимптотическими, всего лишь со степенной точностью по $\hbar$, а в задачах, включающих резонансное туннелирование, необходимо проводить вычисления с экспоненциальной точностью.

Одной из интересных задач, в которой возникает несимметричный потенциал, является задача о разрушении резонансного туннелирования в симметричном двумном потенциале при деформации одной стороны потенциального барьера, разделяющего ямы. Предполагается, что деформация не затрагивает области классического движения, а следовательно, может оказывать влияние на квантовую частицу только за счет туннельных эффектов. Это так называемая задача “блоха на слоне” [48, 50, 51]. В работе [48] было доказано, что в этой ситуации волновые функции перестают быть билокализованными, а величина расщепления, хотя и остается экспоненциально малой (при $\hbar \rightarrow 0$), но становится экспоненциально больше, чем расщепление в исходном симметричном двумном потенциале до деформации. В работе [48] был найден показатель экспоненты величины туннельного расщепления в этой задаче, но открытым оставался вопрос о построении главного члена асимптотического разложения полностью с учетом амплитудного множителя (см. также [52]). Данная задача рассмотрена ниже в разделах 3.7 и 3.8 настоящей работы.

Импульсное туннелирование

Другим важным проявлением туннельного эффекта является надбарьерное отражение частицы от потенциала, то есть импульсное туннелирование. В этом случае квантовая частица тоже преодолевает барьер, но не потенциальный, а в импульсном представлении. Важная модель, в которой импульсное туннелирование играет существенную роль — это одномерное движение квантовой частицы по окружности в потенциальном поле. Здесь, для энергий, существенно выше максимума потенциала, спектр оператора Шредингера состоит из пар близких точек, а соответствующие волновые функции стационарных состояний в импульсном представлении являются симметричными и антисимметричными. Аналогично тому, как это происходит в двумерном потенциале на прямой, здесь также возникает эффект туннельной транспортации, только в данном случае происходит туннельный переход от состояния, отвечающего движению частицы по окружности в одном направлении, в состояние, отвечающее движению в противоположном направлении.

Вычисление туннельного расщепления энергий дискретного спектра квантовой частицы на окружности эквивалентно задаче о вычислении ширины лакун — промежутков между зонами в блоховском спектре оператора Шредингера на прямой с периодическим потенциалом $V(x)$ (см., например, [53–55]). Простой пример $V(x) = \cos(x)$ отвечает квантовому маятнику [56], а соответствующее уравнение Шредингера эквивалентно уравнению Матье. В более общем случае, когда потенциал аналитический и топология линий Стокса имеет вид как при $V(x) = \cos(x)$, асимптотика ширины лакун была построена в работе Дыхне [57], полное строгое доказательство и разбор еще нескольких случаев представлен в работе Симоняна [58] (см. также [12, 59, 60]). Существует также ряд глубоких результатов о связи гладкости потенциала со скоростью убывания ширины лакун при росте энергии [53, 61]. В случае аналитического потенциала известно, что ширина лакун экспоненциально убывает [62], а в случае потенциала конечной гладкости — убывает по степенному закону [63].

В настоящей работе представлен общий метод вычисления величины расщепления энергий в случае динамического туннелировании частицы между двумя траекториями периодического движения (см. раздел 4.1). Для импульсного туннелирования частицы на окружности это дает единый подход к вычислению величины расщепления, как в случае аналитического потенциала, так и для потенциала конечной гладкости (см. раздел 4.4).

2 Туннельные эффекты в одномерных системах с дискретным спектром. Обзор результатов и проблем

Одной из простейших моделей, где возникает нетривиальный туннельный эффект, является одномерный оператор Шредингера с потенциалом, имеющим вид двойной ямы, в общем случае — несимметричной. Задача об аналитическом описании спектра и волновых функций в двумерном потенциале имеет богатую историю:

первые результаты, носящие качественный характер, содержались еще в работе Хунда [1] 1927 года.

Другим проявлением туннельного эффекта является отражение квантовой частицы при движении выше потенциального барьера, которое также можно рассматривать как туннелирование через классически запрещенную область (барьер) в импульсном представлении [11, 13]. Это частный случай общего эффекта туннелирования между двумя различными траекториями в фазовом пространстве — так называемое динамическое туннелирование. Динамическое туннелирование возникает в различных квантовомеханических моделях и активно изучается в последнее время [14–17]. Важный пример динамического туннелирования дает задача о движении частицы по окружности под действием потенциального поля в случае, если ее энергия выше максимума потенциала (роторный режим).

Обе модели туннелирования: квантовая частица в двуяльном потенциале и динамическое туннелирование частицы на окружности, — объединяет наличие пары периодических траекторий классического движения для заданного уровня энергии E . Для двуяльного потенциала — это движение в левой и правой потенциальной яме, а для частицы на окружности — это движение в одном из двух возможных направлений. В классической механике частица движется только по одной из этих траекторий, в зависимости от начальных данных (положения и скорости), а в квантовой механике возможно туннелирование между соответствующими состояниями.

Даже для простейших моделей не удастся построить описание туннелирования точно и аналитически в общем виде. Аналитическое описание влияния туннельных эффектов на спектр и стационарные состояния оператора Шредингера удастся получить только в квазиклассическом приближении, то есть асимптотически при $\hbar \rightarrow 0$, где $\hbar$ — эффективная (полученная после перенормировки и обезразмеривания задачи) постоянная Планка.

В этом приближении в ряде случаев удастся аналитически описать эффекты туннельного расщепления дискретного спектра и билокализацию стационарных состояний. В данном разделе приведен обзор соответствующих результатов и описываются проблемы, решению которых посвящена настоящая работа.

2.1 Квазиклассическое приближение без учета туннелирования

В данном разделе изложены хорошо известные результаты, полученные при помощи стандартных методов квазиклассического приближения (методов ВКБ). Подробное изложение этих методов представлено в книге [64], а также в [34, 41, 59, 65].

Рассмотрим квазиклассическую асимптотику дискретного спектра и соответствующих стационарных состояний одномерного уравнения Шредингера:

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

где $V(x)$ — достаточно гладкий действительный потенциал. Соответствующий оператор обозначим через $\hat{H}$:

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

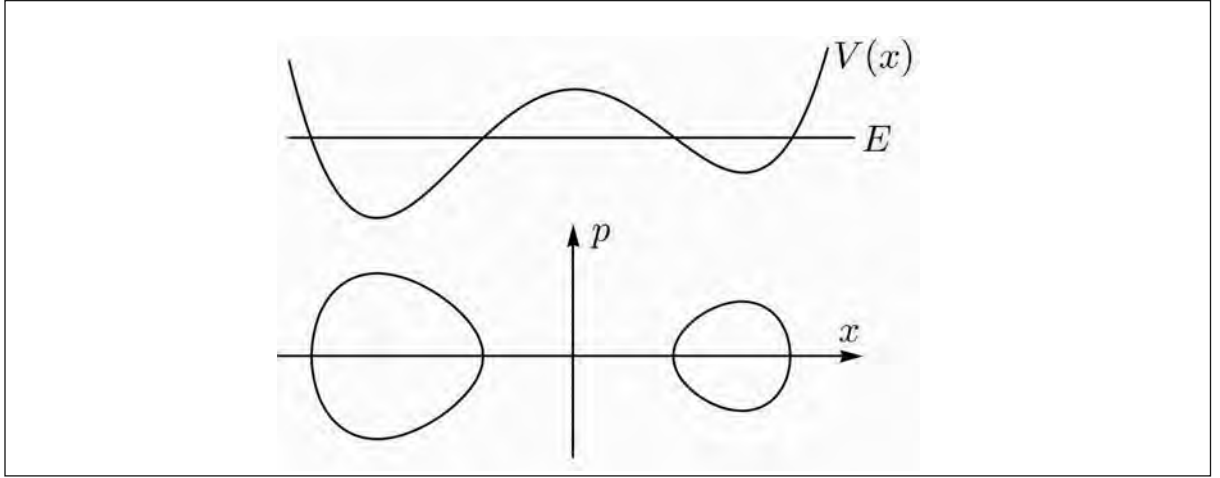


Рис. 1

Квазиклассическое приближение устанавливает соответствие между некоторыми последовательностями (спектральными сериями) приближенных собственных значений оператора $\hat{H}$ и семействами инвариантных торов классической системы с гамильтонианом $H = p^2/2 + V(x)$ (см. [64]). В одномерном случае невырожденные инвариантные торы сводятся к периодическим траекториям движения и определяются линиями уровня $\{H(x, p) = E\}$ классического гамильтониана (см., например, [66]).

Приближенные собственные значения, с точностью $O(\hbar^2)$, определяются правилом дискретизации Планка-Бора-Зоммерфельда [34, 64]:

$$\frac{1}{2\pi} \oint p dx = \hbar(n + \sigma/4), \quad (3)$$

где σ — индекс Маслова, $n \sim 1/\hbar$ — целое число, а интеграл берется по периодической траектории классического движения на уровне энергии E . Для частицы в потенциальной яме на прямой $\sigma = 2$ (см., например, [34]), а для частицы, движущейся по окружности в роторном режиме, $\sigma = 0$ (см., например, работы [12, 20, 59] и ниже в разделе 4.2 настоящей работы). Из правила (3) следует, что соседние уровни заданной серии находятся на расстояниях порядка $\hbar$ друг от друга.

Для каждой энергии $E = E_n$, удовлетворяющей правилу (3), можно построить квазимоду ψ_n — приближенное решение стационарного уравнения Шредингера (1), локализованное вблизи соответствующей периодической траектории. Квазимоды и их роль при построении приближенных решений уравнений, включающих симметрии, были рассмотрены в работах [35, 67].

Предположим теперь, что каждому значению энергии E из некоторой фиксированной области соответствует пара периодических траекторий, то есть множество $\{H(x, p) = E\}$ состоит из двух компонент связности, диффеоморфных окружности. Следовательно, классическая частица, обладающая заданной энергией E , движется по одной из двух периодических траекторий, в зависимости от начальных условий. На рисунке 1 представлена пара периодических траекторий для случая двукратного потенциала на прямой.

Правило дискретизации (3) определяет две спектральные серии $E_n^{(1)}$, $\psi_n^{(1)}$ и $E_m^{(2)}$, $\psi_m^{(2)}$. Спектр оператора $\hat{H}$ в окрестности энергии E совпадает с объединением этих серий с точностью $O(\hbar^2)$. При таком объединении энергетический уровень из одной серии может приближенно совпасть с энергетическим уровнем из другой серии:

$$E_n^{(1)} - E_m^{(2)} = O(\hbar^2). \quad (4)$$

Тогда в спектре оператора $\hat{H}$ присутствует пара близких собственных значений, при этом говорят, что произошло квазивырождение, то есть совпадение двух точек спектра в рамках точности рассматриваемого приближения.

Заметим, что в одномерном случае на прямой дискретный спектр оператора Шредингера невырожден, если потенциал непрерывен [23, 34]. Пример двумного потенциала с особенностью в области барьера, для которого спектр оператора Шредингера оказывается вырожденным, разобран в книге [46]. В задаче об импульсном туннелировании частицы на окружности подобное вырождение спектра возможно и в случае аналитического потенциала [53, 55, 68, 69].

Если квазивырождения не происходит, то есть расстояние от фиксированного уровня $E = E_n^{(i)}$ одной серии до ближайшего уровня из другой серии много больше $\hbar^2$, то в $O(\hbar^2)$ окрестности точки E существует единственная точка спектра оператора $\hat{H}$, а соответствующая волновая функция близка (с точностью до множителя) к $\psi_n^{(i)}$. В этом случае стационарное состояние практически полностью локализовано вблизи только одной из двух траекторий периодического движения. Таким образом, если квазивырождение не происходит, то для построения асимптотики спектра и стационарных состояний оператора $\hat{H}$ достаточно построить асимптотические серии собственных значений и соответствующие квазимоды. В этом случае туннельные эффекты не играют существенной роли при описании спектра и соответствующих стационарных состояний.

Вырождение спектра также означает отсутствие туннелирования, так как в этом случае состояния, локализованные вблизи только одной классической траектории, будут близки к стационарным.

С другой стороны, в случае квазивырождения точные собственные функции близки к некоторым линейным комбинациям состояний $\psi_n^{(1)}$ и $\psi_m^{(2)}$, то есть они могут быть локализованы вблизи сразу двух различных периодических траекторий. Подобные стационарные состояния называются биллокализованными. Такие состояния приводят к туннелированию квантовой частицы с одной траектории периодического движения на другую (см. раздел 3.4), в этом случае говорят, что наблюдается туннельный резонанс между соответствующими периодическими траекториями.

2.2 Двумный потенциал на прямой

Двумный потенциал на прямой является простейшей моделью, где возможен туннельный резонанс. Ниже приведена постановка основных задач, возникающих при изучении туннелирования в симметричном и несимметричном двумном потенциале, и дан обзор основных классических результатов и методов исследования.

В дальнейшем будет рассматриваться не весь спектр оператора $\hat{H}$, а только часть спектра в окрестности фиксированной энергии E . Предполагается, что вещественный потенциал $V(x)$ имеет вид двойной ямы (см. рис. 2), то есть классическая область движения частицы ($V(x) < E$) состоит из двух конечных интервалов. Между двумя ямами находится потенциальный барьер и энергия E не близка к вершине потенциального барьера. Хорошо известно, что тогда спектр оператора $\hat{H}$ в некоторой окрестности E является дискретным и невырожденным (см., например, [23–25]).

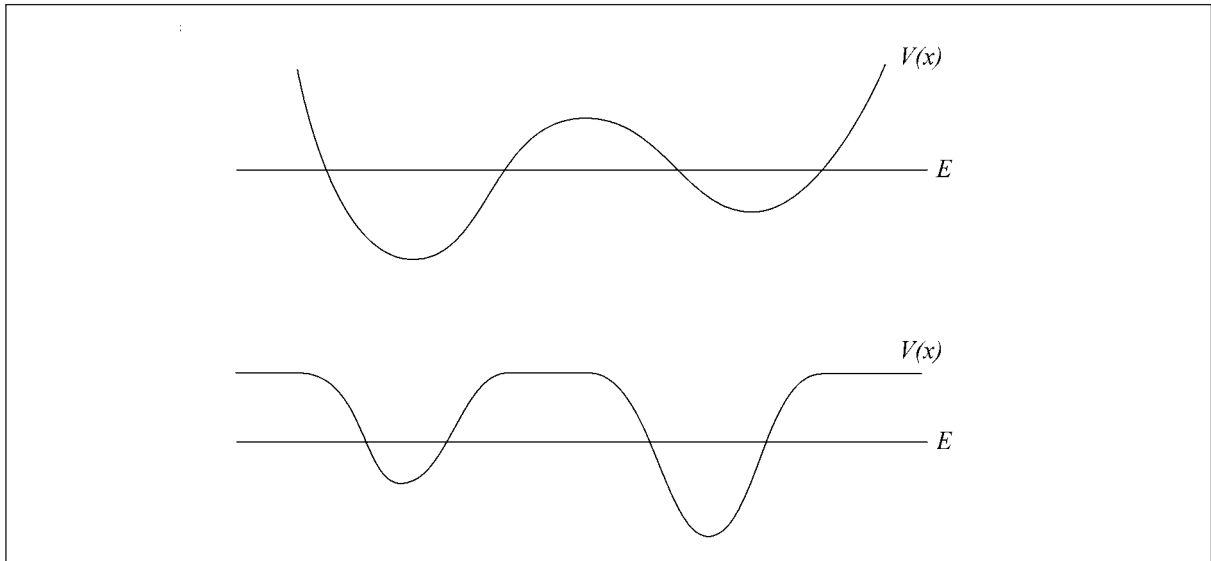


Рис. 2

Впервые качественное исследование спектра оператора Шредингера с двумным потенциалом было проведено в работе Хунда [1]. Показано, что если адиабатически увеличивать потенциальный барьер, разделяющий две ямы, то спектр оператора Шредингера распадется на две серии значений: “отдельные” спектры правой и левой потенциальных ям. Увеличение потенциального барьера приводит к полному отсутствию туннелирования между ямами, так как на волновые функции налагается условие Дирихле ($\psi = 0$) в некоторой окрестности вершины потенциального барьера. Тогда спектр исходного оператора $\hat{H}$ приближенно является объединением двух спектральных серий, соответствующих разделенным ямам. При объединении этих серий может возникнуть эффект квазивырождения — совпадения (в рамках точности рассматриваемого приближения) двух собственных значений из разных серий. Например, такой эффект всегда происходит в случае зеркально-симметричного двумного потенциала, поскольку из-за симметрии спектры отдельных ям в точности совпадают. В работе Хунда было показано, что при квазивырождении в спектре оператора $\hat{H}$ возникает пара близких собственных значений, но не были сделаны аналитические оценки для величины туннельного расщепления энергий.

Представление спектра оператора Шредингера с двумным потенциалом в виде объединения двух спектральных серий позволяет провести качественный анализ зависимости спектра оператора от внешнего параметра. При изменении параметра энергетические уровни из разных серий могут пересекаться. Тогда соответствующие точные собственные значения либо сближаются без пересечения — это так называемое “отталкивание” энергетических уровней (“квазипересечение” или “avoided crossing”), либо пересекаются, тогда при некотором значении параметра в спектре оператора $\hat{H}$ присутствует вырожденное собственное значение кратности 2. Поскольку спектр одномерного оператора Шредингера на прямой невырожден, при квазивырождении всегда происходит именно отталкивание энергетических уровней. С другой стороны, в многомерном случае или для задачи на окружности возможны пересечения энергетических уровней при изменении внешнего параметра.

В работе [2] показано, что для вырождения энергетических уровней необходима согласованная настройка более чем одного внешнего параметра, настройка двух

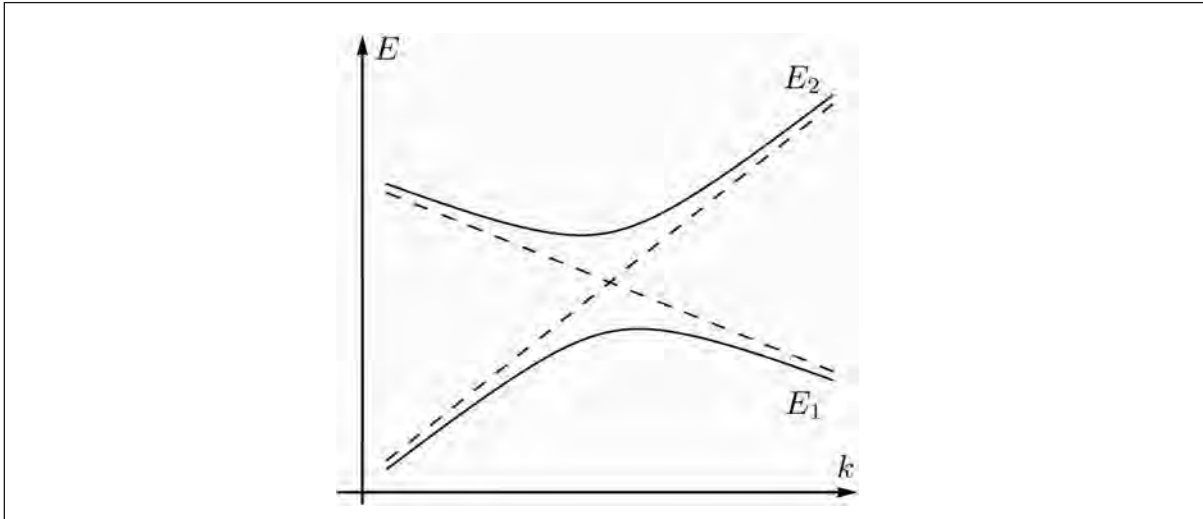


Рис. 3

— для случая действительных матричных элементов оператора $\hat{H}$, и трех — в случае общей эрмитовой матрицы. Следовательно, отталкивание энергетических уровней является типичным в случае квазивырождения. Также в работе [2] показано, что в случае отталкивания энергетических уровней кривые зависимости точных собственных значений $E_{1,2}(k)$ от внешнего параметра k вблизи точки квазипересечения приближенно имеют вид гипербол (см. рис. 3):

$$E_{1,2}(k) \simeq (E + kA) \pm \sqrt{B^2 + C^2 k^2}. \quad (5)$$

Результаты работы [2] применимы не только к операторам Шредингера вида (2), но также и в случае произвольного самосопряженного гамильтониана $\hat{H}$.

Симметричный двумный потенциал

Рассмотрим подробнее случай симметричного двумного потенциала. Как уже было отмечено ранее, тогда все энергетические уровни, расположенные существенно ниже вершины потенциального барьера, являются квазивырожденными и в спектре оператора Шредингера возникают пары близких собственных значений. Классической задачей является оценка величины расщепления этих энергетических уровней.

Заметим, что стандартный метод (метод ВКБ [59, 70]) построения глобальных квазиклассических асимптотик, основанный на согласовании в точках поворота, не позволяет построить асимптотику стационарных состояний и туннельного расщепления спектра при резонансном туннелировании, так как величина туннельного расщепления экспоненциально мала при $\hbar \rightarrow 0$, а правила перехода обеспечивают лишь степенную точность по малому параметру $\hbar$. Основной метод, позволяющий находить асимптотику туннельного расщепления энергий в симметричном случае, основан на формуле Херринга [71]. Этот подход позволяет свести задачу о вычислении туннельного расщепления спектра к задаче о построении асимптотики соответствующих стационарных состояний в области потенциального барьера, что позволяет избежать необходимости построения глобальных асимптотик стационарных состояний.

Предположим, что многомерный двумный потенциал $V(x_1, \dots, x_k)$ симметричен относительно плоскости M и соответствующая симметрия переводит одну яму в

другую. Тогда для туннельного расщепления справедлива асимптотическая формула Херринга:

$$\Delta \simeq \hbar^2 \int_M (\psi_1 \nabla \psi_2 - \psi_2 \nabla \psi_1) ds, \quad (6)$$

где $\psi_{1,2}$ — действительные нормированные стационарные состояния, отвечающие паре квазырожденных собственных значений. Таким образом, задача о вычислении туннельного расщепления сводится к построению асимптотики стационарных состояний в окрестности плоскости M , то есть в классически запрещенной (туннельной) области. Хорошо известно, что волновые функции экспоненциально убывают вглубь классически запрещенной области [34, 41, 72, 73], следовательно, туннельное расщепление энергий является экспоненциально малым, если потенциальный барьер является достаточно большим.

В одномерном случае формула (6) имеет вид:

$$\Delta \simeq \hbar^2 (\psi_1 \psi'_2 - \psi_2 \psi'_1) \Big|_{x=0}, \quad (7)$$

где точка $x = 0$ — центр потенциального барьера.

В случае симметричного двуюмного потенциала волновые функции стационарных состояний ψ_1 и ψ_2 являются четными и нечетными соответственно. Следовательно, они локализованы сразу в двух потенциальных ямах, то есть являются бислокализованными. Пусть ψ_l и ψ_r — пара приближенных волновых функций, локализованных только в левой и правой потенциальной яме соответственно. Учитывая симметрию, можно считать, что $\psi_r(x) = \psi_l(-x) = \varphi(x)$. Тогда волновые функции $\psi_{1,2}$, отвечающие паре квазивыожденных стационарных состояний, приближенно имеют вид:

$$\psi_{1,2}(x) \simeq \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi(x) \pm \varphi(-x)). \quad (8)$$

Подставляя разложение (8) в формулу (7), получаем

$$\Delta \simeq 2\hbar^2 \varphi(0) \varphi'(0). \quad (9)$$

Многомерный аналог этой формулы был рассмотрен в работе [38]:

$$\Delta \simeq 2\hbar^2 \int_M \varphi \nabla \varphi ds. \quad (10)$$

Заметим, что точность формул (9) и (10) существенно зависит от выбора “одноямной” волновой функции $\varphi(x)$. Условия, накладываемые на выбор φ , были впервые исследованы в работе Херринга [71], см. также [35, 41, 42].

Классической задачей о вычислении туннельного расщепления энергетических уровней в симметричном случае является задача о спектре электрона в молекулярном ионе водорода H_2^+ в предположении, что два положительно заряженных ядра фиксированы и находятся на большом расстоянии R друг от друга [1, 34, 38, 71, 74]. В работе [74] в качестве φ была взята волновая функция основного состояния атома водорода — это так называемый метод линейных комбинаций атомарных орбиталей или LCAO метод [74, 75], где волновую функцию электрона в молекуле представляют в виде некоторой линейной комбинации волновых функций электрона в отдельных атомах. Херринг [71] показал, что подобный выбор приближения для волновых функций

электрона (выбор φ) не является достаточно точным для вычисления туннельного расщепления энергий по формуле (10). Несмотря на то, что волновая функция $\varphi(x)$, построенная ЛСАО методом, дает хорошее приближение для стационарных состояний (8) вблизи ядер, она обладает неправильной асимптотикой в области барьера, и следовательно, не пригодна для вычисления расщепления. Для построения подходящей функции φ необходимо учитывать влияние внешнего поля положительного заряда второго ядра на волновую функцию основного состояния атома водорода. Итоговая формула для величины туннельного расщепления в атомной системе единиц имеет вид:

$$\Delta = \frac{4}{e} R e^{-R} [1 + O(1/R)]. \quad (11)$$

Дальнейшие обобщения данной задачи на случай более сложных молекул приведены в работах [76, 77], см. также [3, 5].

Данная задача о туннелировании электрона между двумя ядрами, фиксированными на большом расстоянии R друг от друга, допускает квазиклассическое приближение. Для этого необходимо провести перенормировку координат так, чтобы расстояние между ядрами стало порядка единицы. Тогда возникает малый параметр квазиклассического приближения $\hbar = 1/R$. Заметим, что при этом условия применимости квазиклассического приближения (см., например, [34]) выполнены только в области барьера, а движение электрона вблизи ядер не является квазиклассическим.

Другая классическая задача: получить общую формулу для величины расщепления спектра оператора Шредингера с произвольным симметричным двукратным потенциалом в квазиклассическом приближении. Рассматривается спектр $\hat{H}$ вблизи фиксированной энергии E такой, что уравнение $V(x) = E$ имеет 4 простых корня — точки поворота. Тогда условия применимости квазиклассического приближения справедливы как в области барьера, так и в потенциальных ямах. Подставляя ВКБ асимптотику состояний $\psi_{1,2}$ в формулу (7), получаем для величины расщепления энергий знаменитую асимптотическую формулу Ландау-Лифшица [34] (см. также [32, 36, 59, 78]):

$$\Delta = E_2 - E_1 = \frac{\hbar\omega}{\pi} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int \sqrt{2(V(x) - E)} dx\right) [1 + O(\hbar)]. \quad (12)$$

Здесь $E = E_{1,2} + O(\hbar^2)$, ω — частота классического движения для энергии E , а интеграл берется по подбарьерной области (где $V(x) > E$), разделяющей две ямы. Интеграл в показателе экспоненты в формуле (12) называют туннельным действием или “действием по инстантону”. Данная формула справедлива в предположении, что энергия E не близка к минимумам потенциальных ям и к вершине разделяющего их барьера (при $\hbar \rightarrow 0$). Из формулы (12) видно, что туннельное расщепление энергетических уровней является экспоненциально малым при $\hbar \rightarrow 0$.

Таким образом, спектр оператора Шредингера с симметричным двукратным потенциалом в окрестности энергии E состоит из пар близких точек, положение которых с точностью $O(\hbar^2)$ определяется условием (3), расстояние между соседними парами имеет порядок $\hbar$, а для величины расщепления каждой пары справедлива формула (12).

Формула (12) справедлива для энергий, не близких к минимумам потенциала, то есть для энергетических уровней с большими номерами $n \sim 1/\hbar$. С другой стороны, с физической точки зрения большой интерес представляет расщепление основного

состояния, то есть для $n = 0, 1, 2, \dots$ (см., например, [3, 5, 39]). Если минимумы потенциала являются невырожденными, то формула для расщепления нижних энергетических уровней (конечные n) была получена в работе [33] (см. также [35, 37]). Стоит заметить, что асимптотические формулы для конечных n и для больших $n \sim 1/\hbar$ не согласуются, то есть формула (12) дает неверную оценку для расщепления пары нижних энергетических уровней [37, 78–80]. Правильная формула для нижних энергетических уровней имеет вид, аналогичный (12) но с дополнительным множителем $\sqrt{\pi/e} \approx 1.08$. Данный вопрос о сравнении асимптотических формул для величины туннельного расщепления верхних и нижних энергетических уровней будет рассмотрен ниже в разделе 3.3 для общего случая несимметричного потенциала.

Асимптотика туннельного расщепления пары нижних энергетических уровней для симметричной ямы известна и в многомерном случае. Показатель экспоненты (логарифмический предел) был найден в работах [43, 72], а итоговая формула для расщепления, включающая амплитуду, была получена в [40], см. также [41, 79–82].

Несимметричный потенциал

Рассмотрим случай несимметричного потенциала. Такие потенциалы представляют интерес с физической точки зрения (см. в [3, 5, 6, 9]). В несимметричном случае задача существенно усложняется. Однако, примеры численного счета по-прежнему демонстрируют возможность появления двойной локализации собственных функций и малого расщепления соответствующих энергетических уровней [6, 31, 46, 47].

Из качественного анализа, проведенного в работе [1], и общих методов квазиклассического приближения (см. раздел 2.1) следует, что спектр оператора $\hat{H}$ с двуканальным потенциалом с некоторой точностью состоит из точек E_l и E_r , соответствующих спектрам операторов Шредингера в левой и правой потенциальной яме в отдельности. Пусть $\psi_{l,r}$ — приближенные решения уравнения (1) (квазимоды), локализованные в левой и правой потенциальной яме соответственно. В качестве первого приближения для “одноямных” энергий $E_{l,r}$ и волновых функций $\psi_{l,r}$ можно использовать соответствующие спектральные серии, полученные методом ВКБ (см. раздел 2.1).

Если квазивырождения энергетических уровней не происходит, то квазимоды ψ_l и ψ_r являются хорошими приближениями для волновых функций стационарных состояний. С другой стороны, при квазивырождении в спектре оператора $\hat{H}$ присутствует пара близких точек $E_{1,2}$, а соответствующие волновые функции приближенно имеют вид линейных комбинаций состояний $\psi_{l,r}$:

$$\begin{aligned}\psi_1 &\simeq c_l^1 \psi_l + c_r^1 \psi_r, \\ \psi_2 &\simeq c_l^2 \psi_l + c_r^2 \psi_r.\end{aligned}$$

Основной задачей при квазивырождении в случае несимметричного потенциала является определение констант c_i^j в разложении стационарных состояний $\psi_{l,r}$ и величины расщепления соответствующих энергетических уровней $\Delta = E_2 - E_1$.

Заметим, что формулы (6)–(10) существенно опираются на симметрию потенциала и не применимы в несимметричном случае. Другой метод, при помощи которого можно найти величину расщепления и определить вид волновых функций в случае квазивырождения для оператора Шредингера $\hat{H}$ с двуканальным потенциалом, основан на рассмотрении сужения оператора $\hat{H}$ на подпространство, образованное двумя векторами ψ_l и ψ_r , и последующей диагонализации $\hat{H}$. Этот метод, называемый

“двухуровневая аппроксимация”, широко используется в задачах квантовой механики (см. в [3, 4, 41]). В данном методе производится вычисление матричных элементов $\langle \hat{H} \psi_i, \psi_j \rangle$ для $i, j = l, r$; искомая величина расщепления Δ находится как расстояние между собственными значениями данной матрицы, а собственные векторы данной матрицы дают приближение для коэффициентов c_i^j линейного разложения собственных векторов $\psi_{1,2}$ оператора $\hat{H}$ по системе $\psi_{l,r}$.

Поскольку подпространство, на которое происходит сужение, не является инвариантным для оператора $\hat{H}$, то данный метод дает лишь приближенный результат, точность которого сильно зависит от того, насколько близко данное подпространство к инвариантному, то есть зависит от выбора ψ_l и ψ_r . Общее математическое обоснование данного метода опирается на некоторые специальные теоремы из теории возмущений линейных самосопряженных операторов, которые были представлены в работах [35, 42] (см. также [41, 83]). Эти результаты изложены ниже в разделе 3.9 вместе с другими полезными теоремами из теории линейных операторов.

Отметим, что различные вариации метода двухуровневой аппроксимации применялись к вычислению туннельного расщепления энергий в несимметричном случае в работах Хелффера–Шестранда [41, 42, 52, 84], Панкратовой [83] и Сонга [49].

Важно подчеркнуть, что приближенные волновые функции $\psi_n^{(1)}$ и $\psi_m^{(2)}$, построенные методом ВКБ, не являются достаточно точными для применения метода двухуровневой аппроксимации, так как дают лишь степенную точность по малому параметру $\hbar$, а при этом известно, что расщепление энергий может быть экспоненциально малым.

В работах Хелффера–Шестранда [41, 42, 52] было предложено в качестве ψ_l , E_l выбирать решение задачи Штурма–Лиувилля в окрестности Ω_l левой ямы, которая не пересекается с правой ямой, с условиями Дирихле на границе области Ω_l . Волновая функция ψ_r и энергия E_r выбираются аналогично. Показано, что при таком выборе можно получить достаточно точные выражения для энергий исходного уравнения в терминах решения задачи Дирихле для отдельных ям, если рассматривать достаточно большие окрестности Ω_i . Эти окрестности должны пересекаться и содержать точку $x = c$ — центр потенциального барьера с точки зрения метрики Агмона (действия по инстантону) [41, 42]. Основополагающая роль этой метрики при оценке туннельных эффектов изучалась в работах [43, 72, 73, 85] и в серии работ [41, 42, 52, 84].

Ниже в работе будет показано (см. разделы 3.7 и 3.8), что такой выбор областей Ω_i является не только достаточным, но и необходимым условием применимости метода двухуровневой аппроксимации. В частности, как показано в разделе 3.8, выбор функций $\psi_{l,r}$, использованный в работе Сонга [49], приводит к неверному результату, поскольку области Ω_i в работе [49] были выбраны непересекающимися. Доказанный нами факт необходимости условий, накладываемых на области Ω_i , обнаруживает также неточность, имеющуюся в работе Панкратовой [83], где для определения центра несимметричного барьера было использовано обычное расстояние на прямой, а не метрика Агмона.

Этим методом, при правильном выборе областей Ω_i , в работе [42] была получена асимптотика расщепления пары нижних энергетических уровней в случае многомерного несимметричного потенциала с двумя совпадающими невырожденными минимумами (без явного выражения для амплитуды) в терминах энергий отдельных ям E_l и E_r . А именно, было показано (см. [41, 42]), что туннельное расщепление имеет вид:

$$\Delta \simeq \sqrt{(E_r - E_l)^2 + \delta^2}, \quad (13)$$

где δ определяется по формуле, близкой к формуле Херринга (7):

$$\delta = \hbar^2 (\psi_l \psi_r' - \psi_r \psi_l')_{x=c}. \quad (14)$$

Формула (13) получена в предположении, что имеет место квазивырождение и $E_r - E_l = O(\delta)$.

В симметричном случае уровни из разных ям совпадают, то есть $E_l = E_r$, тогда формулы для расщепления (13)–(14), очевидно, переходят в формулу Херринга (7).

Кроме структуры спектра, для различных приложений существенную роль играет вид волновых функций стационарных состояний (см., например, [3, 5, 31, 44, 45]). Задача состоит в определении разложения собственных функций оператора $\hat{H}$ по функциям ψ_l и ψ_r в случае квазивырождения. Поскольку собственные функции определены с точностью до нормирующего множителя и ортогональны, то достаточно знать асимптотику вероятностей $P_l(\hbar)$ и $P_r(\hbar)$ обнаружить частицу в левой и правой яме для одной из пары собственных функций. Будем говорить, что волновая функция бислокализована, если обе вероятности $P_i(\hbar)$ существенно отличны от нуля при достаточно малых $\hbar$, то есть $P_i(\hbar) = p_i + O(\hbar)$ и $p_i > 0$.

Эффект бислокализации собственных функций тесно связан с величиной туннельного расщепления энергий. В работе [85] (см. также [43]) для двух нижних энергетических уровней в многомерном потенциале доказано, что если обе вероятности $P_{l,r}(\hbar)$ имеют положительный нижний предел при $\hbar \rightarrow 0$, то для величины расщепления справедлива оценка сверху $\Delta = O(e^{-S/\hbar})$, где S — туннельное действие по инстантону между минимумами потенциала. Условие существования положительных нижних пределов для вероятностей $P_{l,r}(\hbar)$ можно считать слабым условием двойной локализации стационарных состояний. Таким образом, в работах [43, 85] показано, что из бислокализации волновых функций основного состояния следует туннельное расщепление соответствующего энергетического уровня.

После глубоких результатов полученных в работах [41–43, 52, 85], тем не менее, открытым остается ряд важных вопросов, в том числе вопрос о главном члене асимптотического разложения величины расщепления Δ и вопрос о предельных значениях вероятностей $P_l(\hbar)$ и $P_r(\hbar)$ при $\hbar \rightarrow 0$ для пары квазивырожденных состояний в несимметричном потенциале в случае нижних и высоких энергетических уровней, которые, в частности исследуются в настоящей работе (см. раздел 3.1).

Важные примеры несимметричного двуюмного потенциала могут быть получены при различных деформациях или возмущениях симметричного потенциала. В работе [48] рассматривалась задача о деформации одной стороны потенциального барьера симметричного двуюмного потенциала для пары нижних энергетических уровней. Было показано, что подобная деформация приводит к разрушению двойной локализации собственных функций, а для величины расщепления справедлива оценка

$$\Delta = \exp\left(-\frac{2S + o(1)}{\hbar}\right), \quad (15)$$

где S — действие по инстантону между точкой поворота и областью деформации. Многомерное обобщение данного результата дано в работе [51]. Разрушение резонансного туннелирования при деформации небольшого участка одной стороны потенциального барьера называют эффектом “блоха на слоне”.

Оценка (15) позволяет вычислить показатель экспоненты для величины смещения энергетических уровней Δ , но открытой остается задача о построении главного члена асимптотического разложения (с учетом амплитуды) величины Δ для различных деформаций потенциала. Данная задача подробно рассмотрена в разделах 3.7–3.8 настоящей работы.

2.3 Динамическое туннелирование на окружности

Рассмотрим задачу о динамическом туннелировании частицы на окружности. Предполагается, что действительный потенциал $V(x)$ является периодической функцией с периодом 2π , аналогичное условие периодичности накладывается и на волновые функции стационарных состояний $\psi(x)$. Рассмотрим случай, когда энергия частицы выше максимума потенциала $V(x)$, — так называемый роторный режим. Тогда классическая частица вращается (пробегаёт 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.

Известно, что вычисление туннельного расщепления дискретного спектра частицы на окружности эквивалентно задаче о вычислении ширины лакун — промежутков между зонами в блоховском спектре оператора Шредингера на прямой с периодическим потенциалом (см., например, [53–55, 86]). Общее описание структуры спектра частицы на окружности приведено, например, в [12], а также в разделе 4.2 настоящей работы.

Дискретный спектр оператора $\hat{H}$ в окрестности фиксированной энергии E выше максимума потенциала состоит из пар близких точек, а положение пар приближенно определяется правилом дискретизации Планка-Бора-Зоммерфельда (3), где индекс Маслова $\sigma = 0$. Классической задачей является вычисление асимптотики расщепления спектра (ширины лакун) в квазиклассическом приближении для различных классов потенциала.

Известно, что в случае аналитического потенциала величина туннельного расщепления является экспоненциально малой при $\hbar \rightarrow 0$ (см. [53, 62]). Асимптотика величины расщепления в этом случае определяется комплексными точками поворота уравнения (1) и соединяющими их линиями Стокса [59]. Большой интерес представляет случай $V(x) = \cos(x)$, отвечающий квантовому маятнику (см., например, [87, 88]). Тогда соответствующее уравнение Шредингера (1) сводится к уравнению Матье [56].

В случае, когда потенциал аналитический и топология линий Стокса имеет вид как при $V(x) = \cos(x)$ (см. рис. 4), асимптотика ширины лакун была построена в работе Дыхне [57]. Поскольку энергия E больше максимума потенциала $V(x)$, то действительная ось x лежит в некоторой полосе, ограниченной линиями Стокса, соединяющими комплексные точки поворота уравнения (1). В работе [57] было показано, что если уравнение (1) имеет только одну простую точку поворота x_0 такую, что $\operatorname{Re} x_0 \in [0, 2\pi)$ и $\operatorname{Im} x_0 > 0$, а линии Стокса, выходящие из этой точки, образуют верхнюю границу полосы, которая содержит действительную ось x (см. рис. 4), то для величины расщепления справедлива асимптотическая формула:

$$\Delta = \frac{\hbar\omega}{\pi} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^{x_0} \sqrt{2(E - V(x))} dx \right) [1 + O(\hbar)], \quad (16)$$

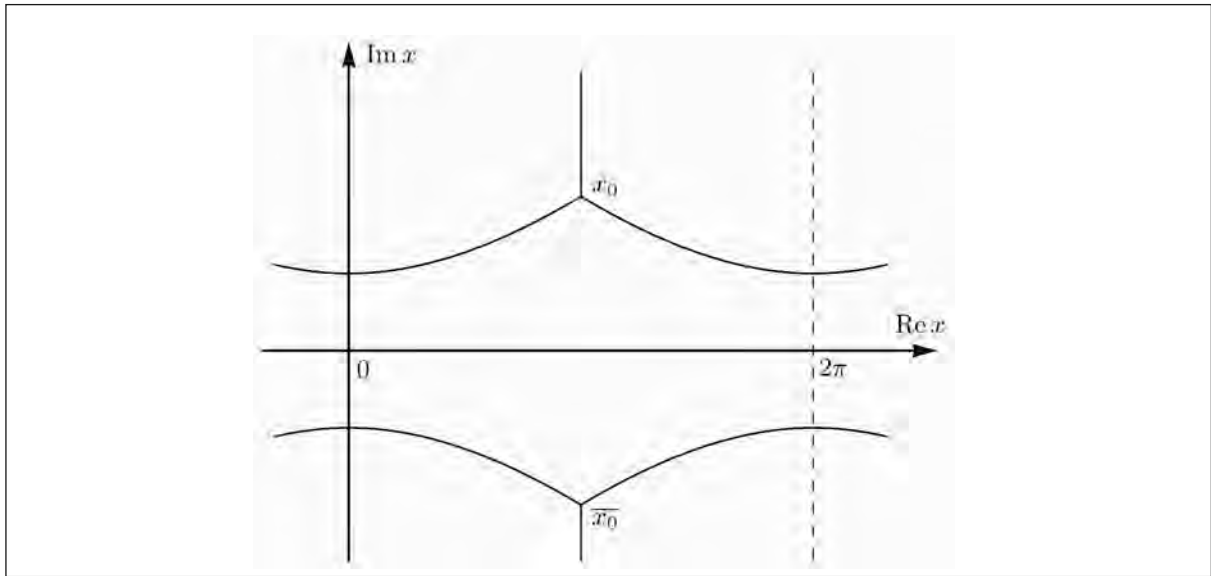


Рис. 4

где ω — классическая частота движения по окружности в потенциале $V(x)$ с энергией E , а ветвь корня выбрана так, что $\sqrt{2(E - V(x))} > 0$ при действительных x . Тогда показатель экспоненты является отрицательным. Полное строгое доказательство формулы (16) и разбор еще нескольких случаев представлен в работе Симоняна [58] (см. также [59]), а в работе [12] дана глубокая интерпретация формулы Дыхне-Симоняна (16) в геометрических терминах комплексифицированного фазового пространства.

Существует несколько различных асимптотических режимов в задаче об оценке ширины лагун (см. соответствующие замечания в работах [89, 90]). 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, но включает дополнительное предположение о малости потенциала по сравнению с полной энергией. Можно показать, что при таком предположении из формулы Дыхне-Симоняна (16) следует известная формула Харрелла-Аврона-Саймона [89, 91] для ширины зон неустойчивости уравнения Матье. Другой важный асимптотический режим в этой задаче возникает, если предположить, что потенциал $V(x)$ мал по сравнению с общей энергией E , но энергия E и соответствующий номер лагуны являются конечными. Этот режим не является квазиклассическим и рассматривается при помощи методов теории возмущений (см., например, [93, 94]).

Заметим также, что если энергия частицы ниже вершины потенциального барьера в периодическом потенциале, то экспоненциально малой становится не ширина лагун, а ширина спектральных зон оператора Шредингера на прямой [60, 86]. Этот эффект связан с обычным координатным туннелированием через потенциальный барьер. Данная задача также может быть сведена к вычислению величины расщепления дискретного спектра оператора Шредингера на окружности, только тогда необходимо рассматривать не потенциал $V(x)$, а потенциал $V(2x)$ (см. раздел 4.2). Например, для задачи о квантовом маятнике, при энергиях меньше вершины потенциального барьера, область классического движения состоит из двух интервалов — потенциальных ям, разделенных двумя барьерами. Тогда для величины туннельно-

го расщепления справедлива формула вида (12) с дополнительным множителем 2 в амплитуде, поскольку туннелирование происходит сразу через два потенциальных барьера [60, 86, 90]. Также как и в симметричном двуюмном потенциале, различные виды принимают формулы для расщепления вблизи минимумов потенциала и для высоких энергетических уровней [78].

2.4 Постановка задач

Несмотря на активное изучение влияния туннелирования на спектр и волновые функции в одномерных квантовых системах, в этой области имеются важные открытые вопросы. Формулировки основных рассматриваемых задач представлены в данном разделе.

Работа посвящена получению квазиклассической асимптотики спектра и волновых функций стационарного уравнения Шредингера (1) для двух основных моделей: несимметричного двуюмного потенциала и динамического туннелирования частицы на окружности. В данной работе рассматриваются следующие основные группы задач.

Критерий двойной локализации

В разделе 3.1 рассмотрена задача о построении асимптотики волновых функций стационарных состояний в случае квазивырождения спектра в несимметричном двуюмном потенциале на прямой. В этом случае необходимо определить, какие линейные комбинации состояний ψ_l и ψ_r из левой и правой ямы близки к точным стационарным состояниям исходной двойной ямы. Таким образом, нужно построить необходимые и достаточные условия двойной локализации волновых функций, а также найти асимптотику величины туннельного расщепления соответствующих энергий.

Задача построения критерия двойной локализации тесно связана с результатами работы [85], в которой для основного состояния было показано, что из двойной локализации следует экспоненциальная малость туннельного расщепления (обзор представлен в разделе 2.2). Таким образом, задача состоит в обобщении этого утверждения на случай высоких энергетических уровней и исследовании обратного утверждения: следует ли из малости расстояния между парой точек спектра то, что соответствующие стационарные состояния бислокализированы. Также важной задачей является построение явных асимптотических формул для величины туннельного расщепления при различных энергетических режимах в несимметричном двуюмном потенциале. Детальное исследование этих задач проведено в разделе 3 настоящей работы.

Критерий двойной локализации стационарных состояний для несимметричного двуюмного потенциала играет существенную роль для описания эффекта туннельного захвата состояния. В настоящей работе (см. раздел 3.6) рассмотрена задача о построении явных аналитических формул для значений параметров настройки пробного потенциала, при которых происходит туннельный захват состояния, в случае прямоугольной пробной потенциальной ямы.

Задача “блеха на слоне”

Рассматривается задача о построении асимптотики величины туннельного расщепления энергий при деформации одной стороны барьера симметричного двоямного потенциала.

Учитывая результаты работы [42], получаем (см. раздел 3.7), что деформация одной стороны барьера, разделяющего две ямы, влияет только на одну из одноямных энергий E_l или E_r , в зависимости от того, какая из сторон барьера была деформирована. Следовательно, для определения расщепления энергий по формуле (13) необходимо решить задачу о так называемом “туннельном возмущении” дискретного спектра одноямного потенциала. Задача состоит в оценке возмущения энергии E стационарного состояния в одноямном потенциале $V(x)$ при добавлении к потенциалу непрерывной функции $f(x)$, локализованной только в классически запрещенной зоне, при этом малость $f(x)$ не предполагается. Такое изменение потенциала никак не влияет на движение классической частицы с энергией E , а в квантовой механике наличие туннельных эффектов приводит к экспоненциально малому (при $\hbar \rightarrow 0$) возмущению спектра оператора Шредингера вблизи энергии E .

В работе [48] была доказана оценка (15) для величины туннельного расщепления в данной задаче, но открытым остается вопрос о построении главного члена асимптотики. Решение этой задачи построено в разделах 3.7–3.8 настоящей работы. Получена формула для главного члена асимптотики, позволяющая вычислить амплитуду величины расщепления, а также рассмотрено обобщение данной задачи на случай деформации несимметричного потенциала.

Динамическое туннелирование

Задача состоит в обобщении метода вычисления туннельного расщепления энергий, основанного на формуле Херринга, на случай туннелирования между симметричными орбитами в фазовом пространстве, то есть на задачу о динамическом туннелировании. В качестве базового примера рассматривается импульсное туннелирование частицы, движущейся по окружности в роторном режиме. Данная задача рассмотрена в разделе 4 настоящей работы.

3 Туннелирование в несимметричной двойной яме

В данном разделе, с точки зрения эффектов туннелирования, рассматривается квазиклассическая асимптотика дискретного спектра и соответствующих стационарных состояний одномерного уравнения Шредингера на прямой (1):

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

где $V(x)$ — гладкий действительный потенциал. Спектр оператора Шредингера рассматривается вблизи некоторой фиксированной энергии E , для которой потенциал $V(x)$ можно считать двоямным. В разделе 3.1 построен критерий двойной локализации собственных функций в случае несимметричного потенциала и получена асимптотическая формула для величины туннельного расщепления соответствующего энергетического уровня. Аналогичный результат для случая энергий, близких

к невырожденному минимуму потенциала, представлен в разделе 3.2, а в разделе 3.3 проведено сравнение полученных формул для высоких и низких энергетических уровней.

Билокализованные стационарные состояния в двумном потенциале представляют большой интерес, поскольку они приводят к возникновению туннельных переходов (туннельной транспортиции) состояний, локализованных только в одной яме в начальный момент времени. Детальное описание динамики состояния в двойной яме при туннельном резонансе дано в разделе 3.4, а в разделе 3.5 приведен ряд простых примеров.

В разделе 3.6 рассмотрена задача о возникновении эффекта туннельного захвата и туннельной транспортиции состояния из заданной финитной потенциальной ямы в пробную прямоугольную потенциальную яму. В этом случае получены аналитические формулы для значений параметров пробной ямы при которых возникает туннельный резонанс.

Задача о влиянии деформации потенциала в классически запрещенных областях на спектр оператора Шредингера рассмотрена в разделах 3.7 и 3.8. В разделе 3.7 доказана асимптотическая формула для величины туннельного возмущения энергий, а в разделе 3.8 показано, как данный результат может быть применен для анализа деформаций потенциального барьера двумного потенциала в задаче “блоха на слоне”.

В заключительном разделе данной главы (раздел 3.9) для удобства ссылок представлен ряд теорем из теории возмущений дискретного спектра самосопряженных операторов.

3.1 Критерий биллокализации волновых функций

В этом разделе представлен критерий двойной локализации волновых функций в двумном потенциале.

Рассмотрим спектр оператора $\hat{H}$ в $O(\hbar^2)$ -окрестности фиксированного значения энергии E . Предположим, что энергия E больше, чем минимумы двумного потенциала и меньше, чем вершина потенциального барьера (см. рис. 5). Уравнение $V(x) = E$ имеет 4 простых корня — точки поворота, и $V(x) > E + e$ при достаточно больших x и некотором $e > 0$. Пусть потенциальный барьер находится между точками поворота x_l и x_r , то есть $V(x) > E$ при $x_l < x < x_r$.

Определим точку c из равенства

$$\int_{x_l}^c |p(x)| dx = \int_c^{x_r} |p(x)| dx, \quad (17)$$

где $p(x) = \sqrt{2(E - V(x))}$ — классический импульс частицы в потенциальном поле $V(x)$. Точка c является центром потенциального барьера с точки зрения инстантонного действия. Пусть точки a и b выбраны так, что

$$x_l < a < c < b < x_r. \quad (18)$$

Введем два гладких потенциала $V_l(x)$ и $V_r(x)$ (см. рис. 5), удовлетворяющих следующим двум условиям:

1. Потенциал $V_l(x) \equiv V(x)$ при $x \leq b$, а $V_r(x) \equiv V(x)$ при $x \geq a$.

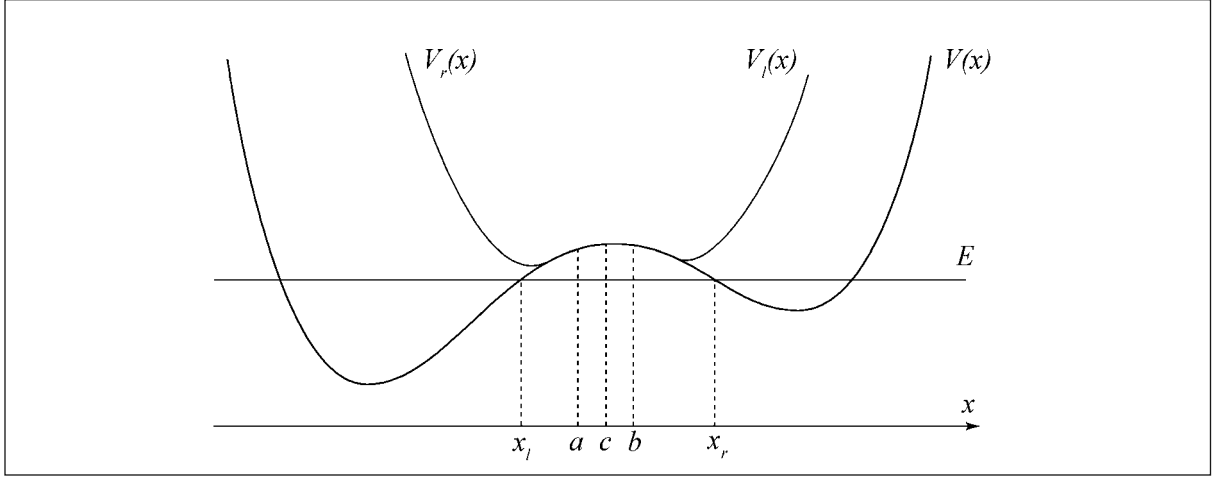


Рис. 5

2. Потенциал $V_l(x) > E + e$ при $x \geq b$, а $V_r(x) > E + e$ при $x \leq a$, для некоторого $e > 0$.

Определим соответствующие операторы Шредингера с потенциалами V_l и V_r :

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

Потенциалы $V_l(x)$ и $V_r(x)$ являются одноямыми для энергии E , поскольку классическая область движения частицы в потенциале $V_i(x)$, $i = l, r$, представляет собой один интервал. Следовательно, для спектров операторов $\hat{H}_i$ справедливы хорошо известные результаты квазиклассического анализа (см. [34, 59]), перечисленные ниже.

- I Вблизи энергии E спектр $\hat{H}_i$ является дискретным и невырожденным. Расстояние между соседними точками спектра имеет порядок $\hbar$.
- II Пусть E_i принадлежит спектру оператора $\hat{H}_i$, $i = l, r$, и близка к E с точностью $O(\hbar^2)$, а ψ_i – соответствующая нормированная собственная функция. Тогда справедливы, равномерно по $x \in [a, b]$, асимптотические формулы:

$$\begin{aligned} \psi_l(x) &= \frac{C_l}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_l}^x |p| dx\right) [1 + O(\hbar)], \\ \psi_r(x) &= \frac{C_r}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_r} |p| dx\right) [1 + O(\hbar)], \end{aligned} \quad (19)$$

и эту асимптотику можно дифференцировать.

- III Вещественные нормировочные константы $C_{l,r}$ имеют вид:

$$C_i = \sqrt{\frac{\omega_i}{2\pi}}, \quad i = l, r, \quad (20)$$

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

Операторы $\hat{H}_{l,r}$, фактически, описывают левую и правую потенциальную яму исходного оператора $\hat{H}$ в отдельности. Несложно показать (см. доказательство теоремы 3.1), что спектр оператора $\hat{H}$ вблизи E может быть получен с экспоненциальной точностью при объединении спектров операторов $\hat{H}_i$, $i = l, r$. При таком объединении может возникнуть эффект квазивырождения энергетического уровня, когда энергия E_l оказывается экспоненциально близка к энергии E_r . Если квазивырождения не происходит, то в качестве приближенной собственной функции оператора $\hat{H}$ можно взять функцию ψ_l или ψ_r (см. теорему 3.9). С другой стороны, в случае квазивырождения энергетических уровней в спектре оператора $\hat{H}$ присутствует пара экспоненциально близких точек спектра, а собственные функции приближенно имеют вид линейных комбинаций ψ_l и ψ_r (см. теорему 3.10).

Пусть ψ — собственная функция оператора $\hat{H}$. Вероятности $P_{l,r}(\hbar)$ обнаружить частицу в левой и правой потенциальной яме могут быть определены как интегралы от квадрата модуля $\psi(x)$ при $x < c$ для левой ямы и при $x > c$ для правой ямы. Из условия нормированности волновых функций получаем:

$$P_l(\hbar) + P_r(\hbar) = 1.$$

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

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

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

Тогда обе вероятности $P_l(\hbar)$ и $P_r(\hbar)$ обнаружить частицу как в левой, так и в правой потенциальной яме существенно отличны от нуля и для них справедливы асимптотические формулы:

$$\begin{aligned} P_l(\hbar) &= p_l + O(\hbar) = \frac{1}{1 + \mu^2} + O(\hbar), \\ P_r(\hbar) &= p_r + O(\hbar) = \frac{\mu^2}{1 + \mu^2} + O(\hbar). \end{aligned} \quad (21)$$

От значения величины μ во многом зависит динамика частицы в двумном потенциале, как будет показано ниже в разделе 3.4. В случае двойной локализации волновых функций для некоторой энергии, говорят, что имеет место резонансное туннелирование.

Определим величину $\delta(\hbar)$:

$$\delta(\hbar) = \hbar^2 \left[\psi_l \frac{d\psi_r}{dx} - \psi_r \frac{d\psi_l}{dx} \right]_{x=c}, \quad (22)$$

Из (19) следует, что

$$\delta(\hbar) = 2\hbar C_l C_r \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_l}^{x_r} |p| dx \right) [1 + O(\hbar)]. \quad (23)$$

Величина $\delta(\hbar)$ является характерным масштабом экспоненциальной малости для туннельных эффектов в двумном потенциале. Учитывая формулы (20), для высоких энергетических уровней, получаем:

$$\delta(\hbar) = \hbar \frac{\sqrt{\omega_l \omega_r}}{\pi} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_l}^{x_r} |p| dx \right) [1 + O(\hbar)]. \quad (24)$$

Следующая теорема является критерием резонансного туннелирования и устанавливает связь между расщеплением энергетических уровней Δ , двойной локализацией волновых функций и расстоянием между E_l и E_r .

Теорема 3.1 (Критерий резонансного туннелирования).

Для фиксированного неотрицательного числа λ следующие три условия эквивалентны:

1. Вблизи энергии E у оператора $\hat{H}$ существует билокализованная собственная функция, для которой

$$\mu = \sqrt{1 + \lambda^2} \pm \lambda. \quad (25)$$

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

$$\Delta = \sqrt{1 + \lambda^2} \delta(\hbar) [1 + O(\hbar)]. \quad (26)$$

3. Вблизи энергии E в спектре оператора $\hat{H}_i$ существует точка E_i ($i = l, r$) такая, что верна асимптотическая формула

$$|E_r - E_l| = \delta(\hbar) [\lambda + O(\hbar)]. \quad (27)$$

Перед доказательством теоремы приведем ряд замечаний.

В работе [42] (см. также [41, 52]), при слегка отличающемся от нашего определении одноямных энергий $E_{l,r}$ и состояний $\psi_{l,r}$ (см. обзор в разделе 2.2), для пары нижних энергетических уровней было доказано, что из условия 3 данной теоремы следует условие 2, а для величины $\delta(\hbar)$ была получена асимптотическая оценка

$$\delta(\hbar) = A(\hbar) \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_l}^{x_r} |p| dx \right),$$

но без явного построения асимптотики величины амплитуды A .

Теорема 3.1 обобщает результаты, полученные в работе [42], на случай высоких энергетических уровней. Кроме того, теорема 3.1 демонстрирует, что справедливо обратное утверждение (из условия 2 следует условие 3), и наконец, теорема 3.1 устанавливает существенную связь величины расщепления и двойной локализации волновых функций, которая ранее не была отмечена.

Данная теорема обобщает результаты, известные для случая симметричного потенциала (см. обзор в разделе 2.2). Очевидно, что в случае симметрии потенциала выполнены все три условия теоремы при $\lambda = 0$. В этом случае из (24), (26) конечно, получается асимптотическая формула Ландау-Лифшица (12):

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

В общем случае число λ , как и μ , количественно характеризует двойную локализацию волновых функций стационарных состояний. Заметим, что число λ однозначно выражается через μ , поскольку в формуле (25) знак “+” или “−” берется, если $\mu > 1$ или $\mu < 1$ соответственно.

Следствие 3.1. Для каждого фиксированного λ существует два значения $\mu = \mu_{1,2}$, где $\mu_1 = \mu_2^{-1}$, они отвечают паре собственных функций, соответствующих паре близких собственных значений оператора $\hat{H}$. Из существования одной биллокализованной собственной функции с $\mu = \mu_1$ следует наличие второй с обратным показателем $\mu = \mu_2 = \mu_1^{-1}$. Если одна собственная функция больше локализована в левой яме ($\mu_1 < 1$), то другая больше локализована в правой ($\mu_2 > 1$), и наоборот.

Если $\lambda = 0$, а следовательно, $\mu = 1$, то стационарные состояния равномерно распределены между двумя ямами $p_l = p_r = 1/2$ (см. формулу (21)), и имеет место полная туннельная транспортиция, как показано в разделе 3.4. Тогда, для величины расщепления справедлива асимптотическая формула

$$\Delta = \hbar \frac{\sqrt{\omega_l \omega_r}}{\pi} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_l}^{x_r} |p| dx \right) [1 + O(\hbar)].$$

Следствие 3.2. Если выполнены условия теоремы 3.1, то для собственных значений $E_{1,2}$ и соответствующих волновых функций $\psi_{1,2}$ с экспоненциальной точностью при $\hbar \rightarrow 0$ справедливы следующие приближенные формулы:

$$\begin{aligned} E_1 &\simeq \frac{E_l + E_r}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{(E_l - E_r)^2 + \delta^2}, \\ E_2 &\simeq \frac{E_l + E_r}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{(E_l - E_r)^2 + \delta^2}, \end{aligned} \quad (28)$$

$$\begin{aligned} \psi_1 &\simeq \cos(\alpha) \psi_l + \sin(\alpha) \psi_r, \\ \psi_2 &\simeq -\sin(\alpha) \psi_l + \cos(\alpha) \psi_r, \end{aligned} \quad (29)$$

где

$$\begin{aligned} \operatorname{tg}(\alpha) &\simeq \frac{E_l - E_r}{\delta} + \sqrt{1 + \left(\frac{E_l - E_r}{\delta} \right)^2}, \\ \alpha &\in (0, \pi/2). \end{aligned} \quad (30)$$

Исключая константу λ из формул (25) и (26), можно найти уравнение связи между расщеплением энергетических уровней $\Delta = E_2 - E_1$ и величиной μ :

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

справедливое при резонансном туннелировании. Выражая μ через вероятности p_l и p_r (21), получаем:

$$\Delta = \frac{\delta(\hbar)}{2\sqrt{p_l p_r}} [1 + O(\hbar)]. \quad (31)$$

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

Если подставить явный вид величины $\delta(\hbar)$ из (24) в (31), то придем к следующей формуле.

Следствие 3.3. Для величины расщепления энергетических уровней справедлива формула

$$\Delta = \frac{\hbar}{2\pi} \sqrt{\frac{\omega_l \omega_r}{p_l p_r}} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_l}^{x_r} |p| dx \right) [1 + O(\hbar)]. \quad (32)$$

Формула (32) позволяет определять характер локализации собственных функций по величине расщепления соответствующих энергетических уровней. Из (31) следует, что с ростом расщепления Δ быстро исчезает двойная локализация собственных функций, то есть одна из вероятностей $p_{l,r}$ стремится к 0. При этом минимальное расщепление $\Delta = \delta(\hbar)[1 + O(\hbar)]$ соответствует максимальной билокализации с $p_l = p_r = 1/2$.

Также заметим, что теорема 3.1 применима не только в случае гладкого двукратно-го потенциала и высоких энергетических уровней, а может быть обобщена на случай произвольной двойной ямы или на случай туннельного резонанса между двумя соседними ямами многоямного потенциала. Тогда необходимо следить за справедливостью положений I и II, вычислить нормировочные константы $C_{l,r}$ и, соответственно, определить величину $\delta(\hbar)$ по формуле (23).

Аналогично можно рассмотреть случай когда потенциал зависит от $\hbar$. Такая зависимость может возникнуть, например, неявно при зависимости потенциала от внешнего параметра.

Доказательство теоремы 3.1

Пусть a', b' не зависят от $\hbar$ и

$$x_l < a < a' < c < b' < b < x_r.$$

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

$$\sigma_l(x) \equiv 1, \quad x \leq b';$$

$$\sigma_l(x) \equiv 0, \quad x \geq b;$$

$$\sigma_r(x) \equiv 1, \quad x \geq a';$$

$$\sigma_r(x) \equiv 0, \quad x \leq a.$$

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

$$\sigma_i(x) [V(x) - V_i(x)] \equiv 0, \quad i = l, r,$$

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

где в последнем равенстве $\sigma_i(x)$ понимается как оператор умножения на функцию.

Для начала докажем вспомогательное утверждение.

Предложение. *Справедливость любого из трех условий теоремы 3.1 влечет наличие квазивырождения, то есть существование E_i в спектре $\hat{H}_i$, $i = l, r$, таких, что расстояние между ними экспоненциально мало.*

Доказательство предложения. Пусть справедливо условие 1 и ψ — билокализованная собственная функция оператора $\hat{H}$, а E — соответствующие собственное значение. Пусть

$$u_i(x) = \frac{1}{\sqrt{p_i}} \sigma_i(x) \psi(x), \quad i = l, r.$$

Тогда

$$\|u_l\|^2 = \frac{1}{p_l} \int_{-\infty}^{+\infty} |\sigma_l \psi|^2 dx = \frac{1}{p_l} \left(P_l(\hbar) + \int_c^b |\sigma_l \psi|^2 dx \right) = 1 + O(\hbar),$$

поскольку $p_l > 0$, так как ψ билокализована, а интеграл по $[c, b]$ экспоненциально мал. Аналогично имеем

$$\|u_r\| = 1 + O(\hbar).$$

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

$$(\hat{H}_i - E) u_i = \frac{\sigma_i}{\sqrt{p_i}} (\hat{H}_i - E) \psi + \frac{1}{\sqrt{p_i}} [\hat{H}_i, \sigma_i(x)] \psi.$$

Первое слагаемое в правой части равно нулю, так как

$$\sigma_i (\hat{H}_i - E) \psi = \sigma_i (\hat{H} - E) \psi = 0,$$

а второе слагаемое имеет вид:

$$\frac{1}{\sqrt{p_i}} [\hat{H}_i, \sigma_i(x)] \psi = -\frac{\hbar^2}{2\sqrt{p_i}} \left[\frac{d^2}{dx^2}, \sigma_i(x) \right] \psi = -\frac{\hbar^2}{2\sqrt{p_i}} \left(\sigma_i'' + 2\sigma_i' \frac{d}{dx} \right) \psi.$$

Таким образом,

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

Поскольку носители функций $\sigma_i'(x)$ и $\sigma_i''(x)$ вложены в отрезок $[a, b]$, где функция $\psi(x)$ и ее производная экспоненциально малы, получаем, что u_i являются квазимодами для $\hat{H}_i$. Применяя лемму 3.1, получаем, что из условия 1 теоремы 3.1 следует квазивыврождение спектра с экспоненциальной точностью.

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

Определим функции

$$u_i(x) = \sigma_i(x) \psi_i(x), \quad i = l, r.$$

Тогда u_i являются квазимодами для $\hat{H}_i$ с экспоненциальной точностью:

$$\|u_i\| = 1 + O(\hbar),$$

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

Применяя лемму 3.1 получаем, что квазивыврождение следует также и из условия 2 теоремы 3.1.

Для доказательства данного предложения остается рассмотреть случай, когда справедливо условие 3 теоремы 3.1. Тогда квазивыврождение, очевидно, имеет место, поскольку величина $\delta(\hbar)$ экспоненциально мала.

Предложение полностью доказано.

Мы доказали, что справедливость любого из трех условий теоремы влечет наличие квазивыврождения. Предположим, что для некоторого λ справедливо хотя бы одно из условий данной теоремы. Пусть E_i — собственное значение оператора $\hat{H}_i$, а ψ_i — соответствующая собственная функция, $i = l, r$. Следовательно, величина $|E_r - E_l|$ экспоненциально мала.

Введем ортонормированные функции:

$$\begin{aligned} u_l(x) &= \gamma_1 \sigma_l(x) \psi_l(x), \\ u_r(x) &= \gamma_2 (\sigma_r(x) \psi_r(x) + \gamma_3 \sigma_l(x) \psi_l(x)), \\ \langle u_l, u_r \rangle &= 0, \quad \langle u_l, u_l \rangle = \langle u_r, u_r \rangle = 1. \end{aligned}$$

Учитывая нормированность $\psi_i(x)$, $i = l, r$, получаем, что

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

Из условия ортогональности u_1 и u_2 получаем:

$$\begin{aligned} 0 = \langle u_l, u_r \rangle &= \gamma_1 \gamma_2 \int_a^b \sigma_l \sigma_r \psi_l \psi_r dx + \gamma_2 \gamma_3 \gamma_1^{-1}, \\ \gamma_3 &= O(\delta(\hbar)). \end{aligned}$$

Следовательно, при $x \in (a, b)$ справедливы асимптотические формулы:

$$\begin{aligned} u_l(x) &= \sigma_l(x) \psi_l(x) [1 + O(\hbar)], \\ u_r(x) &= \sigma_r(x) \psi_r(x) [1 + O(\hbar)]. \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} (\hat{H} - E_l) u_l &= \left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d^2}{dx^2}, \sigma_l(x) \right] \gamma_1 \psi_l(x) + \sigma_l(x) \gamma_1 (\hat{H}_l - E_l) \psi_l(x) = \\ &= \hbar \sigma'_l(x) C_l \sqrt{|p|} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_l}^x |p| dx \right) [1 + O(\hbar)]. \end{aligned}$$

Аналогично для $u_r(x)$:

$$(\hat{H} - E_r) u_r = -\hbar \sigma'_r(x) C_r \sqrt{|p|} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_r} |p| dx \right) [1 + O(\hbar)].$$

Пусть

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

Заметим, что величина ε является экспоненциально малой, а ε^2 экспоненциально меньше, чем $\delta(\hbar)$:

$$\varepsilon^2 \ll \delta \ll \varepsilon.$$

Таким образом, справедлива оценка

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

Следовательно, u_l и u_r действительно являются квазимодами для оператора $\hat{H}$ с экспоненциальной точностью при $\hbar \rightarrow 0$.

Теперь дополнительно предположим, что

$$|E_r - E_l| = O(\varepsilon).$$

Тогда можно воспользоваться теоремой 3.10. Ниже будет показано, что если это предположение не выполнено, то все три условия теоремы 3.1 не выполняются.

Введем обозначения:

$$L(\hbar) = (E_r - E_l)/\delta,$$

$$E = (E_l + E_r)/2.$$

Следовательно, имеет место оценка

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

Таким образом, выполнены все условия теоремы 3.10.

Вычислим матричные элементы:

$$m_{i,j} = \left\langle (\hat{H} - E) u_i, u_j \right\rangle, \quad i, j = l, r,$$

$$m_{l,l} = (E_l - E_r)/2 + O(\varepsilon^2),$$

$$m_{r,r} = (E_r - E_l)/2 + O(\varepsilon^2),$$

$$m_{l,r} = \hbar C_l C_r \int_{b'}^b \sigma'_l(x) \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_l}^{x_r} |p| dx\right) [1 + O(\hbar)] dx = -\frac{\delta}{2} [1 + O(\hbar)].$$

Получаем

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

Собственные значения матрицы m равны

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

Соответствующие собственные вектора (ненормированные) имеют вид:

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

Множитель $1 + O(\hbar)$ опущен для наглядности. Определим

$$\tilde{E}_1 = E + \mu_1 = \frac{E_r + E_l}{2} - \frac{\delta}{2} \sqrt{1 + L^2},$$

$$\tilde{E}_2 = E + \mu_2 = \frac{E_r + E_l}{2} + \frac{\delta}{2} \sqrt{1 + L^2}.$$

По теореме 3.10 для энергии $\tilde{E}_i$ можно построить квазимоду $\tilde{u}_i$, для которой

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

С точностью до нормировки главные члены квазимод $\tilde{u}_1$ и $\tilde{u}_2$ равны:

$$v_1 = \left(L + \sqrt{1 + L^2} \right) u_l + u_r,$$

$$v_2 = -u_l + \left(L + \sqrt{1 + L^2} \right) u_r.$$

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

$$\Delta = \sqrt{1 + L^2} \delta [1 + O(\hbar)] + O(\varepsilon^2/\hbar) = \sqrt{1 + L^2} \delta [1 + O(\hbar)].$$

Величина $O(\varepsilon^2/\hbar)$ может быть отброшена, так как величина ε^2/δ экспоненциально мала. Малость ε^2/δ обеспечивается выбором точки c .

Пусть ϕ_i — собственная функция оператора $\hat{H}$, соответствующая точке спектра, близкой к $\tilde{E}_i$ с точностью $O(\varepsilon^2/\hbar)$. Тогда из теоремы 3.9 следует, что для функции ϕ_i справедлива асимптотическая формула

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

Следовательно, $\phi_{1,2}$ являются билокализованными, только если существует число λ такое, что

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

Тогда величина μ для ϕ_1 имеет вид:

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

а для ϕ_2 :

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

Полученные результаты справедливы в предположении, что выполнено хотя бы одно из условий теоремы и справедливо дополнительное предположение $|E_r - E_l| = O(\varepsilon)$. Для доказательства эквивалентности всех трех условий покажем, что из условия 3 следует условие 1 и условие 2, и наоборот.

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

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

$$|L(\hbar)| = \frac{|E_r - E_l|}{\delta(\hbar)} = \lambda + O(\hbar).$$

Следовательно, выполнено условие 3 данной теоремы.

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

Все предыдущее доказательство опиралось на предположение $|E_r - E_l| = O(\varepsilon)$. Покажем, что если это не так, то не выполнено ни одно из трех условий теоремы.

Условие 3 заведомо не выполнено, так как оно влечет $|E_r - E_l| = O(\varepsilon)$.

Покажем, что условие 2 не может быть справедливо, если не выполнено предположение $|E_r - E_l| = O(\varepsilon)$. Пусть $|E_r - E_l| \neq O(\varepsilon)$.

Определим $u_i = \sigma_i(x)\psi_i(x)$, $i = l, r$. Тогда

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

Из теоремы 3.8 следует, что существует собственное значение $\tilde{E}_i$ оператора $\hat{H}$ такое, что

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

Соответствующие собственные функции имеют асимптотику (см. теорему 3.9)

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

где Δ — расстояние между двумя близкими точками спектра оператора $\hat{H}$. Следовательно, справедлива оценка

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

Получаем, что отношение Δ/ε неограниченно, и условие 2 не выполнено.

Предположим, что справедливо условие 1 теоремы 3.1, то есть имеет место двойная локализация. Из двойной локализации следует существование предела $\mu^2 \neq 0$ для отношения вероятностей $P_r(\hbar)/P_l(\hbar)$. Поскольку отношение Δ/ε неограниченно, то $\tilde{\psi}_i$ будет близка к u_i при некоторых сколь угодно малых значениях $\hbar$. Получаем, что предел отношения вероятностей, если он существует, равен либо 0, либо ∞ , что противоречит двойной локализации. Таким образом, теорема полностью доказана.

3.2 Случай энергии, близкой к минимуму потенциала

Аналог теоремы 3.1 справедлив и для нижних энергетических уровней, но здесь необходимо пересчитать величины C_i и соответственно изменить $\delta(\hbar)$ (см. теорему 3.3 ниже). Следует разделять случаи, когда оба локальных минимума потенциала $V(x)$ соответствуют одной энергии и когда значения $V(x)$ в локальных минимумах не совпадают. Для примера рассмотрим случай совпадения значений $V(x)$ в точках локальных минимумов.

Пусть $\xi_{l,r}$ — координаты двух невырожденных локальных минимумов двукратного потенциала $V(x)$ (см. рис. 6). Предположим, что потенциал $V(x)$ является гладким. Пусть

$$V(\xi_i + x) = \frac{\omega_i^2}{2}x^2(1 + O(x)), \quad i = l, r. \quad (33)$$

Тогда несложно доказать следующее предложение (см., например, [78]).

Предложение. Пусть справедливы оценки (33). Тогда ω_i с точностью $O(\hbar)$ равна частоте классических колебаний в соответствующей потенциальной яме при малых значениях энергии $E = O(\hbar)$.

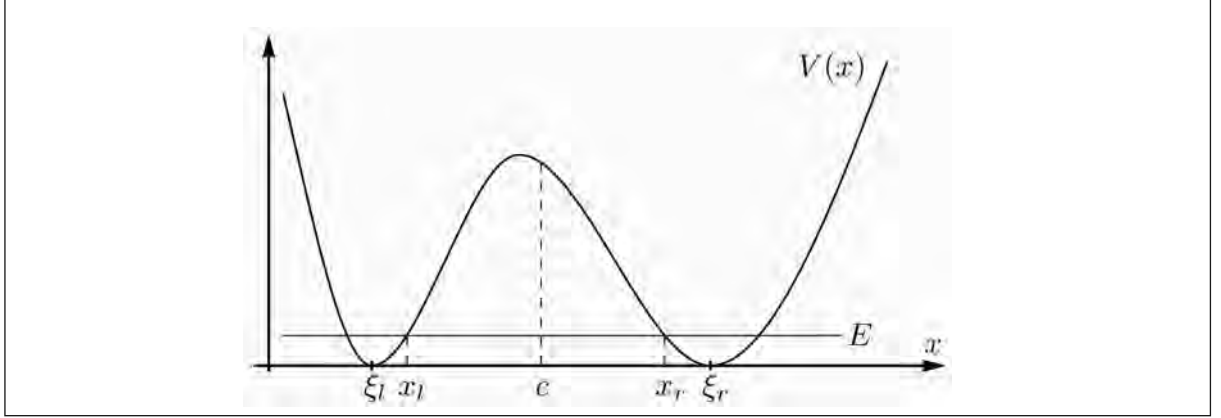


Рис. 6

Доказательство. Для определенности рассмотрим левую потенциальную яму, то есть x в окрестности точки ξ_l . Пусть

$$u(x) = \text{sign}(x) \frac{\sqrt{2V(x + \xi_l)}}{\omega_l},$$

где

$$\text{sign}(x) = \begin{cases} 1, & \text{при } x > 0, \\ 0, & \text{при } x = 0, \\ -1, & \text{при } x < 0. \end{cases}$$

Тогда, учитывая (33), получаем, что

$$u(x) = x + O(x^2), \quad u'(x) = 1 + O(x).$$

Замена $u = u(x)$ является гладкой и невырожденной в некоторой фиксированной окрестности точки $x = \xi_l$.

Пусть $\Omega_l(E)$ — частота классических колебаний в левой яме потенциала $V(x)$ для энергии E . Тогда

$$\begin{aligned} \frac{2\pi}{\Omega_l(E)} &= \oint \frac{dx}{p(x)} = 2 \int_{-\sqrt{2E}/\omega_l}^{\sqrt{2E}/\omega_l} \frac{x'(u)du}{\sqrt{2E - \omega_l^2 u^2}} = \\ &= \frac{2}{\omega_l} \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1 - z^2}} x' \left(\frac{\sqrt{2E}}{\omega_l} z \right) dz = \frac{2\pi}{\omega_l} + O(\hbar). \end{aligned}$$

Член порядка $\sqrt{E}$ не возникает, так как

$$\int_{-1}^1 \frac{z dz}{\sqrt{1 - z^2}} = 0.$$

Следовательно, справедлива оценка

$$\Omega_l(E) = \omega_l + O(\hbar),$$

что и требовалось доказать.

Определим потенциалы $V_i(x)$ и операторы $\hat{H}_i$, $i = l, r$, как в разделе 3.1. Тогда потенциал $V_i(x)$ имеет единственный глобальный минимум в точке ξ_i и является одноянным для малых энергий E , $i = l, r$.

Приведем хорошо известные результаты о асимптотике спектра и стационарных состояний в окрестности невырожденного минимума (см, например, [33, 35, 41, 95]), это так называемое “анзацное приближение”. Для определенности рассмотрим левую потенциальную яму $V_l(x)$.

Теорема 3.2. *Для любого $n < N$ и достаточно маленького $\hbar < \hbar_0(N)$ существует пара $E_l^{(n)}$, $\psi_l^{(n)}(x)$, удовлетворяющая уравнению:*

$$\hat{H}_l \psi_l^{(n)} = E_l^{(n)} \psi_l^{(n)}, \quad (34)$$

при $x \in [\xi_l - a, \xi_l + a]$, для некоторого $a > 0$, не зависящего от $\hbar$, и

$$\psi_l^{(n)}(x) = \frac{A}{\sqrt{y'(x)}} D_n[\hbar^{-1/2} y(x)], \quad (35)$$

где A — нормировочная константа, индексы у функции $y(x) = y_l^{(n)}(x)$, здесь и далее, опущены для наглядности, а D_n — функция Эрмита:

$$D_n(z) = e^{-\frac{z^2}{2}} H_n(z), \quad H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2}.$$

Для энергии $E_l^{(n)}$ справедлива асимптотическая формула:

$$E_l^{(n)} = \hbar \omega_l(n + 1/2) + O(\hbar^2), \quad (36)$$

а для функции $y(x)$ справедливо асимптотическое разложение:

$$y(x) = y_0(x) + \hbar y_1(x) + O(\hbar^2). \quad (37)$$

Асимптотическое разложение (37) справедливо равномерно по x из отрезка $[\xi_l - a, \xi_l + a]$, и это разложение можно дважды дифференцировать. Формулы для y_0 и y_1 можно получить, подставляя (35), (36) и (37) в уравнение (34) и приравнивая члены при равных степенях $\hbar$.

Для первых двух членов разложения (37) справедливы формулы:

$$y_0(x) = \begin{cases} \left(2 \int_{\xi_l}^x \sqrt{2V(t)} dt \right)^{1/2}, & \text{при } x \geq \xi_l, \\ - \left(2 \int_x^{\xi_l} \sqrt{2V(t)} dt \right)^{1/2}, & \text{при } x \leq \xi_l; \end{cases} \quad (38)$$

$$y_1(x) = |y_0|^{-1} \int_{\xi_l}^x \frac{n + 1/2}{\sqrt{2V(t)}} ((\psi'_0(t))^2 - \omega_l) dt. \quad (39)$$

Теорема 3.2 позволяет получить асимптотику точного решений уравнения Шредингера (34) в окрестности точки $x = \xi_l$ — минимума потенциала $V_l(x)$. Доопределим функцию $\psi_l^{(n)}(x)$ на всю ось x . Из формул (37) и (38) следует, что $y'(x) \geq \text{const} > 0$ при $x \in [\xi_l - a, \xi_l + a]$. Гладко доопределим функцию $y(x)$ на всю ось x с сохранением

оценки для $y'(x)$. Тогда, поскольку функция $D_n[\hbar^{-1/2}y(x)]$ экспоненциально мала при $\hbar \rightarrow 0$ вне малой окрестности точки ξ_l , то функция $\psi_l^{(n)}$ (35) будет квазимодой для уравнения (34) на всей оси x с экспоненциальной точностью.

Известно, что у оператора $\hat{H}_l$ нет других точек спектра в $O(\hbar)$ окрестности минимума потенциала, кроме решений, описанных в теореме 3.2. Следовательно, расстояние между соседними точками спектра оператора $\hat{H}_l$ в некоторой окрестности энергии $E = 0$ имеет порядок $\hbar$. Заметим, что энергетические уровни $E_l^{(n)}$ (36) удовлетворяют правилу дискретизации Планка-Бора-Зоммерфельда (3) с $\sigma = 2$, хотя движение в окрестности положения равновесия не является квазиклассическим. Теорема 3.2 применима также и к $\hat{H}_r$, необходимо только заменить ξ_l на ξ_r , n на m , ω_l на ω_r .

Таким образом, волновые функции стационарных состояний оператора $\hat{H}_l$ и $\hat{H}_r$ для малых энергий порядка $\hbar$ удовлетворяют асимптотическим формулам ВКБ приближения (19) в области барьера, а в некоторой фиксированной окрестности соответствующей потенциальной ямы для них справедливо асимптотическое разложение (35). Согласование этих асимптотик позволяет найти нормировочные константы C_i из формулы (19) и соответственно определить величину $\delta(\hbar)$ по формуле (23).

Теорема 3.3. Пусть n -ый энергетический уровень оператора $\hat{H}_l$ близок к m -ому энергетическому уровню оператора $\hat{H}_r$ с точностью $O(\hbar^2)$. Тогда для величины $\delta(\hbar)$ справедлива формула

$$\delta(\hbar) = 2\sqrt{\hbar} \frac{\sqrt{\omega_l \omega_r}}{\sqrt{\pi n! m!}} \left(\frac{2}{\hbar}\right)^{\frac{n+m}{2}} J_l^{n+1/2} J_r^{m+1/2} \times \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{\xi_l}^{\xi_r} \sqrt{2V(x)} dx\right) [1 + O(\hbar)], \quad (40)$$

где

$$\begin{aligned} J_l &= \sqrt{\omega_l} \lim_{t \rightarrow \xi_l + 0} \left\{ (t - \xi_l) \exp\left(\omega_l \int_t^c \frac{dx}{\sqrt{2V(x)}}\right) \right\}, \\ J_r &= \sqrt{\omega_r} \lim_{t \rightarrow \xi_r - 0} \left\{ (\xi_r - t) \exp\left(\omega_r \int_c^t \frac{dx}{\sqrt{2V(x)}}\right) \right\}. \end{aligned} \quad (41)$$

Для пределов $J_{l,r}$ справедливы также следующие формулы:

$$\begin{aligned} J_l &= \sqrt{\omega_l} (c - \xi_l) \exp\left\{ \int_{\xi_l}^c \left(\frac{\omega_l}{\sqrt{2V(x)}} - \frac{1}{x - \xi_l} \right) dx \right\}, \\ J_r &= \sqrt{\omega_r} (\xi_r - c) \exp\left\{ \int_c^{\xi_r} \left(\frac{\omega_r}{\sqrt{2V(x)}} - \frac{1}{\xi_r - x} \right) dx \right\}. \end{aligned} \quad (42)$$

Доказательство. Для начала найдем нормировочную константу A для состояния $\psi_l^{(n)}$ (35). Можно считать, что функция $y(x)$ определена на всей оси x и $y'(x) > \text{const} > 0$. Тогда, сделав замену $y = y(x)$, получаем, что

$$\int_{-\infty}^{\infty} (y'(x))^{-1} D_n^2(\hbar^{-1/2}y(x)) dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(y) D_n^2(\hbar^{-1/2}y) dy,$$

где $f(y) = (y'(x))^{-2}|_{x=x(y)}$ — гладкая ограниченная функция.

Хорошо известны следующие свойства функций Эрмита:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} D_n^2(x) dx &= 2^n n! \sqrt{\pi}, \\ D_n(z) &= e^{-z^2/2} (2z)^n [1 + O(z^{-2})], \text{ при } z \rightarrow \infty, \\ D_n(-z) &= (-1)^n D_n(z). \end{aligned} \quad (43)$$

Следовательно,

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(y) D_n^2(\hbar^{-1/2} y) dy = \sqrt{\hbar} f(0) 2^n n! \sqrt{\pi} [1 + O(\hbar)].$$

Найдем асимптотику значения $f(0)$. Из формулы (38) следует, что

$$y'_0(x) = \frac{\sqrt{2V(x)}}{|y_0(x)|}, \quad (44)$$

$$y_0(x) = \sqrt{\omega_l}(x - \xi_l) [1 + O(x - \xi_l)], \quad y'_0(x) = \sqrt{\omega_l} + O(x - \xi_l). \quad (45)$$

Следовательно, $f(0) = \omega_l^{-1} + O(\hbar)$.

Таким образом, нормировочная константа A имеет вид:

$$A = \frac{\sqrt{\omega_l}}{(\pi \hbar)^{1/4} \sqrt{2^n n!}} [1 + O(\hbar)].$$

Вычислим асимптотику $\psi_l^{(n)}(x)$ при фиксированном x таком, что $x_l < x < x_l + a$. Подставляя асимптотику функции Эрмита (43) и формулу (44) в (35), получаем:

$$\psi_l^{(n)} = A \frac{y_0^{n+1/2}}{(2V(x))^{1/4}} 2^n \hbar^{-n/2} \exp\left(-y_0 y_1 - \frac{1}{\hbar} \int_{\xi_l}^x \sqrt{2V(s)} ds\right) [1 + O(\hbar)].$$

Используя формулы (39), (44) и (45), упростим выражение:

$$\begin{aligned} y_0^{n+1/2} \exp(-y_0 y_1) &= y_0^{n+1/2} \exp\left(\int_{\xi_l}^x \frac{n+1/2}{\sqrt{2V(s)}} ((y'_0(s))^2 - \omega_l) ds\right) = \\ &= \exp\left\{\lim_{t \rightarrow \xi_l+0} \left((n+1/2) \ln y_0(x) - \int_t^x \frac{n+1/2}{\sqrt{2V(s)}} ((y'_0(s))^2 - \omega_l) ds\right)\right\}. \end{aligned}$$

Так как

$$\int_t^x \frac{1}{\sqrt{2V(s)}} (y'_0(s))^2 ds = \int_t^x \frac{y'_0(s) ds}{y_0(s)} = \ln \frac{y_0(x)}{y_0(t)},$$

получаем:

$$y_0^{n+1/2} \exp(-y_0 y_1) = \lim_{t \rightarrow \xi_l+0} \left\{ y_0(t) \exp\left(\omega_l \int_t^x \frac{ds}{\sqrt{2V(s)}}\right) \right\}^{n+1/2}.$$

Следовательно, применяя оценки (45), получаем:

$$\psi_l^{(n)}(x) = A \frac{2^n \hbar^{-n/2} J_l^{n+1/2}}{(2V(x))^{1/4}} \times \exp \left(\frac{E_l^{(n)}}{\hbar} \int_c^x \frac{ds}{\sqrt{2V(s)}} - \frac{1}{\hbar} \int_{\xi_l}^x \sqrt{2V(s)} ds \right) [1 + O(\hbar)],$$

где

$$J_l = \sqrt{\omega_l} \lim_{t \rightarrow \xi_l + 0} \left\{ (t - \xi_l) \exp \left(\omega_l \int_t^c \frac{dx}{\sqrt{2V(x)}} \right) \right\}.$$

Для описания туннельного резонанса (см. раздел 3.1) в двойной яме необходимо найти константу C_l , определяемую из формулы (19):

$$\psi_l^{(n)}(x) = \frac{C_l}{(2V(x))^{1/4}} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_a^x \sqrt{2(V(x) - E_l^{(n)})} dx \right) [1 + O(\hbar)].$$

Очевидно, что константа C_l зависит от выбора точки a . Пусть, для определенности, $a = c$. Тогда, учитывая, что

$$\int_c^x \sqrt{2(V(s) - E_l^{(n)})} ds = \int_c^x \sqrt{2V(s)} ds - E_l^{(n)} \int_c^x \frac{ds}{\sqrt{2V(s)}} + O(\hbar^2),$$

получаем:

$$C_l = \frac{\sqrt{\omega_l}}{(\pi \hbar)^{1/4} \sqrt{n!}} \left(\frac{2}{\hbar} \right)^{n/2} J_l^{n+1/2} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{\xi_l}^c \sqrt{2V(x)} dx \right).$$

Аналогично находим формулу для C_r :

$$C_r = \frac{\sqrt{\omega_r}}{(\pi \hbar)^{1/4} \sqrt{m!}} \left(\frac{2}{\hbar} \right)^{m/2} J_r^{m+1/2} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_c^{\xi_r} \sqrt{2V(x)} dx \right),$$

где

$$J_r = \sqrt{\omega_r} \lim_{t \rightarrow \xi_r - 0} \left\{ (\xi_r - t) \exp \left(\omega_r \int_c^t \frac{dx}{\sqrt{2V(x)}} \right) \right\}.$$

Подставляя асимптотики величин C_l и C_r в определение $\delta(\hbar)$ (формула (23)), получаем формулу (40). Остается только показать, что для пределов $J_{l,r}$, определенных по формуле (41), справедливы формулы (42).

Действительно,

$$\begin{aligned} J_l &= \sqrt{\omega_l} \lim_{t \rightarrow \xi_l + 0} \left\{ (t - \xi_l) \exp \left(\omega_l \int_t^c \frac{dx}{\sqrt{2V(x)}} \right) \right\} = \\ &= \sqrt{\omega_l} (c - \xi_l) \exp \left\{ \lim_{t \rightarrow \xi_l + 0} \left(\int_t^c \frac{\omega_l dx}{\sqrt{2V(x)}} - \int_t^c \frac{dx}{x - \xi_l} \right) \right\} = \\ &= \sqrt{\omega_l} (c - \xi_l) \exp \left\{ \int_{\xi_l}^c \left(\frac{\omega_l}{\sqrt{2V(x)}} - \frac{1}{x - \xi_l} \right) dx \right\}. \end{aligned}$$

Аналогично можно получить формулу для J_r . Следовательно, теорема 3.3 полностью доказана.

Теорема 3.4. Пусть выполнены условия теоремы 3.3. Тогда для оператора Шредингера $\hat{H}$ в случае нижних энергетических уровней, при условии (33), справедлива теорема 3.1 — критерий туннельного резонанса, где величина $\delta(\hbar)$ имеет вид (40).

Доказательство этой теоремы полностью аналогично доказательству теоремы 3.1.

Заметим, что если выполнены условия теоремы 3.1, то $|E_r^{(m)} - E_l^{(n)}|$ экспоненциально мало, следовательно, совпадают первые члены разложения по $\hbar$ энергий $E_r^{(m)}$ и $E_l^{(n)}$:

$$\omega_l(n + 1/2) = \omega_r(m + 1/2).$$

Таким образом, отношение частот колебания классической частицы в левой и правой яме рационально. Однако, сама по себе рациональность отношения (резонанс) частот является лишь слабым необходимым условием резонансного туннелирования и из нее не следует, например, возникновение эффекта двойной локализации стационарных состояний.

Амплитуда расщепления в терминах решения системы в вариациях

Следуя методу работы [81], выразим пределы J_l и J_r (41) через асимптотику решения системы в вариациях.

Рассмотрим гамильтонову систему, определяющую инстантон:

$$\begin{cases} \dot{q} = p, \\ \dot{p} = V'(q), \end{cases} \quad (46)$$

с граничными условиями $q(-\infty) = \xi_l$, $q(0) = c$, $q(\infty) = \xi_r$. Система (46) соответствует гамильтониану $p^2/2 - V(x)$, который отличается заменой знака потенциальной энергии от гамильтониана, определяющего классическое движение.

Решение системы (46) можно задать неявной формулой:

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

Рассмотрим систему в вариациях, отвечающую системе (46) (см. [40, 81, 82]):

$$\begin{cases} \ddot{z} = V''(q(t))z; \\ z(\pm\infty) = 0; \\ z(0) = 1. \end{cases} \quad (47)$$

Ее решение имеет вид

$$z(t) = \sqrt{\frac{V(q(t))}{V(c)}}. \quad (48)$$

Найдем асимптотику решения системы в вариациях (48) при $t \rightarrow -\infty$. Получаем, что

$$z(t) \sim (V(c))^{-1/2} \omega_l(q - \xi_l). \quad (49)$$

Из определения J_l (формула (41)) следует, что

$$q - \xi_l \sim J_l \omega_l^{-1/2} \exp \left(\omega_l \int_c^q \frac{dx}{\sqrt{2V(x)}} \right) = J_l \omega_l^{-1/2} e^{\omega_l t}. \quad (50)$$

Тогда, из формул (49) и (50) получаем

$$z(t) \sim J_l \frac{\sqrt{\omega_l}}{\sqrt{V(c)}} e^{2\omega_l t}.$$

Аналогично получаем асимптотику решения системы в вариациях (47) при $t \rightarrow +\infty$:

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

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

3.3 Сравнение амплитуд расщепления для высоких и низких энергетических уровней

Формула (40) задает величину $\delta(\hbar)$ для нижних энергетических уровней, то есть для конечных n и m , а формула (24) задает величину $\delta(\hbar)$ для высоких энергетических уровней, то есть для n и m порядка $1/\hbar$ при $\hbar \rightarrow 0$. Строго говоря, эти формулы были получены для различных асимптотических режимов, но существенный интерес представляет вопрос о применимости формулы (40) в случае высоких энергетических уровней, и наоборот, вопрос о применимости формулы (24) в случае нижних энергетических уровней.

Данный вопрос был рассмотрен в работах [19, 37, 78] для случая симметричного двуканального потенциала. Было показано, что если применить формулу (24) для вычисления расщепления пары нижних энергетических уровней ($n = m = 0$), то полученный результат будет отличаться от правильной асимптотики (40). А именно, действительная величина расщепления нижних энергетических уровней будет в $\sqrt{\pi/e} \approx 1.08$ раз больше, чем значение, вычисленное по формуле (24). В данном разделе мы покажем, что аналогичная ситуация возникает и для несимметричного двуканального потенциала, и конечных n и m , а также исследуем вопрос о применимости формулы (40) для описания расщепления высоких энергетических уровней.

Заметим, что интеграл в показателе экспоненты в формуле (24) вычислен по области потенциального барьера между двумя точками поворота $x_{l,r} = x_{l,r}(E)$:

$$\int_{x_l}^{x_r} \sqrt{2(V(x) - E)} dx, \quad (51)$$

а интеграл в формуле (24) имеет вид:

$$\int_{\xi_l}^{\xi_r} \sqrt{2V(x)} dx, \quad (52)$$

то есть вычислен по всей области потенциального барьера между двумя минимумами потенциала $V(x)$, в независимости от энергии E . Очевидно, что при $E = O(\hbar)$ интеграл (52) является главным членом асимптотического разложения интеграла (51) при $\hbar \rightarrow 0$.

Для удобства сравнения формул (24) и (40), преобразуем интеграл (52) из формулы (40) к виду (51).

Предложение. Пусть выполнены условия теоремы 3.3. Тогда

$$\delta(\hbar) = \hbar \frac{\sqrt{\omega_l \omega_r}}{\pi} \sqrt{\frac{\pi}{e}} \sqrt{g(n)g(m)} \times \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_l}^{x_r} \sqrt{2(V(x) - E)} dx \right) [1 + O(\hbar^{1/2})], \quad (53)$$

где $g(n)$ имеет вид:

$$g(n) = \frac{\sqrt{2}}{n!} \left(n + \frac{1}{2} \right)^{n+1/2} e^{-n}.$$

Доказательство. Справедлива следующая оценка [78]:

$$\int_{x_l}^c \sqrt{2V(x)} dx - \int_{x_l}^c \sqrt{2(V(x) - E)} dx = E \int_{x_l}^c \frac{dx}{\sqrt{2V(x)}} + \left(\ln 2 - \frac{1}{2} \right) \frac{E}{\omega_l} + O(\hbar^{3/2}).$$

Из формулы (33) и того, что $V(x_l) = E$, следуют оценки:

$$x_l - \xi_l = \frac{\sqrt{2E}}{\omega_l} + O(\hbar),$$

$$\int_{\xi_l}^{x_l} \sqrt{2V(x)} dx = \frac{E}{\omega_l} + O(\hbar^{3/2}).$$

Так как

$$\int_{\xi_l}^{x_l} \left(\frac{\omega_l}{\sqrt{2V(x)}} - \frac{1}{x - \xi_l} \right) dx = O(\sqrt{\hbar}),$$

получаем

$$E \int_{x_l}^c \frac{dx}{\sqrt{2V(x)}} = \frac{E}{\omega_l} \int_{\xi_l}^c \left(\frac{\omega_l}{\sqrt{2V(x)}} - \frac{1}{x - \xi_l} \right) dx + \frac{E}{\omega_l} \ln \frac{c - \xi_l}{x_l - \xi_l} + O(\hbar^{3/2}).$$

Используя формулу (42), получаем

$$\begin{aligned} J_l^{n+1/2} &= \omega_l^{\frac{n}{2} + \frac{1}{4}} \exp \left\{ \frac{E}{\hbar \omega_l} \int_{\xi_l}^c \left(\frac{\omega_l}{\sqrt{2V(x)}} - \frac{1}{x - \xi_l} \right) dx + \frac{E}{\hbar \omega_l} \ln(c - \xi_l) \right\} = \\ &= \omega_l^{\frac{n}{2} + \frac{1}{4}} \exp \left\{ \frac{E}{\hbar} \int_{x_l}^c \frac{dx}{\sqrt{2V(x)}} + \frac{E}{\hbar \omega_l} \ln \frac{\sqrt{2E}}{\omega_l} \right\} [1 + O(\sqrt{\hbar})]. \end{aligned}$$

Поскольку $E = \hbar \omega_l (n + 1/2) + O(\hbar^2)$, получаем

$$\frac{E}{\hbar \omega_l} \ln \frac{\sqrt{2E}}{\omega_l} = \left(\frac{n}{2} + \frac{1}{4} \right) \ln \frac{\hbar(1 + 2n)}{\omega_l} + O(\hbar),$$

$$J_l^{n+1/2} = (\hbar(1 + 2n))^{\frac{n}{2} + \frac{1}{4}} \exp \left\{ \frac{E}{\hbar} \int_{x_l}^c \frac{dx}{\sqrt{2V(x)}} \right\} [1 + O(\sqrt{\hbar})].$$

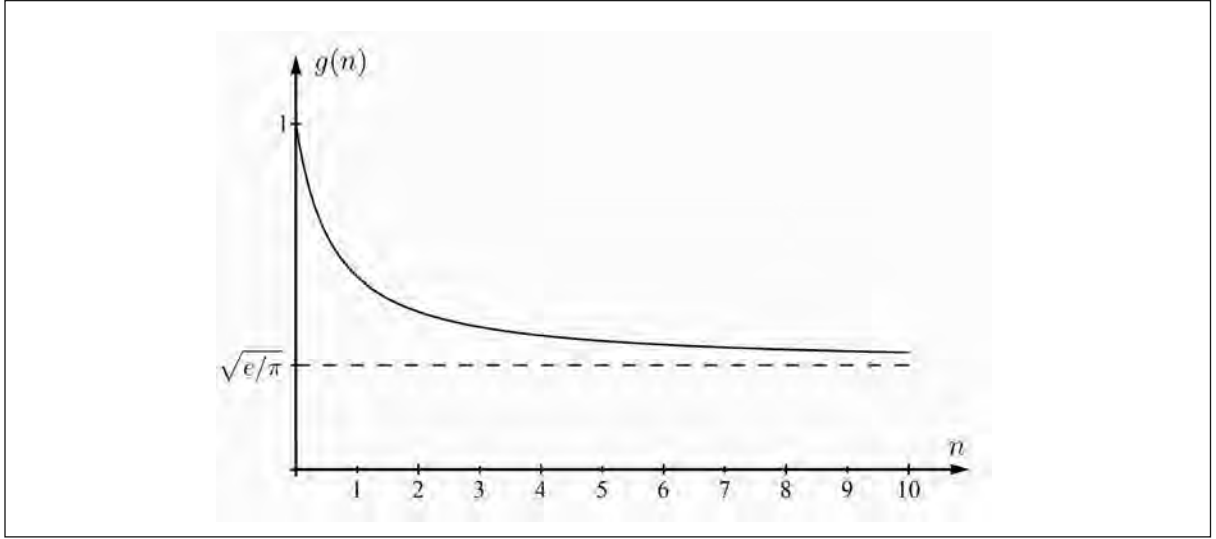


Рис. 7

Следовательно, справедлива оценка

$$J_l^{n+1/2} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{\xi_l}^c \sqrt{2V(x)} dx \right) = \left(\frac{\hbar(n+1/2)}{2e} \right)^{\frac{n}{2} + \frac{1}{4}} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_l}^c \sqrt{2(V(x) - E)} dx \right) [1 + O(\sqrt{\hbar})].$$

Учитывая полученную оценку и формулу (40), получаем (53).

Поскольку $g(0) = 1$ (см. рис. 7), получаем, что в случае несимметричной ямы, также как и в симметричном случае (см. [37, 78–80]), в амплитуде величины $\delta(\hbar)$ для пары нижних энергетических уровней ($m = n = 0$) возникает дополнительный множитель $\sqrt{\pi/e}$ по сравнению с формулой (24) для высоких энергетических уровней.

Применяя формулу Стирлинга:

$$n! \sim \sqrt{2\pi n} \left(\frac{n}{e} \right)^n, \quad \text{при } n \rightarrow \infty,$$

получаем, что

$$g(n) \rightarrow \sqrt{\frac{e}{\pi}}, \quad \text{при } n \rightarrow \infty.$$

Следовательно, формула (53) при n и m порядка $1/\hbar$ принимает вид:

$$\delta(\hbar) = \hbar \frac{\sqrt{\omega_l \omega_r}}{\pi} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_l}^{x_r} \sqrt{2(V(x) - E)} dx \right) [1 + O(\hbar^{1/2})],$$

то есть полностью совпадает с формулой (24).

Таким образом, формула (53) применима как в случае высоких энергетических уровней (при n и $m \sim 1/\hbar$), так и для нижних уровней с $E = O(\hbar)$ (конечные n и m).

3.4 Динамика частицы в случае резонансного туннелирования

Рассмотрим динамику частицы в двумном потенциале $V(x)$ для энергии E , близкой к паре квазивырожденных энергетических уровней E_1 и E_2 оператора Шредингера $\hat{H}$. Пусть справедливы условия теоремы 3.1, два энергетических уровня $E_{1,2}$ находятся экспоненциально близко друг к другу, а соответствующие собственные функции $\psi_{1,2}$ билокализованы.

Поскольку состояния $\psi_{1,2}$ билокализованы, они имеют вид (29):

$$\begin{aligned}\psi_1 &\simeq \cos(\alpha)\psi_l + \sin(\alpha)\psi_r, \\ \psi_2 &\simeq -\sin(\alpha)\psi_l + \cos(\alpha)\psi_r,\end{aligned}$$

где $\psi_{l,r}$ — квазимоды, сосредоточенные только в левой или правой потенциальной яме соответственно.

Рассмотрим задачу Коши с начальным состоянием Ψ_0 :

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi, \\ \Psi|_{t=0} = \Psi_0. \end{cases} \quad (54)$$

Предположим, что начальное состояние Ψ_0 локализовано только в левой яме и имеет энергию, близкую к E . Тогда можно считать, что $\Psi_0 = \psi_l$ с некоторой точностью при $\hbar \rightarrow 0$. Заметим, что в данной задаче точность приближения не играет существенного значения, поскольку малые изменения начального состояния Ψ_0 приводят к малым изменениям решения Ψ для любого значения времени t . Ограничимся рассмотрением главных членов асимптотического разложения решения $\Psi(x, t)$ при $\hbar \rightarrow 0$.

Таким образом, решение задачи Коши (54) имеет вид:

$$\Psi = \psi_1 e^{\frac{tE_1}{i\hbar}} \cos \alpha + \psi_2 e^{\frac{tE_2}{i\hbar}} \sin \alpha.$$

Подставляя выражение для ψ_1 и ψ_2 (29), получаем:

$$\Psi = \left(e^{\frac{tE_1}{i\hbar}} \cos^2 \alpha + e^{\frac{tE_2}{i\hbar}} \sin^2 \alpha \right) \psi_l + \cos \alpha \sin \alpha \left(e^{\frac{tE_2}{i\hbar}} - e^{\frac{tE_1}{i\hbar}} \right) \psi_r.$$

Полная туннельная транспортика состояния означает, что существует момент времени $t = T$ такой, что решение $\Psi(x, t)$ сосредоточено в иной яме, чем яма, в которой сосредоточено начальное условие $\Psi_0(x)$. Таким образом, полная туннельная транспортика состояния имеет место, если коэффициент перед ψ_l обращается в 0. Следовательно, справедливо равенство:

$$\operatorname{tg}^2 \alpha = -\exp \left(it \frac{E_2 - E_1}{\hbar} \right).$$

Учитывая, что $\alpha \in (0, \pi/2)$, получаем, что решение этого уравнения существует только при $\alpha = \pi/4$. Следовательно, полная туннельная транспортика происходит, только когда волновые функции стационарных состояний $\psi_{1,2}$ равномерно распределены между левой и правой потенциальной ямой, то есть при $p_l = p_r = 1/2$, $\lambda = 0$ или $\mu = 1$. При положительных значениях $\mu \neq 1$ возникает только частичная транспортика.

Видно, что транспортиция – периодический процесс, T – полупериод транспортиции – время, за которое происходит перенос частицы в другую потенциальную яму. Величина T экспоненциально велика и имеет вид:

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

В случае произвольного $\alpha \neq \pi/4$, вероятности $P_{l,r}(t)$ обнаружить состояние Ψ в левой и правой яме имеют вид:

$$P_l(t) = \cos^4 \alpha + \sin^4 \alpha + 2 \cos^2 \alpha \sin^2 \alpha \cos \left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar} t \right),$$

$$P_r(t) = 2 \cos^2 \alpha \sin^2 \alpha \left(1 - \cos \left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar} t \right) \right).$$

Следовательно, максимальная вероятность обнаружить состояние Ψ в правой яме имеет вид:

$$P_r^{max} = \max_t P_r(t) = 4 \cos^2 \alpha \sin^2 \alpha.$$

Учитывая формулы (30) и (26), получаем, что

$$P_r^{max} = \frac{\delta^2}{\delta^2 + (E_r - E_l)^2} = \left(\frac{\delta}{\Delta} \right)^2. \quad (55)$$

Таким образом, состояние Ψ существенно проявит себя в правой яме, только если $|E_r - E_l| = O(\delta)$, иначе $P_r^{max} \rightarrow 0$ при $\hbar \rightarrow 0$.

Заметим, что если величина расщепления $\Delta = E_2 - E_1$ в два раза больше минимального значения $\delta(\hbar)$, то туннелирование состояния Ψ происходит в два раза быстрее (см. формулу для T), чем при $\Delta \approx \delta$, но при этом только четверть состояния Ψ совершает туннельные переходы между ямами, то есть $P_r^{max} = 1/4$.

3.5 Примеры резонансного туннелирования в несимметричном потенциале

В данном разделе рассмотрены два простых примера возникновения резонансного туннелирования и туннельной транспортиции в несимметричных двуюмных потенциалах. Рассмотрен случай двуюмного потенциала, являющегося полиномом четвертого порядка, и случай двуюмного потенциала, являющегося суммой двух финитных потенциальных ям.

Полином четвертого порядка

Классическим примером двуюмного потенциала является полином четвертого порядка [46, 92]. Заметим, что в этом случае возможно исследование точного решения при помощи специальных функций (см. в [46]).

Рассмотрим оператор $\hat{H}$ с потенциалом $V(x)$:

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

где s — параметр, характеризующий асимметрию. Будем исследовать спектр $\hat{H}$ вблизи фиксированной энергии E , где $0 < E < 1$. Параметр s меняется в пределах $|s| < s_0$, где $s_0 = s_0(E)$ выбрано так, что уравнение $V(x, s_0) = E$ имеет 4 простых корня. Таким образом, рассматривается случай высоких энергетических уровней.

Как и ранее в разделе 3.1, введем операторы $\hat{H}_l$ и $\hat{H}_r$, константы $c = c(s)$ и $\delta = \delta(s, \hbar)$. Пусть $E_i^{(n)}$ — точки спектра оператора $\hat{H}_i$, $i = l, r$. Квантовые числа $n = n(\hbar)$ выбираются так, что $E_i^{(n)}$ близки к E . При фиксированном малом $\hbar$ энергетические уровни $E_i^{(n)}$ и соответствующие им собственные функции непрерывно зависят от s .

При $s = 0$ оператор $\hat{H}_l$ отличается от $\hat{H}_r$ заменой x на $-x$. Следовательно, $E_l^{(n)} = E_r^{(n)}$. Из теоремы 3.1 следует биллокализация собственных функций. При увеличении s энергетический уровень $E_l^{(n)}$ будет убывать, а $E_r^{(n)}$ — возрастать с точностью $O(\hbar^2)$. Это следует из того, что они приближенно удовлетворяют правилу дискретизации Планка-Бора-Зоммерфелда (3). Из непрерывной зависимости от s следует существование s_1 такого, что

$$E_l^{(n+1)} = E_r^{(n)}, \quad s = s_1.$$

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

Две финитные потенциальные ямы

Рассмотрим двумный потенциал $V(x)$, являющейся суммой двух финитных потенциальных ям $V_l(x)$ и $V_r(x)$ без пересечения носителей (см. рис. 8). Пусть потенциалы $V_l(x)$ и $V_r(x)$ — отрицательные гладкие финитные функции такие, что

$$\begin{aligned} V_l(x) &\equiv 0, \quad \text{при } x \geq a, \\ V_r(x) &\equiv 0, \quad \text{при } x \leq b, \\ a &< b, \end{aligned}$$

и $V_i(x)$ являются одноямыми для отрицательных энергий, близких к E .

Определим соответствующие операторы:

$$\begin{aligned} \hat{H}_i &= -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V_i(x), \quad i = l, r, \\ \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V_l(x) + V_r(x). \end{aligned}$$

Из результатов раздела 3.1 следует, что потенциалы $V_l(x)$ и $V_r(x)$ могут быть использованы для описания туннелирования, если центр потенциального барьера (точка c) лежит между их носителями:

$$a < c < b. \quad (56)$$

Условие (56) можно переписать в эквивалентном виде:

$$|S_r - S_l| < (b - a)\sqrt{-E}, \quad (57)$$

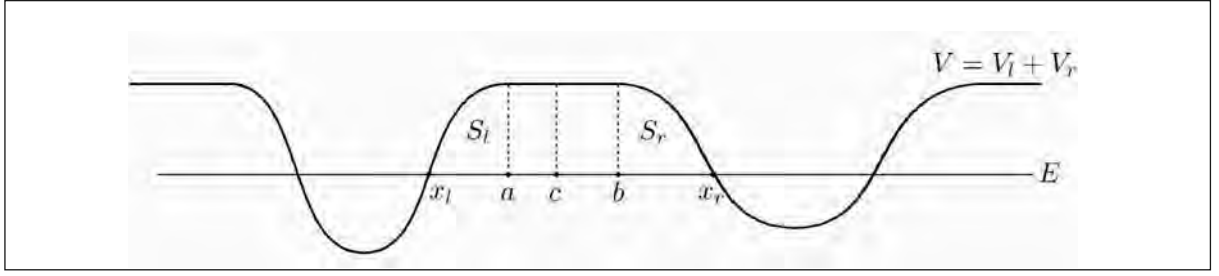


Рис. 8

где $S_{l,r}$ — туннельное действие по левой и правой стороне барьера (см. рис. 8):

$$S_l = \int_{x_l}^a \sqrt{V_l(x) - E} dx, \quad S_r = \int_b^{x_r} \sqrt{V_r(x) - E} dx.$$

Следовательно, условие (56) заведомо выполнено, если финитные потенциальные ямы расположены достаточно далеко друг от друга. Предположим, что условие (56) выполнено. Тогда в качестве двух одноямыных операторов, фигурирующих в теореме 3.1, можно использовать $\hat{H}_l$ и $\hat{H}_r$.

Пусть E_i принадлежат спектру оператора $\hat{H}_i$, $i = l, r$, и близки к E . Если при этом

$$E_l = E_r, \quad (58)$$

то из теоремы 3.1 следует, что у оператора $\hat{H}$ имеется пара экспоненциально близких точек спектра (26), соответствующие собственные функции биллокализованы (25), и имеет место туннельная транспортировка (см. раздел 3.4).

Простейшим примером несимметричного двоямного потенциала, в котором сразу множество энергетических уровней являются квазивырожденными и выполнено условие возникновения туннельного резонанса (58), может служить двоямный потенциал, в котором обе финитные потенциальные ямы имеют одинаковый вид, то есть $V_l(x) = V_r(x + s)$ для некоторого постоянного s такого, что потенциальные ямы $V_l(x)$ и $V_r(x)$ не накладываются друг на друга, и справедливо условие (57). Очевидно, что тогда условие (58) выполнено для всех отрицательных энергетических уровней, и итоговый двоямный потенциал $V(x)$ будет существенно несимметричным, если несимметричной является потенциальная яма $V_l(x)$.

3.6 Эффект туннельного захвата состояния

В данном разделе мы рассматриваем специальный вид двоямного потенциала, который является суммой произвольной “физически заданной” ямы и прямоугольной “пробной” потенциальной ямы. Предположим, что потенциал физической ямы является финитной гладкой функцией, а параметры прямоугольной пробной ямы, такие как глубина, ширина и положение, являются внешними варьируемыми параметрами. Для определенности будем считать, что пробная яма расположена справа от физической ямы (см. рис. 9).

Отметим, что если заданный физический потенциал не является финитным, но быстро стремится к нулю при удалении от ямы, то его можно приблизить финитной функцией, а влияние отбрасываемых нефинитных частей можно учесть при помощи теории возмущений.

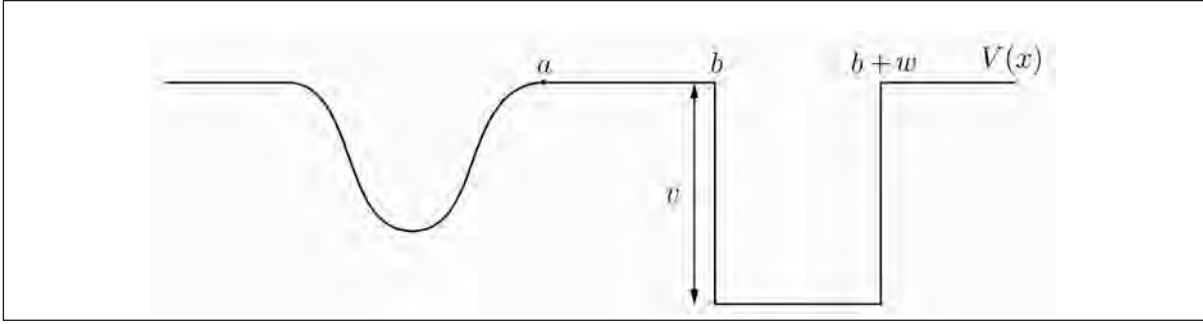


Рис. 9

Рассматривается динамика состояния, локализованного в начальный момент времени в левой потенциальной яме. Если параметры правой ямы выбраны случайно, то состояние останется все время локализованным в левой яме с экспоненциальной точностью по $\hbar \rightarrow 0$, но для ряда специальных (резонансных) значений параметров ситуация меняется: состояние туннелирует из физической ямы в пробную потенциальную яму, затем туннелирует обратно в физическую яму, и так далее. Эффект возникновения резонансного туннелирования при специальной настройке пробной ямы может быть назван туннельным захватом состояния. Основываясь на результатах разделов 3.1 и 3.4, мы ниже выводим достаточные аналитические условия появления туннельного захвата (см. формулы (59), (63)). Более того, по “резонансным” значениям параметров можно восстановить энергию исходного состояния в физической яме.

Заметим, что общая задача об определении условий возникновения туннельного захвата представляет интерес с физической точки зрения [45], а для конкретного потенциала эта задача была рассмотрена в работе [44] при помощи численных методов.

Пусть потенциал $V(x)$ является суммой двух отрицательных финитных функций с непересекающимися носителями:

$$V(x) = V_l(x) + V_r(x),$$

$$V_i(x) \leq 0, \quad i = l, r.$$

Физическая (левая) потенциальная яма является гладкой функцией такой, что

$$V_l(x) \equiv 0, \quad \text{при } x \geq a,$$

и для фиксированной энергии $E < 0$ потенциал $V_l(x)$ можно считать одноямным (см. рис. 9). Пусть пробная потенциальная яма $V_r(x)$ является прямоугольной:

$$V_r(x) = \begin{cases} 0 & x \leq b, \ x \geq b + w; \\ -v & b < x < b + w. \end{cases}$$

Ширина w пробной потенциальной ямы является варьируемым параметром.

Предположим, что начальное состояние Ψ_0 локализовано в физической потенциальной яме и имеет энергию, близкую к отрицательному значению E . Для определенности, пусть Ψ_0 совпадает со стационарным состоянием ψ_l , которое соответствует энергии E_l оператора Шредингера $\hat{H}_l$ с потенциалом $V_l(x)$, то есть Ψ_0 является стационарным состоянием при выключенном пробном потенциале. Следовательно,

“физическое” начальное состояние $\Psi_0 = \psi_l$ полностью определяется физической потенциальной ямой $V_l(x)$ и не зависит от конфигурации пробного потенциала $V_r(x)$.

Вероятности $P_l(t)$ и $P_r(t)$ обнаружить состояние Ψ в левой и правой потенциальной яме в момент времени t могут быть использованы для определения локализации состояния. Будем говорить, что имеет место туннельный захват, если вероятность P_r^{max} не стремится к нулю при $\hbar \rightarrow 0$. Ниже показано, что P_r^{max} может быть близка к единице (при $\hbar \rightarrow 0$) для определенного дискретного множества значений ширины пробной ямы w . Следовательно, если пробная яма настроена специальным образом, то происходит полный туннельный захват состояния.

Пусть пробная яма имеет прямоугольную форму, как на рис. 9. Тогда условие (57) принимает вид:

$$b - a > \int \sqrt{1 - V_l(x)/E} dx. \quad (59)$$

Интеграл в (59) берется по отрезку $[x_l, a]$, где потенциал $V_l(x)$ изменяется от значения $E < 0$ до нуля. Предположим, что условие (59) справедливо, то есть пробная яма расположена достаточно далеко от физической ямы.

Отрицательные энергетические уровни $E = E_r$ в прямоугольной потенциальной яме удовлетворяют следующему уравнению:

$$\frac{w\sqrt{v+E}}{\hbar} = \pi(k + 1/2) - \arctan\left(\frac{v + 2E}{2\sqrt{(-E)(v+E)}}\right), \quad (60)$$

где $k \geq 0$ — номер энергетического уровня $E = E_r^{(k)}$ такого, что $-v < E < 0$. Следовательно, расстояние между соседними энергетическими уровнями спектра оператора $\hat{H}_r$ имеет порядок $\hbar^2$ вблизи дна потенциальной ямы и порядок $\hbar$ для высоких энергетических уровней при $k \sim 1/\hbar$.

Используя точную формулу (60), можно найти асимптотическую формулу для энергетического уровня $E_r^{(k)}$:

$$E_r^{(k)} = -v + \hbar^2 \frac{\pi^2(k+1)^2}{w^2} \left(1 - \frac{4}{w\sqrt{v}}\hbar + \frac{12}{w^2v}\hbar^2 - \frac{2(48 + (k+1)^2\pi^2)}{3v^{3/2}w^3}\hbar^3 + \dots \right), \quad (61)$$

где $k \geq 0$ — фиксированный (не зависящий от $\hbar$) номер энергетического уровня.

Подставляя ВКБ приближение для ψ_l (19) и точную формулу для ψ_r в формулу (22), получаем

$$\delta(\hbar) = 2\hbar(-E)^{1/4} \sqrt{\frac{2(v+E)\omega_l}{\pi v w}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_l}^{x_r} |p| dx\right) [1 + O(\hbar)], \quad (62)$$

где ω_l — классическая частота колебаний в физической потенциальной яме $V_l(x)$ для энергии E .

Пусть ширина пробной прямоугольной ямы w настроена так, что энергетический уровень E_l начального состояния Ψ_0 совпадает с энергетическим уровнем $E_r^{(k)}$ пробной ямы:

$$E_l = E_r^{(k)}|_{w=w_k^*}.$$

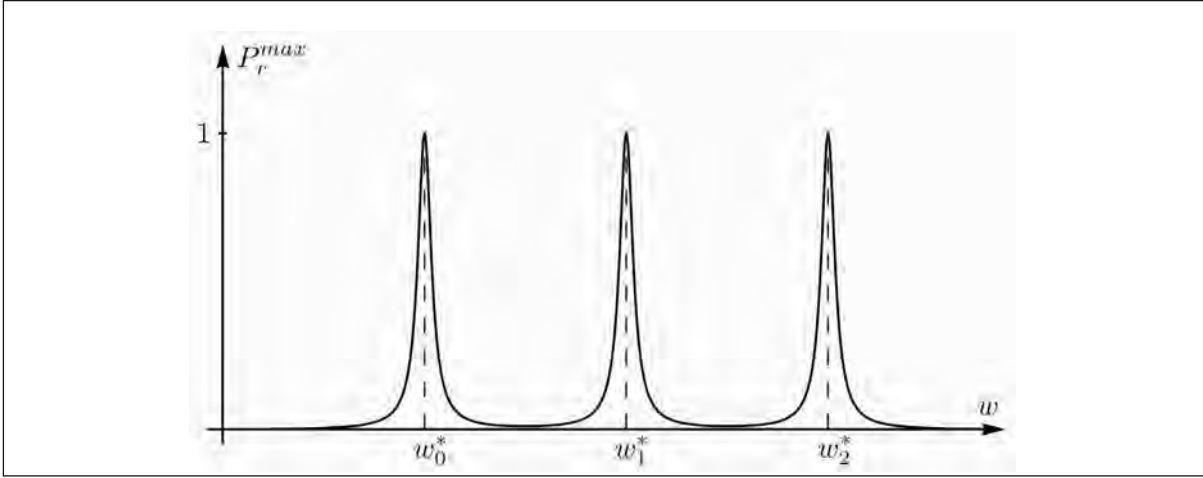


Рис. 10

Учитывая уравнение (60), получаем

$$w_k^* = \frac{\pi \hbar}{\sqrt{v + E_l}} \left[k + \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \arctan \left(\frac{v + 2E_l}{2\sqrt{(-E_l)(v + E_l)}} \right) \right]. \quad (63)$$

Теорема 3.5. Пусть выполнено условие (59) и ширина пробной потенциальной ямы w совпадает с одним из резонансных значений w_k^* (63). Тогда состояние Ψ_0 , локализованное в начальный момент в физической яме, совершает туннельные переходы между ямами, и максимальная вероятность обнаружить состояние в пробной яме близка к 1 при $\hbar \rightarrow 0$.

Доказательство данной теоремы следует непосредственно из теоремы 3.1 и результатов раздела 3.4. Заметим, что теорема 3.1 применима в случае заданного кусочно-гладкого потенциала $V_r(x)$, поскольку потенциал является гладким в области барьера (в окрестности точки c), а соседние энергетические уровни оператора $\hat{H}_r$ находятся на степенном по $\hbar$ расстоянии друг от друга при $\hbar \rightarrow 0$.

Таким образом, мы получили серию значений $w = w_k^*$ таких, что фиксированный энергетический уровень E_l физической ямы пересекается с различными энергетическими уровнями $E_r^{(k)}$ из пробной потенциальной ямы. Для этих значений ширины пробной ямы w максимальная вероятность обнаружить состояние в пробной яме P_r^{max} приближается к 1 (см. рис. 10). Следовательно, если пробная яма настроена специальным образом, а именно, если ее ширина совпадает с w_k^* при некотором k , то пробная яма «захватывает» состояние с энергией E_l из исходной ямы.

Замечание. Аналогично, в качестве варьируемого параметра можно рассмотреть глубину v пробной ямы и сформулировать соответствующую теорему. Следовательно, существует серия резонансных значений $v = v_k^*$ таких, что фиксированный энергетический уровень E_l совпадает с одним из энергетических уровней $E_r^{(k)}$ пробной ямы. Тогда, в отличие от точного равенства для резонансных значений ширины (63), используя уравнение (60), можно найти только приближенную фор-

малу для v_k^* :

$$v_k^* = -E_l + \hbar^2 \frac{\pi^2(k+1)^2}{w^2} \left(1 - \frac{4}{w\sqrt{-E_l}} \hbar - \frac{12}{w^2 E_l} \hbar^2 - \frac{4(24 - (k+1)^2 \pi^2)}{3w^3 (-E_l)^{3/2}} \hbar^3 + \dots \right), \quad (64)$$

где $k \geq 0$ — фиксированное целое число.

Рассмотрим изменение величины P_r^{max} , когда ширина пробной ямы w близка к резонансному значению w_k^* (см. рис. 10). Используя формулу (55), получаем, что состояние Ψ существенно проявляет себя в пробной яме, только если $|E_r - E_l| = O(\delta)$. Следовательно, ширина резонансных пиков (см. рис. 10) экспоненциально мала и имеет порядок $\delta(\hbar)$ при $\hbar \rightarrow 0$.

Таким образом, для рассматриваемого двуканального потенциала (рис. 9) получены явные формулы для резонансных значений внешнего параметра (63) и формула для ширины соответствующих резонансных пиков. Данные результаты можно использовать для определения значения энергии начального состояния, локализованного в физической (левой на рис. 9) потенциальной яме. Для этого необходимо увеличивать ширину w пробной (правой) ямы, начиная с такого маленького значения, когда в пробной яме еще отсутствуют связанные состояния. Таким образом, можно найти значение первого туннельного резонанса (первого резонансного пика на рис. 10) и определить соответствующее значение энергии из формулы (61). Дальнейшее увеличение ширины пробной ямы приведет сначала к исчезновению эффекта захвата, а затем опять к его появлению при следующем резонансном значении ширины.

Эффект туннельного захвата состояния, локализованного в начальный момент только в одной яме, при специальной настройке внешнего параметра носит общий характер. Например, аналогичный эффект возникает, если изменять не ширину, а глубину пробной ямы, или если рассматривать пробные ямы другой конфигурации, меняя их параметры. Данный эффект связан с квазипересечением (отталкиванием) энергетических уровней в двуканальном одномерном потенциале и возникает в общем случае двуканального потенциала, зависящего от внешнего параметра.

3.7 Туннельное возмущение спектра

В данном разделе рассматривается задача построения асимптотики возмущения дискретного спектра оператора Шредингера с одноячным потенциалом $V(x)$ при добавлении к нему возмущающего потенциала, который полностью сосредоточен вне области движения классической частицы. Рассмотрение ведется в окрестности определенной энергии и предполагается, что при добавлении возмущения потенциал остается одноячным. Очевидно, что возмущение спектра окажется экспоненциально малым при $\hbar \rightarrow 0$ даже для возмущающего потенциала порядка единицы. Основная цель состоит в получении главного члена асимптотики.

Пусть задан исходный одноячный потенциал $V(x)$ и соответствующий ему оператор $\hat{H}_0$. Пусть E_0 — собственное значение оператора $\hat{H}_0$, а ψ_0 — соответствующая волновая функция. Пусть (x_1, x_2) — область классического движения, то есть $V(x) < E_0$ при $x \in (x_1, x_2)$. Добавим к исходному оператору возмущение, имеющее

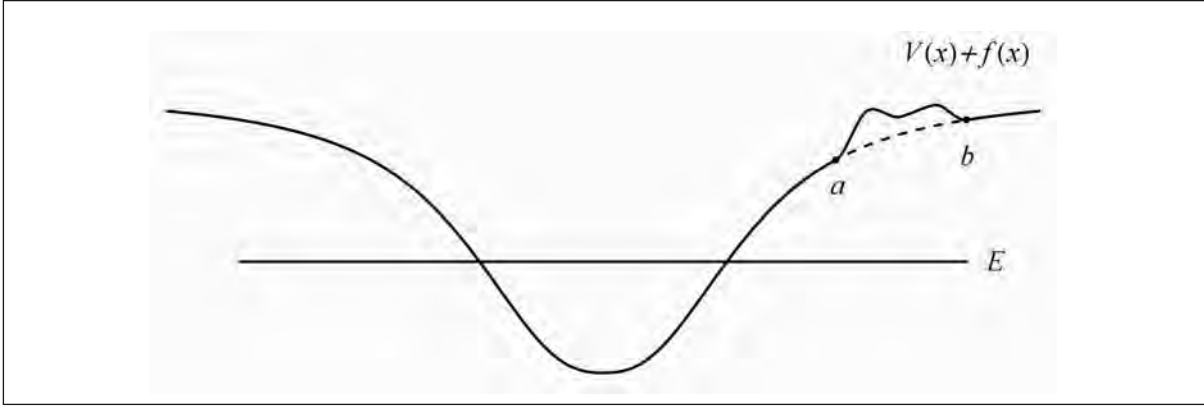


Рис. 11

вид непрерывной функции $f(x)$:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + f(x),$$

локализованной полностью в классически запрещенной области. Для определенности предположим, что носитель функции $f(x)$ лежит справа от потенциальной ямы (см. рис. 11):

$$\begin{aligned} \text{supp} f(x) &= [a, b], \\ x_2 &< a < b. \end{aligned}$$

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

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

Следовательно,

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

и для ε справедлива оценка

$$\varepsilon \leq C_1 \exp\left(-\frac{S}{\hbar}\right),$$

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

$$S = \int_{x_2}^a \sqrt{2(V(x) - E_0)} dx.$$

Из данной оценки получаем, что у оператора $\hat{H}$ есть точка спектра E (см. лемму 3.1), расстояние от которой до E_0 экспоненциально мало (не превосходит ε). Если после добавления $f(x)$ потенциал остается одноямным для энергий, близких к E_0 , то расстояние между E и соседними энергетическими уровнями оператора $\hat{H}$ имеет порядок $\hbar$. Тогда ψ_0 может служить приближением для собственной функции оператора $\hat{H}$ (см. теорему 3.9).

Найдем следующий член разложения E по ε . Поскольку функция $f(x)$ не предполагается малой, формулы обычной теории возмущений не применимы. Получена только слабая оценка:

$$|E - E_0| \leq \varepsilon.$$

Идея построения асимптотики E состоит в применении теории возмущений для поиска спектра оператора $\hat{H}$, где в качестве невозмущенного оператора будет рассматриваться не исходный оператор $\hat{H}_0$, а некоторый специально построенный оператор. Данные идеи близки к идеям доказательства теоремы 3.10.

Теорема 3.6. Пусть функция $f(x)$ непрерывна на отрезке $[a, b]$, $f(a) = 0$ и $f(x)$ не меняет знак в некоторой окрестности точки $x = a$. Тогда для энергии E оператора $\hat{H}$ справедлива асимптотическая формула

$$E - E_0 = \langle f(x)\psi_0, \psi_0 \rangle [1 + o(1)]. \quad (65)$$

Доказательство. Пусть Π — проектор на ψ_0 , а $\Pi' = 1 - \Pi$. Рассмотрим операторы:

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

$$B = f(x)\Pi + \Pi f(x) - \Pi f(x)\Pi.$$

Следовательно,

$$A + B = \hat{H}_0 + f(x) = \hat{H},$$

$$A\psi_0 = E_0\psi_0,$$

$$B\psi_0 = f(x)\psi_0.$$

Оператор B конечномерен и для нормы оператора B справедлива оценка:

$$\|B\| = O(\varepsilon).$$

Если предположить, что потенциал $V(x) + f(x)$ остается одноямым для энергий, близких к E_0 , то у оператора $\hat{H}$ существует единственная точка спектра E , экспоненциально близкая к E_0 , а остальные точки спектра находятся на расстоянии порядка $\hbar$. Следовательно, для поиска асимптотики E можно применить формулу теории возмущений для изолированной точки спектра:

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

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

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

Остается доказать, что

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

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

Приведем строгое доказательство данной оценки. Легко видеть, что искомая оценка после подходящей замены координат принимает вид:

$$\int_0^1 g_1(x)e^{-x/\hbar}dx = o\left(\int_0^1 g_2(x)e^{-x/\hbar}dx\right), \text{ при } \hbar \rightarrow 0,$$

где $g_i(x)$ — непрерывные функции такие, что $g_i(0) = 0$, $g_i(x) \geq 0$, $g_i(x)$ не равно тождественно нулю в некоторой окрестности точки $x = 0$ и

$$g_1(x) = o(g_2(x)), \text{ при } x \rightarrow 0.$$

Пусть

$$x(\hbar) = -\hbar \ln I(\hbar),$$

где

$$I(\hbar) = \int_0^1 g_1(x)e^{-x/\hbar}dx > 0.$$

Очевидно, для интеграла $I(\hbar)$ справедлива оценка сверху:

$$I(\hbar) \leq \hbar \max_{x \in [0,1]} g_1(x) = O(\hbar).$$

Для любого $C > 0$ и достаточно малых $\hbar > 0$ справедлива оценка снизу:

$$I(\hbar) > e^{-C/\hbar},$$

так как

$$I(\hbar) \geq \int_{C_0}^1 g_1(x)e^{-x/\hbar}dx = \hbar g_1(C_0)e^{-C_0/\hbar}[1 + O(\hbar)] > e^{-C/\hbar},$$

где $0 < C_0 < \min(C, 1)$ и $g_1(C_0) \neq 0$.

Следовательно,

$$0 \leq x(\hbar) < C,$$

для любого $C > 0$ при достаточно малых $\hbar$. Получаем, что

$$x(\hbar) \rightarrow 0, \text{ при } \hbar \rightarrow 0.$$

Покажем, что основной вклад в интеграл $I(\hbar)$ дает интегрирование по малому отрезку $[0, x(\hbar)]$. Действительно, справедлива оценка

$$\int_{x(\hbar)}^1 g_1(x)e^{-x/\hbar}dx = O(\hbar)e^{-x(\hbar)/\hbar} = O(\hbar I(\hbar)).$$

Следовательно,

$$I(\hbar) = (1 + O(\hbar)) \int_0^{x(\hbar)} g_1(x)e^{-x/\hbar}dx.$$

Учитывая, что $g_i(x) > 0$, получаем оценку

$$\int_0^{x(\hbar)} g_1(x)e^{-x/\hbar}dx = \int_0^{x(\hbar)} \frac{g_1(x)}{g_2(x)} g_2(x)e^{-x/\hbar}dx \leq \max_{0 \leq x \leq x(\hbar)} \frac{g_1(x)}{g_2(x)} \int_0^{x(\hbar)} g_2(x)e^{-x/\hbar}dx.$$

Поскольку $g_1(x) = o(g_2(x))$ при $x \rightarrow 0$ и $x(\hbar) \rightarrow 0$ при $\hbar \rightarrow 0$, получаем, что

$$\max_{0 \leq x \leq x(\hbar)} \frac{g_1(x)}{g_2(x)} = o(1), \text{ при } \hbar \rightarrow 0.$$

Тогда

$$I(\hbar) = o \left(\int_0^{x(\hbar)} g_2(x) e^{-x/\hbar} dx \right) = o \left(\int_0^1 g_2(x) e^{-x/\hbar} dx \right),$$

что и требовалось доказать.

Из данной теоремы можно получить несколько важных следствий.

Следствие 3.4. *Формула для главного члена асимптотики совпадает с формулой классической теории возмущений, но величина поправки может быть много больше величины малого параметра ε и существенно зависит от того, как функция $f(x)$ стремится к 0 при $x \rightarrow a$.*

Следствие 3.5. *Справедлива оценка*

$$E - E_0 = \exp \left(-\frac{2S + o(1)}{\hbar} \right). \quad (66)$$

Оценка (66) была получена ранее в работе [48] (см. обзор в разделе 2.2) при помощи вероятностных методов. Формула (65) позволяет не только получить простую оценку для показателя экспоненты (66), но и полностью вычислить главный член асимптотики величины возмущения энергии E .

Например, если известно, что $f(a+x) \sim x$ при $x \rightarrow a$, $x > a$, то из (65) несложно получить оценку:

$$E - E_0 = \frac{\omega \hbar^2}{4\pi} \frac{1}{(2(V(a) - E_0))^{3/2}} \exp \left(-\frac{2S}{\hbar} \right) [1 + o(1)].$$

3.8 Применение метода туннельного возмущения

Как показано в разделе 3.7, изменение потенциала в классически запрещенной области приводит к экспоненциально малому возмущению спектра. Данные поправки представляют интерес, если в исходной задаче присутствует экспоненциальное квазивыврождение спектра, поскольку тогда малое возмущение энергий может привести к существенному изменению собственных функций, а следовательно, и динамики системы. Простейшей подобной системой является двуюмный потенциал. Учитывая результаты раздела 3.1, исследование двуюмного потенциала можно свести к исследованию пары одноямных потенциалов, для которых применима теорема 3.6.

Для начала рассмотрим влияние деформации потенциального барьера на туннелирование. Пользуясь полученными результатами, построим контрпример к работе [49]. После приведем независимое доказательство корректности условия 3 теоремы 3.1, опирающееся на оценки следствия 3.5.

Рассмотрим влияние деформации потенциального барьера на резонансное туннелирование в двойной потенциальной яме. Пусть двуюмный потенциал $V(x)$ удовлетворяет требованиям теоремы 3.1, $E_{1,2}$ — пара квазивыврожденных собственных

значений оператора $\hat{H}$ и соответствующие собственные функции билокализованы. Добавим к потенциалу $V(x)$ функцию $f(x)$ такую, что носитель $f(x)$ лежит между центром потенциального барьера и точкой поворота. Для определенности можно считать, что возмущается правая сторона барьера.

Тогда, используя результаты теоремы 3.1 и 3.6, получаем следующую теорему.

Теорема 3.7. *При гладкой деформации одной, для определенности — правой, стороны потенциального барьера разрушается двойная локализация собственных функций, и для величины расщепления справедлива формула:*

$$\Delta = \langle f(x)\psi_r, \psi_r \rangle [1 + o(1)]. \quad (67)$$

Подобная задача в случае симметричного потенциала рассматривалась в работе [48] (см. также [50, 52]), где был получен только показатель экспоненты, такой же, как в оценке из следствия 3.5.

Теперь покажем, используя формулу для туннельного возмущения, что результаты, приведенные в работе [49], неверны.

В работе [49] рассматривается двумный несимметричный потенциал для энергий, близких к положениям равновесия потенциала. Предполагается, что потенциал является в точности квадратичным в некоторой окрестности областей классического движения, то есть в некоторых конечных окрестностях минимумов потенциала. Для вычисления величины расщепления применяется метод двухуровневой аппроксимации. В качестве потенциалов левой и правой потенциальных ям были выбраны осцилляторы с соответствующими частотами. Ошибка состоит в том, что при таком выборе потенциалов левой и правой потенциальных ям полученный результат для величины расщепления оказывается меньше величины погрешности данного метода. Из такого подхода следует, что локализация собственных функций и величина расщепления не зависят от выбора гладкого участка потенциального барьера, соединяющего те области, где потенциал квадратичен. Подобные вычисления приводят к неверному результату, поскольку деформация потенциального барьера вне областей квадратичности потенциала приведет к разрушению туннелирования (теорема 3.7). Величина расщепления будет экспоненциально больше, чем полученная в работе [49]. В качестве контрпримера можно рассмотреть любой симметричный двумный потенциал, удовлетворяющий всем условиям работы [49], к которому добавлено несимметричное возмущение потенциального барьера.

Далее приведем независимое доказательство корректности условий теоремы 3.1, используя формулы туннельного возмущения спектра. Условие 3 теоремы 3.1 сформулировано в терминах спектров операторов $\hat{H}_{l,r}$ с одноямыми потенциалами $V_{l,r}(x)$. Выбор потенциалов $V_{l,r}$ не является однозначным, как видно из условий, наложенных на потенциалы $V_{l,r}$. Иначе выбранные потенциалы $W_{l,r}$ могут отличаться от исходных $V_{l,r}$ только в классически запрещенной области. Как следует из теоремы 3.1, условие о том, что существует число λ такое, что $|E_r - E_l| = \delta(\hbar)[\lambda + O(\hbar)]$, не зависит от свободы в выборе $V_{l,r}$ и характеризует двумный потенциал $V(x)$. Докажем этот факт непосредственно, используя формулу для туннельного возмущения.

Пусть

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

Пусть для собственных значений $E_{l,r}$ операторов $\hat{H}_{l,r}$ справедливо условие 3 теоремы 3.1, то есть существует λ такое, что

$$|E_r - E_l| = \delta(\hbar)[\lambda + O(\hbar)].$$

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

$$|k_r - k_l| = \delta(\hbar)[\lambda + O(\hbar)].$$

Введем обозначение:

$$f_i(x) = W_i(x) - V_i(x), \quad i = l, r.$$

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

$$f_l(x) \equiv 0, \quad x \leq b,$$

$$f_r(x) \equiv 0, \quad x \geq a.$$

Пусть

$$S_l = \int_{x_l}^b |p(x)| dx,$$

$$S_r = \int_a^{x_r} |p(x)| dx.$$

Применяя оценку из следствия 3.5, получаем:

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

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

$$\int_{x_l}^c |p| dx = \int_c^{x_r} |p| dx,$$

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

$$|k_r - k_l|/\delta = |E_r - E_l|/\delta + O(\hbar) = \lambda + O(\hbar),$$

что и требовалось доказать.

3.9 Некоторые свойства линейных операторов

В данном разделе приведен ряд утверждений из теории линейных операторов, относящихся к теории возмущения дискретного спектра.

Следующие утверждения: лемма 3.1, теоремы 3.8 и 3.9 широко известны (см., например, [41, 98, 99]) и представлены здесь для удобства ссылок.

Лемма 3.1. Пусть Γ — гильбертово пространство, оператор A самосопряжен. Пусть задана квазимода u :

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

Тогда расстояние от точки λ до спектра оператора A не превосходит ε :

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

Теорема 3.8 (Равенство числа мод и квазимод). Пусть для самосопряженного оператора A в гильбертовом пространстве Γ имеются n ортонормированных квазимод:

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

Предположим, что спектр A является дискретным в ε -окрестности точки λ .

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

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

Теорема 3.9 (Разложение квазимоды). Пусть Γ — гильбертово пространство, оператор A самосопряжен. Пусть задана квазимода $u \in \Gamma$, $\|u\| = 1$, $\|(A - \lambda)u\| \leq \varepsilon$. Предположим, что на интервале $(\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon)$ содержится всего одна точка спектра оператора A :

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

Тогда для квазимоды u имеет место разложение:

$$u = \langle u, \psi \rangle \psi + \tilde{u},$$

$$\|\tilde{u}\| \leq \frac{\varepsilon}{d},$$

где d — расстояние от λ до спектра A , не учитывая точку μ .

Замечание. Данную теорему имеет смысл применять тогда, когда известно, что $d \gg \varepsilon$. Эта теорема может дать представление о виде точной собственной функции.

Следующая теорема близка к теореме, доказанной в работе [35] (см. также [41, 42]), несколько изменена формулировка и доказательство, а также получены более точные оценки.

Теорема 3.10. Пусть в гильбертовом пространстве Γ задан самосопряженный оператор A . Пусть выполнены условия:

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

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

2. Пусть d — расстояние от λ до спектра A , не учитывая n ближайших точек (число точек считается с учетом кратности). Предположим, что справедлива оценка:

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

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

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

Собственные вектора z_i выбраны ортонормированными.

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

$$y_i = \sum_{j=1}^n z_i^j u_j + w_i, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

и справедливы оценки

$$\|w_i\| \leq \frac{\sqrt{2n\varepsilon}}{d - \sqrt{2n\varepsilon}}, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

$$\|(A - \lambda - \mu_i)y_i\| \leq \frac{4n\varepsilon^2}{d - \sqrt{2n\varepsilon}}, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

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

Доказательство. Из первого условия данной теоремы следует, что на интервале есть не менее n точек спектра оператора A , а из второго условия данной теоремы следует, что их не более n . Обозначим через ψ_i собственные функции оператора A , отвечающие собственным значениям λ_i из рассмотренного интервала.

Тогда d — это расстояние от точки λ до спектра A , не учитывая точки λ_i , $i = 1, \dots, n$.

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

Определим конечномерный оператор

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

и оператор

$$A_0 = A - V.$$

Покажем, что V действительно конечномерен. Пусть $u_1, \dots, u_n, \dots, u_r$ ортонормированный базис в пространстве, образованном набором векторов $u_1, \dots, u_n$, $(A - \lambda)u_1, \dots, (A - \lambda)u_n$.

Пусть $\phi \in \Gamma$ ортогональна всем u_i , $i = \overline{1, r}$. Тогда

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

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

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned} \|V\phi\|^2 &= \|E'(A - \lambda)E\phi + E(A - \lambda)\phi\|^2 \leq \\ &2n\varepsilon^2 + 2\langle E'(A - \lambda)E\phi, E(A - \lambda)\phi \rangle = 2n\varepsilon^2. \end{aligned}$$

Покажем, что оператор A_0 имеет в λ изолированную точку спектра кратности n . Из определения A_0 и того, что $Eu_i = u_i$, $i = \overline{1, n}$ вытекает, что:

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

Поскольку $\|V\| \leq \sqrt{2n\varepsilon}$ является малым возмущением, то любая собственная функция оператора A является квазимодой оператора A_0 , и наоборот. Следовательно оператор A_0 на интервале $(\lambda - d + \sqrt{2n\varepsilon}, \lambda + d - \sqrt{2n\varepsilon})$ имеет ровно n точек спектра с учетом кратности. Иначе возникает противоречие с условием 2 данной теоремы. Получаем, что

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

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

Пусть v_i такие, что $E v_i = v_i$, являются собственными функциями оператора EVE . Таких v_i n штук, так как оператор EVE конечномерен и имеет размерность n . Таким образом,

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

Следовательно,

$$|\mu_i| \leq \|V\| \leq \sqrt{2n\varepsilon},$$

$$A_0 v_i = A_0 E v_i = \lambda v_i,$$

$$(V - \mu_i) v_i = (E' + E)(V - \mu_i) v_i = E' V v_i.$$

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

$$(A_0 - \lambda) w_i = -E' V v_i.$$

Учитывая оценку

$$\|V - \mu_i\| \leq \|V\| + |\mu_i| \leq 2\sqrt{2n\varepsilon},$$

получаем оценку нормы w_i :

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

Покажем, что $v_i + w_i$ являются квазиמודами для оператора A :

$$\|(A - \lambda - \mu_i)(v_i + w_i)\| = \|(A_0 - \lambda + V - \mu_i)(v_i + w_i)\| =$$

$$= \|E'Vv_i - E'Vv_i + (V - \mu_i)w_i\| = \|(V - \mu_i)w_i\| \leq \|(V - \mu_i)\| \|w_i\| \leq \frac{4n\varepsilon^2}{d - \sqrt{2n\varepsilon}}.$$

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

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

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

Собственные векторы этой матрицы являются коэффициентами разложения вектора v_i по векторам u_j , а собственные значения и есть μ_i , $i = 1, 2, \dots, n$. Таким образом, теорема полностью доказана.

4 Туннелирование в импульсном пространстве

В данном разделе предложен общий операторный метод вычисления квазиклассической асимптотики туннельного расщепления энергий в задаче о динамическом туннелировании между двумя симметричными орбитами классического движения (см. раздел 4.1). Основой метода является алгебраическая, коммутаторная формула, которая является обобщением известной формулы Херринга (6), применяемой в случае координатного туннелирования в симметричном двукратном потенциале.

В качестве основной модели динамического туннелирования рассматривается задача о туннельном расщеплении спектра оператора Шредингера $\hat{H}$ для частицы, движущейся по окружности в потенциальном поле $V(x)$, если ее энергия существенно больше максимума потенциала. В разделах 4.2 и 4.3 изложены хорошо известные результаты об общей структуре спектра оператора $\hat{H}$, а также о связи спектральной задачи для оператора Шредингера на окружности и Блоховского спектра оператора Шредингера с периодическим потенциалом на прямой.

В разделе 4.4 при помощи предложенного операторного метода получена общая асимптотическая формула для величины туннельного расщепления энергий в задаче о динамическом туннелировании частицы на окружности. Полученная асимптотическая формула применима как в случае аналитического потенциала, так и для потенциалов конечной гладкости. В разделе 4.5 рассмотрена задача о квантовом маятнике и показано, что тогда из общей формулы для расщепления (теорема 4.3) можно получить известную формулу Дыхне-Симоняна (см. раздел 2.3)

4.1 Операторная формула

Рассмотрим задачу о динамическом туннелировании (туннельном резонансе) между двумя симметричными периодическими траекториями классического движения. Пусть задан самосопряженный оператор $\hat{H}$, не обязательно вида (2), и соответствующий гамильтониан $H(x, p)$. Предположим, что спектр $\hat{H}$ вблизи заданной энергии E дискретен, что соответствует задаче об ограниченном движении, и для энергий, близких к E , существует две симметричные друг другу периодические траектории классического движения, отвечающие гамильтониану H . Тогда, как уже отмечалось в разделе 2.1, симметрия траекторий периодического движения приводит к квазивырождению дискретного спектра оператора $\hat{H}$ в квазиклассическом приближении при

$\hbar \rightarrow 0$. Каждому уровню энергии, удовлетворяющему правилу дискретизации (3), соответствует пара близких точек спектра $E_{1,2}$ оператора $\hat{H}$. Задача состоит в вычислении асимптотики величины туннельного расщепления энергий $\Delta = E_2 - E_1$.

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

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi_1 &= E_1\psi_1, \\ \hat{H}\psi_2 &= E_2\psi_2.\end{aligned}$$

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:

$$\begin{aligned}\langle \hat{\sigma}\hat{H}\psi_1, \psi_2 \rangle &= E_1 \langle \hat{\sigma}\psi_1, \psi_2 \rangle, \\ \langle \hat{H}\hat{\sigma}\psi_1, \psi_2 \rangle &= E_2 \langle \hat{\sigma}\psi_1, \psi_2 \rangle.\end{aligned}$$

Если оператор $\hat{\sigma}$ выбран так, что $\langle \hat{\sigma}\psi_1, \psi_2 \rangle \neq 0$, то для величины расщепления $\Delta = E_2 - E_1$ справедлива формула:

$$\Delta = \frac{\langle [\hat{H}, \hat{\sigma}] \psi_1, \psi_2 \rangle}{\langle \hat{\sigma}\psi_1, \psi_2 \rangle}, \quad (68)$$

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

Формула (68) является операторным обобщением классических формул для вычисления туннельного расщепления в различных задачах квантовой механики. Например, как показано ниже, из формулы (68) можно получить формулу Херринга (6) для многомерного симметричного двуканального потенциала, если взять $\hat{\sigma} = \sigma(\hat{x})$, где функция $\sigma(x)$ равна единице с одной стороны от плоскости симметрии и нулю — с другой.

В общем случае (в том числе и многомерном) 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 (68) справедлива приближенная формула:

$$\langle \hat{\sigma}\psi_1, \psi_2 \rangle \simeq \alpha/2, \quad |\alpha| = 1, \quad (69)$$

где фазовый множитель α определяется выбором фаз состояний ψ_i . Выражение в числителе формулы (68) можно упрощать, используя известные формулы для коммутатора псевдодифференциальных операторов [65].

Операторная формула (68) при соответствующем выборе оператора $\hat{\sigma}$ позволяет выразить величину расщепления Δ через асимптотику волновых функций стационарных состояний ψ_1 и ψ_2 . Для получения явных асимптотических формул для величины расщепления в конкретных задачах необходимо также дополнительно построить достаточно точные асимптотики состояний $\psi_{1,2}$ в “туннельных” областях фазового пространства.

Формула для расщепления в случае симметричного двуюмного потенциала

В качестве примера применения формулы (68) рассмотрим задачу о туннельном расщеплении спектра в двуюмном симметричном потенциале $V(x) = V(-x)$ на прямой (см. обзор этой задачи в разделе 2.2). 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. Учитывая, что

$$\begin{aligned} \langle \delta' \psi_1, \psi_2 \rangle &= -\frac{d}{dx} (\psi_1 \overline{\psi_2}) \Big|_{x=0}, \\ \langle 2\delta \psi_1', \psi_2 \rangle &= 2\psi_1' \overline{\psi_2} \Big|_{x=0}, \end{aligned}$$

получаем, что

$$\langle [\hat{H}, \hat{\sigma}] \psi_1, \psi_2 \rangle = -\frac{\hbar^2}{2} (\psi_1' \overline{\psi_2} - \psi_1 \overline{\psi_2'}) \Big|_{x=0}. \quad (70)$$

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

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

Найдем асимптотику выражения $\langle \hat{\sigma} \psi_1, \psi_2 \rangle$, необходимую для применения формулы (68). Поскольку задача обладает симметрией, волновые функции стационарных состояний $\psi_{1,2}$ могут быть представлены в следующем виде (см. формулу (8)):

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi(x) + \varphi(-x)) + O(\hbar), \\ \psi_2(x) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi(x) - \varphi(-x)) + O(\hbar), \end{aligned}$$

где $\varphi(x)$ — действительная нормированная функция, локализованная в области $x > 0$. Следовательно,

$$\langle \hat{\sigma} \psi_1, \psi_2 \rangle = \frac{1}{2} \langle \varphi(x), \varphi(x) - \varphi(-x) \rangle + O(\hbar) = 1/2 + O(\hbar).$$

Применяя операторную формулу (68), получаем асимптотическую формулу для величины туннельного расщепления:

$$\Delta = \hbar^2 \psi_1(0) \psi_2'(0) [1 + O(\hbar)]. \quad (71)$$

Таким образом, мы получили альтернативное доказательство известной формулы (9) (см. обзор в разделе 2.2). Аналогично можно получить и многомерную формулу Херринга (6).

Если в формулу (71) подставить туннельную ВКБ асимптотику состояний $\psi_{1,2}$, то получим асимптотическую формулу для величины туннельного расщепления (формула (12)) в случае симметричного двуюмного потенциала:

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

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

Применение операторной формулы в несимметричном случае

Задача о резонансном туннелировании в несимметричном двумном потенциале уже была подробно рассмотрена в разделе 3 с помощью метода двухуровневого приближения. Приведем ряд замечаний, касающихся возможности применения операторной формулы (68) для исследования этой задачи.

Предположим, что $\psi_{1,2}$ — билокализованные стационарные состояния оператора Шредингера $\hat{H}$ с двумным несимметричным потенциалом $V(x)$, отвечающие паре квазивырожденных энергетических уровней $E_{1,2}$. Тогда, учитывая ортогональность и нормированность состояний $\psi_{1,2}$, получаем, что при соответствующим выборе фазовых множителей стационарные состояния $\psi_{1,2}$ имеют вид:

$$\begin{aligned}\psi_1 &= \cos(\alpha)\psi_l + \sin(\alpha)\psi_r + O(\hbar), \\ \psi_2 &= -\sin(\alpha)\psi_l + \cos(\alpha)\psi_r + O(\hbar),\end{aligned}$$

где ψ_l и ψ_r — некоторые приближенные волновые функции (квазимоды), локализованные в левой и правой потенциальной яме соответственно, а угол $\alpha \in (0, \pi/2)$ не зависит от $\hbar$. Угол α можно считать не зависящим от $\hbar$, поскольку волновые функции $\psi_{1,2}$ предполагаются билокализованными (см. определение в разделе 3.1). Состояния $\psi_{l,r}$ действительны и нормированы, а волновая функция $\psi_1(x) > 0$ в области потенциального барьера.

Выберем оператор $\hat{\sigma}$ так же, как и в симметричном случае:

$$\begin{aligned}\hat{\sigma} &= \sigma(\hat{x}), \\ \sigma(x) &= \theta(x - x_0),\end{aligned}$$

где точка x_0 лежит в области барьера между точками поворота x_l и x_r . Тогда получаем

$$\langle \hat{\sigma}\psi_1, \psi_2 \rangle = \sin(\alpha)\cos(\alpha) + O(\hbar).$$

Учитывая формулу (68) и (70), получаем, что

$$\Delta = \hbar^2 \frac{1 + O(\hbar)}{2\sin(\alpha)\cos(\alpha)} (\psi_2'\psi_1 - \psi_1'\psi_2)|_{x=x_0}. \quad (72)$$

Определим предельные вероятности p_l и p_r обнаружить состояние ψ_1 в левой и правой потенциальной яме при $\hbar \rightarrow 0$ также, как и в разделе 3.1. Тогда формула (72) примет вид:

$$\Delta = \hbar^2 \frac{1 + O(\hbar)}{2\sqrt{p_l p_r}} (\psi_1\psi_2' - \psi_1'\psi_2)|_{x=x_0}. \quad (73)$$

Следовательно, используя операторный метод, можно получить формулу для величины туннельного расщепления Δ , выраженную через асимптотику стационарных состояний в области барьера и вероятности $p_{l,r}$. Учитывая, что известна асимптотика амплитуд состояний $\psi_{1,2}$ в левой и правой яме (она определяется величиной α), и используя правила согласования ВКБ асимптотик в простых точках поворота (см., например, [34, 59, 70]), можно построить асимптотику стационарных состояний ψ_1 и ψ_2 под барьером с экспоненциальной точностью при $\hbar \rightarrow 0$. Получаем, что

$$\begin{aligned} \psi_1 = \cos(\alpha) \sqrt{\frac{\omega_l}{2\pi|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_l}^x |p| dx\right) [1 + O(\hbar)] + \\ \sin(\alpha) \sqrt{\frac{\omega_r}{2\pi|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_r} |p| dx\right) [1 + O(\hbar)], \end{aligned} \quad (74)$$

$$\begin{aligned} \psi_2 = -\sin(\alpha) \sqrt{\frac{\omega_l}{2\pi|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_l}^x |p| dx\right) [1 + O(\hbar)] + \\ \cos(\alpha) \sqrt{\frac{\omega_r}{2\pi|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_r} |p| dx\right) [1 + O(\hbar)]. \end{aligned} \quad (75)$$

Асимптотические формулы (74)–(75) применимы равномерно на некотором отрезке, лежащем в области потенциального барьера, и они допускают дифференцирование. Несложно видеть, что сохранение обоих слагаемых в этих асимптотических формулах имеет смысл только в окрестности точки $x = c$ — центра потенциального барьера, определяемого по формуле (17). Подставляя асимптотики состояний $\psi_{1,2}$ и соответствующие асимптотики для производных $\psi'_{1,2}$ в формулу (73), получаем, что асимптотику величины расщепления Δ можно найти только в том случае, если $x_0 = c$, иначе остаточные члены $O(\hbar)$ из формул (74) и (75) становятся доминирующими членами в асимптотическом разложении величины Δ . Возьмем $x_0 = c$, тогда формула (72) переходит в формулу (31):

$$\Delta = \frac{\delta(\hbar)}{2\sqrt{p_l p_r}} [1 + O(\hbar)],$$

полученную нами ранее методом двухуровневого приближения.

Полученный результат можно сформулировать в виде следующей теоремы.

Теорема 4.1. Пусть стационарные состояния $\psi_{1,2}$ оператора Шредингера $\hat{H}$ с двумерным несимметричным потенциалом $V(x)$, соответствующие паре квазивырожденных энергетических уровней $E_{1,2}$, билокализованы.

Тогда для величины расщепления Δ справедлива асимптотическая формула (31).

Следовательно, применяя операторный метод вычисления расщепления, можно частично получить результат критерия двойной локализации (теорема 3.1), доказанного методом двухуровневого приближения. А именно, мы показали, что из двойной локализации пары стационарных состояний следует, что расщепление пары соответствующих квазивырожденных точек спектра является экспоненциально малым при $\hbar \rightarrow 0$ и справедлива асимптотическая формула (31). С другой стороны, применение метода двухуровневого приближения позволяет наглядно представить стационарные состояния в виде определенных линейных комбинаций базовых состояний ψ_l и ψ_r с экспоненциальной точностью по $\hbar$ (см. формулу (29)), что приводит к естественному построению полного критерия резонансного туннелирования, в том числе к доказательству утверждения, обратного к теореме 4.1 (см. теорему 3.1).

Таким образом, метод двухуровневого приближения дает более полный результат в задачах несимметричного туннельного резонанса. Метод, основанный на операторной формуле (68), может быть успешно применен в задачах с симметрией, где асимптотика стационарных состояний известна априори (они симметричны и антисимметричны), или в задачах, где построение “правильного” базиса для двухуровневого приближения, то есть выбор волновых функций ψ_l и ψ_r , представляет трудности.

4.2 Общая структура спектра для частицы на окружности

Рассмотрим одномерное стационарное уравнение Шредингера на окружности:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi, \quad (76)$$

где $\hbar$ — малый параметр квазиклассического приближения, а $V(x) \in C^2(\mathbb{R})$ — периодический потенциал:

$$V(x + 2\pi) = V(x).$$

На решения уравнения (76) наложим условие периодичности:

$$\psi(x + 2\pi) = \psi(x). \quad (77)$$

Соответствующий оператор Шредингера имеет вид

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

Известно, что спектр оператора Шредингера на окружности $\hat{H}$ является дискретным. В общем случае спектр оказывается невырожденным, хотя потенциалы, для которых все точки спектра, за исключением конечного числа, вырождены (кратность равна двум), имеют большое значение для теории нелинейных уравнений (см., например, в [53, 68]).

При построении квазиклассического приближения для спектра оператора Шредингера на окружности $\hat{H}$ возникают различные асимптотические режимы в разных областях спектра, то есть для различных характерных значений энергии E . Естественно выделить следующие случаи:

1. Энергия существенно меньше максимума потенциала.
2. Энергия близка к максимуму потенциала.
3. Энергия существенно больше максимума потенциала.

Ниже приведено качественное описание квазиклассического спектра оператора $\hat{H}$, учитывающее туннелирование для энергий меньше и больше максимума потенциала. Случай энергий близких к максимуму потенциала, то есть отвечающих движению в окрестности сепаратрисы, подробно изложен, например, в работе [60].

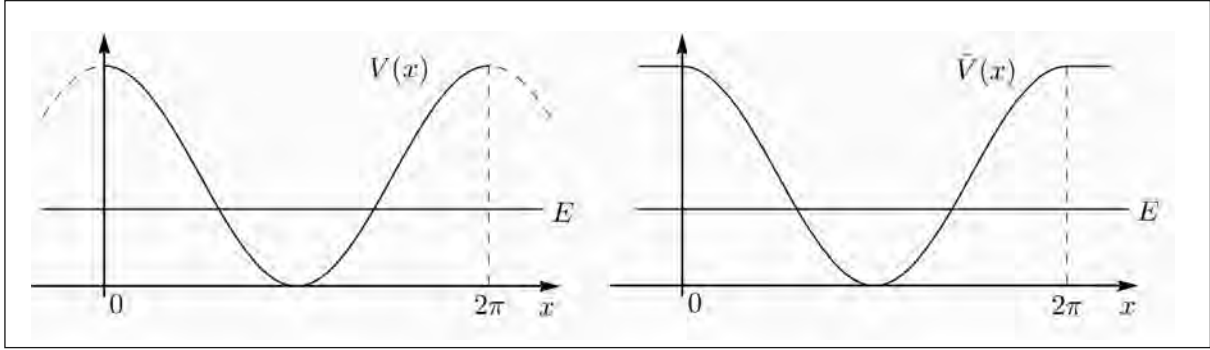


Рис. 12

Энергия существенно меньше максимума потенциала

Рассмотрим спектр оператора $\hat{H}$ в окрестности энергии E , меньшей максимума потенциала. В этом случае уравнение $V(x) = E$ имеет действительные корни — точки поворота, классическая частица движется в потенциальной яме между соответствующими точками поворота и не может совершить полный оборот по окружности. Тогда, если не учитывать туннельные эффекты (см. раздел 2.1), которые экспоненциально малы при $\hbar \rightarrow 0$, то квазиклассическое приближение для спектра оператора $\hat{H}$ можно получить, рассматривая данную потенциальную яму как часть потенциала на прямой. Например, если для определенности считать, что максимум потенциала $V(x)$ достигается в точке $x = 0$, можно рассмотреть спектральную задачу для оператора Шредингера на прямой с потенциалом $\tilde{V}(x)$, который равен $V(x)$ при $x \in [0, 2\pi]$ и равен $V(0) = \max V(x)$ при $x \notin [0, 2\pi]$ (см. рис. 12). Наилучшее приближение данного вида можно получить, если аналогичный “разрез” окружности проводить не в точке максимума потенциала, а в центре наибольшего потенциального барьера, где размер барьера и его центр определяются с точки зрения инстантонной метрики (см. раздел 3.1). Тогда, если в задаче не было резонансного туннелирования через этот барьер¹, то спектр в окрестности фиксированной энергии E и соответствующие стационарные состояния оператора $\hat{H}$ можно приблизить с экспоненциальной точностью при $\hbar \rightarrow 0$ решениями соответствующей задачи на прямой, то есть не возникает никакой существенной разницы между движением квантовой частицы (эволюцией квантового состояния) в потенциале $V(x)$ на окружности и в соответствующем потенциале $\tilde{V}(x)$ на прямой.

Некоторые отличия построения квазиклассического приближения для задачи на окружности и на прямой возникают, если в задаче присутствует резонансное туннелирование через все потенциальные барьеры. Например, для потенциала $V(x) = \cos(2x)$ на окружности, область классического движения состоит из двух интервалов (при $-1 < E < 1$), разделенных двумя равными потенциальными барьерами. Учитывая результаты, представленные в разделе 2.1, получаем, что спектр оператора $\hat{H}$ в окрестности E состоит из пар квазивырожденных точек. В задаче присутствует симметрия относительно замены x на $2\pi - x$, что приводит к двойной локализации стационарных состояний, то есть к резонансному туннелированию. Величина расщепления может быть посчитана, как и в задаче о двойной симметричной потенциальной

¹Резонансное туннелирование через барьер заведомо не возникает, если кратчайшее расстояние по инстантонной метрике между соответствующими точками поворота отвечает дуге, не лежащей под данным барьером.

яме на прямой, например, используя методы, изложенные в раздел 3.1 или в разделе 4.1. Основное отличие заключается в том, что туннелирование происходит сразу через два барьера, что приводит к тому, что величина туннельного расщепления Δ оказывается в два раза больше, чем при туннелировании через один барьер [86, 90].

Стоит отметить, что для энергий ниже максимума потенциала можно рассмотреть более глубокую классификацию различных энергетических режимов. А именно, можно отдельно рассматривать энергии, близкие к положениям равновесия потенциала, и энергии, которым соответствуют только простые точки поворота. Данный подход обусловлен тем, что при различных типах точек поворота асимптотическое решение уравнения Шредингера со степенной точностью по $\hbar$ имеет различный вид (см., например, [59, 70]). Например, если глобальный минимум потенциала $V(x)$ достигается в одной точке и является невырожденным, как в случае квантового маятника с $V(x) = \cos(x)$, можно отдельно рассматривать нижние энергетические уровни, которые могут быть приближенно описаны при помощи решений спектральной задачи для соответствующего гармонического осциллятора.

Энергия существенно больше максимума потенциала

Рассмотрим теперь случай энергий существенно больше максимума потенциала. Тогда классическая частица пробегает всю окружность в одном из двух возможных направлений — это так называемый роторный режим. Две соответствующие траектории периодического движения симметричны относительно замены знака импульса, что приводит к квазивырождению энергетических уровней оператора Шредингера $\hat{H}$ при квазиклассическом приближении (см. раздел 2.1).

Используя метод ВКБ (см. [59] или [70]), можно получить асимптотику фундаментальной системы решений уравнения (76) для энергий E выше максимума потенциала $V(x)$:

$$\begin{aligned}\varphi_1(x) &= \sqrt{\frac{\omega}{p(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x) dx\right) [1 + O(\hbar)], \\ \varphi_2(x) &= \sqrt{\frac{\omega}{p(x)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x) dx\right) [1 + O(\hbar)],\end{aligned}\tag{78}$$

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

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

Асимптотические оценки (78) равномерны по x и допускают дифференцирование. Состояния $\varphi_{1,2}$ нормированы, состояние φ_1 соответствует движению частицы против часовой стрелки по окружности (положительное направление оси x), а φ_2 — по часовой стрелке.

Используя условие периодичности (77), получаем аналог правила дискретизации Планка-Бора-Зоммерфельда (3) для частицы на окружности:

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sqrt{2(E - V(x))} dx = n\hbar + O(\hbar^2),\tag{79}$$

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 (79). 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 φ_1 и φ_2 . Задача о построении квазиклассической асимптотики величины туннельного расщепления Δ рассмотрена в разделе 4.4.

4.3 Уравнение Шредингера с периодическим потенциалом на прямой

В данном разделе изложены хорошо известные результаты о связи блоховского (зонного) спектра уравнения Шредингера на прямой с периодическим потенциалом и дискретного спектра оператора Шредингера с соответствующим потенциалом на окружности (см., например, [53–55, 99]).

Рассмотрим стационарное уравнение Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi, \quad (80)$$

с периодическим потенциалом $V(x) \in C^2(\mathbb{R})$:

$$V(x + 2\pi) = V(x).$$

Уравнение (80) в общем случае называют уравнением Хилла. В отличие от задачи на окружности, где на $\psi(x)$ накладывается условие периодичности (77), для задачи на прямой известно, что E принадлежит спектру оператора Шредингера тогда и только тогда, когда существует ограниченное решение $\psi(x)$ уравнения (80). Если оба линейно независимых решения уравнения (80) ограничены, то говорят, что уравнение устойчиво. Хорошо известна следующая теорема (см., например, [55]).

Теорема 4.2. *Для заданного потенциала $V(x) \in C^2(\mathbb{R})$ с периодом 2π существуют две монотонно возрастающие неограниченные последовательности $\{\lambda_n\}_{n=0}^\infty$ и $\{\lambda'_n\}_{n=1}^\infty$ такие, что справедливы следующие утверждения:*

1. Уравнение (80) имеет периодическое решение $\psi(x)$:

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

тогда и только тогда, когда $E = \lambda_n$ для некоторого $n = 0, 1, 2, \dots$

2. Уравнение (80) имеет антипериодическое решение $\psi(x)$:

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

тогда и только тогда, когда $E = \lambda'_n$ для некоторого $n = 1, 2, \dots$

3. Справедливы неравенства:

$$\lambda_0 < \lambda'_1 \leq \lambda'_2 < \lambda_1 \leq \lambda_2 < \lambda'_3 \leq \dots$$

4. Уравнение Хилла (80) устойчиво при E из интервалов

$$(\lambda_0, \lambda'_1), (\lambda'_2, \lambda_1), \dots$$

и неустойчиво при E из интервалов

$$(-\infty, \lambda_0), (\lambda'_1, \lambda'_2), (\lambda_1, \lambda_2), \dots$$

5. Уравнение Хилла, вообще говоря, неустойчиво на границах приведенных интервалов, если только соответствующий интервал неустойчивости не вырождается в точку, тогда уравнение Хилла устойчиво.

Из данной теоремы следует, что для заданного периодического потенциала $V(x)$ границы зон устойчивости — это точки спектра оператора Шредингера на окружности с потенциалом $V(2x)$. Таким образом, задача о вычислении туннельного расщепления энергий дискретного спектра оператора Шредингера на окружности эквивалентна задаче о определении ширины лагун (промежутков) в непрерывном спектре соответствующего оператора на прямой.

4.4 Туннельное расщепление энергий для частицы на окружности

Используя общий операторный метод вычисления асимптотики туннельного расщепления, предложенный в разделе 4.1, найдем величину расщепления спектра оператора Шредингера $\hat{H}$ частицы на окружности для энергий существенно больше максимума потенциала.

Поскольку резонансное туннелирование происходит между двумя траекториями, симметричными относительно замены знака импульса, то следуя операторному методу, предложенному в разделе 4.1, 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 (68) и производя необходимые упрощения, получаем следующую теорему.

Теорема 4.3. Пусть $E_{1,2}$ — пара близких с точностью $O(\hbar^2)$ собственных значений оператора $\hat{H}$, отвечающих роторному режиму. Пусть соответствующие собственные функции $\psi_{1,2}$ выбраны действительными и нормированы так, что

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= \sqrt{\frac{2\omega}{p(x)}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x) dx\right) + O(\hbar), \\ \psi_2(x) &= \sqrt{\frac{2\omega}{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x) dx\right) + O(\hbar). \end{aligned} \quad (81)$$

Тогда для расщепления энергий справедлива асимптотическая формула

$$\Delta = \frac{1 + O(\hbar)}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} dx_1 \int_0^{2\pi} dx_2 (V(x_2) - V(x_1)) \operatorname{ctg}\left(\frac{x_2 - x_1}{2}\right) \psi_1(x_1) \psi_2(x_2). \quad (82)$$

Для доказательства теоремы нам понадобится следующая лемма.

Лемма 4.1. Пусть

$$\phi(x) = \sqrt{\frac{\omega}{p(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x) dx\right).$$

Тогда

$$\hat{\sigma}\phi = \phi + O(\hbar), \quad \hat{\sigma}\bar{\phi} = O(\hbar), \quad (83)$$

$$\langle \phi, \phi \rangle = 1, \quad \langle \phi, \bar{\phi} \rangle = O(\hbar). \quad (84)$$

Доказательство леммы 4.1. Пусть π_k — проектор на состояние с импульсом $p = k\hbar$:

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

Следовательно,

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

Оценим величину

$$|\pi_k \bar{\phi}(x)| = \frac{1}{2\pi} \left| \int_0^{2\pi} \sqrt{\frac{\omega}{p(x)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x) dx - ikx\right) dx \right|.$$

Интегрируя по частям два раза, несложно показать, что

$$|\pi_k \bar{\phi}(x)| \leq \hbar^2 \sqrt{\omega} \max \left| \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{p(x) + k\hbar} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{\sqrt{p(x)}} \frac{1}{p(x) + k\hbar} \right) \right) \right|.$$

Следовательно,

$$|\pi_k \bar{\phi}(x)| \leq C \frac{\hbar^2}{(p_{min} + k\hbar)^2},$$

где $p_{min} = \min p(x) > 0$, а константа C не зависит от k и от $\hbar$. Так как справедлива оценка (см. рис. 13):

$$\sum_{k=1}^{+\infty} \frac{\hbar}{(p_{min} + k\hbar)^2} \leq \int_0^{+\infty} \frac{dx}{(p_{min} + x)^2} = \frac{1}{p_{min}},$$

то получаем одну из оценок (83):

$$\hat{\sigma}\bar{\phi}(x) = O(\hbar).$$

Учитывая полученную оценку и то, что $\overline{\pi_k \phi} = \pi_{-k} \phi$, получаем оценку

$$O(\hbar) = \overline{\hat{\sigma}\bar{\phi}(x)} = (1 - \hat{\sigma})\phi.$$

Таким образом, доказаны обе оценки (83).

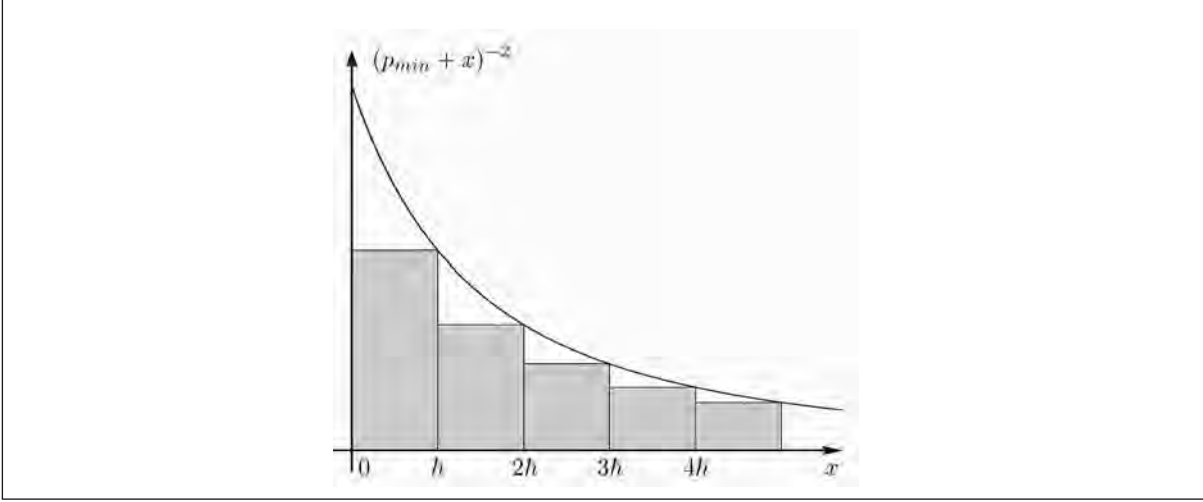


Рис. 13

Докажем, что $\langle \phi, \phi \rangle = 1$. Действительно,

$$\langle \phi, \phi \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\omega}{p(x)} dx = 1.$$

Остается показать, что $\langle \phi, \bar{\phi} \rangle = O(\hbar)$. Один раз интегрируя по частям, получаем оценку

$$\langle \phi, \bar{\phi} \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\omega}{p(x)} \exp\left(\frac{2i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x) dx\right) dx = O(\hbar).$$

Лемма полностью доказана.

Доказательство теоремы 4.3. Очевидно справедливы следующие коммутационные соотношения:

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

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

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

где $\delta v(z_1, z_2)$ — разностная производная $v(z)$:

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

а верхние номера определяют порядок действия операторов.

Поскольку

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

получаем, что

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

Используя тригонометрическую формулу

$$\operatorname{ctg} \left(\frac{x_2 - x_1}{2} \right) = i \frac{e^{ix_2} + e^{ix_1}}{e^{ix_2} - e^{ix_1}},$$

и то, что

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

получаем

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

Учитывая формулу (68), остается показать, что

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

Докажем, что данная оценка следует непосредственно из (81). Учитывая формулу (81), получаем:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\phi(x) + \overline{\phi(x)} \right) + O(\hbar), \\ \psi_2 &= \frac{1}{i\sqrt{2}} \left(\phi(x) - \overline{\phi(x)} \right) + O(\hbar). \end{aligned}$$

Тогда из утверждения леммы 4.1 следует, что

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

Что и требовалось доказать.

Очевидно, что ВКБ асимптотики вида (81) не являются достаточно точными для вычисления интеграла в формуле (82), но они дают представление о характере подынтегрального выражения. Интеграл в (82) — это интеграл от быстро осциллирующей функции без стационарных точек. Следовательно, если потенциал $V(x)$ — гладкий, то расщепление будет стремиться к нулю быстрее любой степени $\hbar$.

Если потенциал $V(x)$ — аналитический, то асимптотику интеграла (82) можно найти, используя метод перевала [100]. Стационарные точки определяются из равенства

$$p(x_1) = p(x_2) = 0,$$

то есть совпадают с комплексными точками поворота уравнения (76). Следовательно, основной вклад в величину расщепления дают комплексные точки поворота, что согласуется с общей теорией надбарьерного отражения [34, 101–103].

Теорема 4.4. Пусть выполнены условия теоремы 4.3. Тогда, переходя в формуле (82) из x в p -представление, получаем

$$\Delta = 2(1 + O(\hbar)) \operatorname{Im} \sum_{n=1}^{\infty} \overline{\tilde{V}(n)} \times \sum_{k=1}^n \left(\tilde{\psi}_1(n-k+1) \tilde{\psi}_2(k-1) + \tilde{\psi}_1(n-k) \tilde{\psi}_2(k) \right), \quad (85)$$

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

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

Доказательство. Так как потенциал $V(x)$ — действительная функция, получаем, что

$$\tilde{V}(-n) = \overline{\tilde{V}(n)}.$$

Следовательно,

$$V(x_2) - V(x_1) = \sum_{n=1}^{+\infty} \tilde{V}(n) (e^{inx_2} - e^{inx_1}) + \sum_{n=1}^{+\infty} \overline{\tilde{V}(n)} (e^{-inx_2} - e^{-inx_1}).$$

Учитывая тригонометрическую формулу

$$\operatorname{ctg} \left(\frac{x_2 - x_1}{2} \right) = i \frac{e^{ix_2} + e^{ix_1}}{e^{ix_2} - e^{ix_1}},$$

и элементарные формулы

$$\begin{aligned} \frac{e^{inx_2} - e^{inx_1}}{e^{ix_2} - e^{ix_1}} &= \sum_{k=1}^n e^{i(n-k)x_1} e^{i(k-1)x_2}, \\ \frac{e^{-inx_2} - e^{-inx_1}}{e^{ix_2} - e^{ix_1}} &= - \sum_{k=1}^n e^{-i(n-k+1)x_1} e^{-ikx_2}, \end{aligned}$$

получаем, что

$$(V(x_2) - V(x_1)) \operatorname{ctg} \left(\frac{x_2 - x_1}{2} \right) = i \sum_{n=1}^{\infty} \left(R(n) - \overline{R(n)} \right),$$

где

$$R(n) = \tilde{V}(n) \sum_{k=1}^n (e^{i(n-k+1)x_1} e^{i(k-1)x_2} + e^{i(n-k)x_1} e^{ikx_2}).$$

Подставляя полученное выражение в формулу (82) и интегрируя по x_1 и x_2 , получаем искомую формулу (85).

Из формулы (85) 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.

4.5 Квантовый маятник

В качестве примера применения теоремы 4.3 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 базовых моделей квантовой механики [56, 87, 88], а стационарное уравнение Шредингера (76) в этом случае эквивалентно уравнению Матье. В данном разделе показано, как из общей формулы для расщепления (теорема 4.3) можно получить квазиклассическую формулу Дыхне-Симоняна (формула (95)).

Рассмотрим пару близких собственных значений $E_{1,2}$. Пусть соответствующие собственные функции $\psi_{1,2}$ выбраны как в теореме 4.3, то есть $\psi_{1,2}$ — действительны, $\psi_1(x)$ — четная функция, а $\psi_2(x)$ — нечетная. Тогда, подставляя потенциал $V(x) = \gamma \cos(x)$ в формулу (85), получаем

$$\Delta = \gamma \operatorname{Im} \left(\tilde{\psi}_1(1) \tilde{\psi}_2(0) + \tilde{\psi}_1(0) \tilde{\psi}_2(1) \right) [1 + O(\hbar)], \quad (86)$$

где

$$\tilde{\psi}_j(n) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \psi_j(x) e^{-inx} dx, \quad j = 1, 2. \quad (87)$$

Формула для расщепления, аналогичная формуле (86), применялась в работе [89] при дополнительном предположении о малости потенциала по сравнению с полной энергией, то есть при $\gamma \sim \hbar$.

Стационарное уравнение Шредингера (76) в p -представлении принимает вид

$$\frac{p^2}{2} \tilde{\psi}(n) + \frac{\gamma}{2} \left(\tilde{\psi}(n+1) + \tilde{\psi}(n-1) \right) = E \tilde{\psi}(n), \quad (88)$$

где $p = n\hbar$. Уравнение (88) является рекуррентным уравнением второго порядка с медленно меняющимися коэффициентами. Используя дискретный метод ВКБ [96, 97] или операторные методы [65], можно построить 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

$$u_{\pm}(n) = \left(\left(\frac{E}{\gamma} - \frac{(n\hbar)^2}{2\gamma} \right)^2 - 1 \right)^{-1/4} \times \exp \left(\pm \frac{1}{\hbar} \int_0^{n\hbar} \operatorname{arccch} \left(\frac{E}{\gamma} - \frac{p^2}{2\gamma} \right) dp \right) [1 + O(\hbar)], \quad (89)$$

где $u_+(n) = u_-(-n)$ и $\operatorname{arccsch}(z) = \ln(z + \sqrt{z^2 - 1}) > 0$ при $z > 1$. В работах [97, 104] дано строгое обоснование подобных асимптотик. Асимптотики (89) справедливы в области

классически запрещенных значений импульса между двумя точками поворота, то есть для n таких, что

$$|n\hbar| \leq p_0 - \varepsilon,$$

где $\varepsilon > 0$ — некоторое фиксированное число, а p_0 и $-p_0$ — точки поворота:

$$p_0 = \sqrt{2(E - \gamma)}.$$

Решения $u_{\pm}(n)$ являются линейно независимыми и образуют фундаментальную систему решений уравнения (88) для заданной энергии $E > \gamma$. Разложим состояния $\tilde{\psi}_{1,2}$ по этой системе.

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

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}_1(n) &= C_1 (u_+(n) + u_-(n)), \\ \tilde{\psi}_2(n) &= iC_2 (u_+(n) - u_-(n)),\end{aligned}\tag{90}$$

где C_i — действительные нормировочные константы:

$$\begin{aligned}C_1 &= \sqrt{\frac{\omega\hbar}{4\pi\gamma}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^{p_0} \operatorname{arccch}\left(\frac{E}{\gamma} - \frac{p^2}{2\gamma}\right) dp\right) [1 + O(\hbar)], \\ C_2 &= -\sqrt{\frac{\omega\hbar}{4\pi\gamma}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^{p_0} \operatorname{arccch}\left(\frac{E}{\gamma} - \frac{p^2}{2\gamma}\right) dp\right) [1 + O(\hbar)].\end{aligned}\tag{91}$$

Замечание. Фундаментальная система решений $u_{\pm}(n)$ зависит от энергии E , следовательно, энергия E равна E_j в точном разложении (90) для $\tilde{\psi}_j(n)$. В асимптотических формулах (89) и (91) можно положить $E = (E_1 + E_2)/2$.

Доказательство. Поскольку $\psi_{1,2}$ выбраны действительными, ψ_1 — четная функция, а ψ_2 — нечетная, то их коэффициенты Фурье удовлетворяют следующим соотношениям:

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}_1(n) &= \tilde{\psi}_1(-n) = \overline{\tilde{\psi}_1(n)}, \\ \tilde{\psi}_2(n) &= -\tilde{\psi}_2(-n) = -\overline{\tilde{\psi}_2(n)}.\end{aligned}$$

Следовательно, справедливо разложение (90).

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 [96]. С другой стороны, нормировочные константы можно найти, переходя из x в p -представление, избегав таким образом необходимости рассматривать асимптотику состояний вблизи точек поворота. Состояния $\psi_{1,2}$ в x -представлении нормированы и имеют вид:

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1(x) + \varphi_2(x)), \\ \psi_2(x) &= \frac{1}{i\sqrt{2}} (\varphi_1(x) - \varphi_2(x)).\end{aligned}$$

Переходя в p -представление, получаем:

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}_1(n) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1(x) + \varphi_2(x)) e^{-inx} dx, \\ \tilde{\psi}_2(n) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{1}{i\sqrt{2}} (\varphi_1(x) - \varphi_2(x)) e^{-inx} dx.\end{aligned}\quad (92)$$

Построим асимптотику интегралов (92), используя формулы (78) для $\varphi_{1,2}(x)$. Подынтегральное выражение в (92) быстро осциллирует, а стационарные точки фазы становятся комплексными, если импульс $p = n\hbar$ отвечает классически запрещенной зоне. Применяя метод перевала [100], получаем

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}_1(n) &= \sqrt{\frac{\omega\hbar}{4\pi\gamma}} \left(\left(\frac{E}{\gamma} - \frac{(n\hbar)^2}{2\gamma} \right)^2 - 1 \right)^{-1/4} \times \\ &\quad \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{n\hbar}^{p_0} \operatorname{arccch} \left(\frac{E}{\gamma} - \frac{p^2}{2\gamma} \right) dp \right) [1 + O(\hbar)].\end{aligned}\quad (93)$$

Поскольку комплексный контур интегрирования, возникающий в методе перевала, должен лежать в области применимости асимптотик (78), асимптотика (93) справедлива для n таких, что

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

Согласуя асимптотические формулы (90) и (93), получаем выражение для C_1 . Формулу для C_2 можно получить аналогично.

Подставляя асимптотику состояний $\tilde{\psi}_{1,2}$ в (86), получаем итоговую формулу для величины туннельного расщепления энергий квантового маятника:

$$\Delta = -\frac{\omega\hbar}{\pi} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{-p_0}^{p_0} \operatorname{arccch} \left(\frac{E}{\gamma} - \frac{p^2}{2\gamma} \right) dp \right) [1 + O(\hbar)].\quad (94)$$

Знак минус в формуле (94) показывает, что четное состояние $\psi_1(x)$ обладает большей энергией, чем нечетное $\psi_2(x)$, что согласуется с общей теорией уравнения Хилла с четным потенциалом.

Интеграл в показателе экспоненты в (94) можно переписать иначе. Например, если от $x dp$ перейти к $p dx$, получим

$$\Delta = -\frac{\omega\hbar}{\pi} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{-\operatorname{arccch}(E/\gamma)}^{\operatorname{arccch}(E/\gamma)} \sqrt{2(E - \gamma \operatorname{ch}(x))} dx \right) [1 + O(\hbar)],\quad (95)$$

где $\sqrt{2(E - \gamma \operatorname{ch}(x))}$ — туннельный импульс, то есть классический импульс $p(x) = \sqrt{2(E - V(x))}$ при чисто мнимых значениях координаты x . Таким образом, интеграл в (94) берется по инстантону, где инстантон лежит на 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 импульсом соответственно (см. [12]).

Благодарности

Автор благодарен М. В. Карасеву за постановку задачи, плодотворные обсуждения и помощь в подготовке статьи. Исследование осуществлено при поддержке Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ в 2015 г.

Список литературы

- [1] *Hund F.* Zur Deutung der Molekelspektren. I // *Zeitschrift für Physik*, 1927, **40**(10), 742–764.
- [2] *von Neumann J., Wigner E.* Über merkwürdige diskrete Eigenwerte. Über das Verhalten von Eigenwerten bei adiabatischen Prozessen // *Physikalische Zeitschrift*, 1929, **30**, 467–470.
- [3] *Гольданский В. И., Трахтенберг Л. И., Флёргов В. Н.* Туннельные явления в химической физике // М.: Наука, 1986, 296 стр.
- [4] *Ankerhold J.* Quantum Tunneling in Complex Systems: The Semiclassical Approach // *Springer Tracts in Modern Physics*, Vol. 224, Berlin: Springer, 2007, 210 pp.
- [5] *Bell R. P.* The tunnel effect in chemistry // New York: Chapman and Hall, 1980, 222 pp.
- [6] *Razavy M.* Quantum Theory of Tunneling // Singapore: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2003, 549 pp.
- [7] *Демидовский В. Я., Вугальтер Г. А.* Физика квантовых низкоразмерных структур // М.: Логос, 2000, 248 стр.
- [8] *Dovzhenko Y., Stehlik J., Petersson K. D., Petta J. R., Lu H., Gossard A. C.* Nonadiabatic quantum control of a semiconductor charge qubit // *Physical Review B*, 2011, **84**(16), p. 161302.
- [9] *Gangopadhyay A., Dzero M., Galitski V.* Exact solution for quantum dynamics of a periodically driven two-level system // *Physical Review B*, 2010, **82**(2), p. 024303.
- [10] *Gorman J., Hasko D. J., Williams D. A.* Charge-qubit operation of an isolated double quantum dot // *Physical review letters*, 2005, **95**(9), p. 090502.
- [11] *Jaffe R. L.* Reflection above the barrier as tunneling in momentum space // *American Journal of Physics*, 2010, **78**(6), 620–623.
- [12] *Dobrokhotov S. Yu., Shafarevich A. I.* “Momentum” Tunneling between tori and the splitting of eigenvalues of the Laplace–Beltrami operator on Liouville surfaces // *Mathematical Physics, Analysis and Geometry*, 1999, **2**(2) 141–177.
- [13] *Maitra N. T., Heller E. J.* Semiclassical perturbation approach to quantum reflection // *Physical Review A*, 1996, **54**(6), 4763–4768.

- [14] *Davis M. J., Heller E. J.* Quantum dynamical tunneling in bound states // The Journal of Chemical Physics, 1981, **75**(1), 246–254.
- [15] *Heller E. J., Davis M. J.* Quantum dynamical tunneling in large molecules. A plausible conjecture // The Journal of Physical Chemistry, 1981, **85**(4), 307–309.
- [16] *Hensinger W. K., Häffner H., Browaeys A., et al.* Dynamical tunnelling of ultracold atoms // Nature, 2001, **412**(6842), 52–55.
- [17] *Le Deunff J., Mouchet A.* Instantons revisited: dynamical tunnelling and resonant tunnelling // Physical Review E: Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics, 2010, **81**, p. 046205.
- [18] *Брюнинг Й., Доброхотов С. Ю., Некрасов Р. В.* Расщепление нижних энергетических уровней в квантовой двойной яме в магнитном поле и туннелирование волновых пакетов в нанопроводах // ТМФ, 2013, **175**(2), 206–225.
- [19] *Dobrokhotov S. Yu., Anikin A. Yu.* Tunneling, librations and normal forms in a quantum double well with a magnetic field // Nonlinear physical systems: spectral analysis, stability and bifurcations, Kirillov O. N., Pelinovsky D. E. (editors), New York: John Wiley & Sons, 2014, 85–110.
- [20] *Brüning J., Dobrokhotov S. Yu., Pankrashkin K. V.* The spectral asymptotics of the two-dimensional Schrödinger operator with a strong magnetic field. I // RJMP, 2002, **9**(1), 14–49.
- [21] *Fedotov A. Klopp F.* Strong resonant tunneling, level repulsion and spectral type for one-dimensional adiabatic quasi-periodic Schrödinger operators // Annales Scientifiques de l'École Normale Supérieure, 2005, **38**(6), 889–950.
- [22] *Fedotov A. Klopp F.* Weakly resonant tunneling interactions for adiabatic quasi-periodic Schrödinger operator // Mémoire de la Société mathématique de France, 2006, **104**, 1–108.
- [23] *Березин Ф. А., Шубин М. А.* Уравнение Шредингера. // М.: Изд-во Моск. ун-та, 1983, 392 стр.
- [24] *Рид М., Саймон Б.* Методы современной математической физики. Том 2. Гармонический анализ. Самосопряженность // М.: Мир, 1978, 394 стр.
- [25] *Hall B. C.* Quantum Theory for Mathematicians // Graduate Texts in Mathematics. 267, New York: Springer, 2013, 554 pp.
- [26] *Выборный Е. В.* Туннельное расщепление спектра и билокализация собственных функций в несимметричной двойной яме // Наноструктуры. Математическая физика и моделирование, 2012, **7**(2), 5–16.
- [27] *Выборный Е. В.* Туннельное расщепление спектра и билокализация собственных функций в несимметричной двойной яме // ТМФ, 2014, **178**(1), 108–131.
- [28] *Выборный Е. В.* Об энергетическом расщеплении при динамическом туннелировании // ТМФ, 2014, **181**(2), 337–348.

- [29] *Выборный Е. В., Карасев М. В.* Эффект туннельного захвата // Наноструктуры. Математическая физика и моделирование, 2014, **11**(1), 27–36.
- [30] *Karasev M. V., Vybornyi E. V.* Tunnel catch from potential wells and energy detection // Working papers by Cornell University. Series math-ph “arxiv.org”, 2014, arXiv:1411.4436, 11 pp.
- [31] *Cordes J. G., Das A. K.* Tunnelling in asymmetric double-well potentials: varying initial states // Superlattices and microstructures, 2001, **29**(2), 121–132.
- [32] *Dennison D. M., Uhlenbeck G. E.* The two-minima problem and the ammonia molecule // Physical Review, 1932, **41**(3) 313–321.
- [33] *Славянов С. Ю.* Асимптотика некоторых сингулярных задач Штурма-Лиувилля по большому параметру в случае близких точек перехода // Диф. уравн., 1969, **5**(2), 313–325.
- [34] *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория // Теоретическая физика Т. 3, Издание 1-е, Л.: Гос. изд-во РСФСР, 1948, 567 стр.
- [35] *Панкратова Т. Ф.* Квазимоды и экспоненциальное расщепление собственных значений // Проблемы математической физики, выпуск 11: Дифференциальные уравнения и теория рассеяния, Л.: Изд-во ЛГУ, 1986, 167–177.
- [36] *Федорюк М. В.* Асимптотика дискретного спектра оператора $w''(x) - \lambda^2 p(x)w(x)$ // Математический сборник, 1965, **68**(110), №1, 81–110.
- [37] *Gildener E., Patrascioiu A.* Pseudoparticle contributions to the energy spectrum of a one-dimensional system // Physical Review D, 1977, **16**(2), 423–430.
- [38] *Harrell E. M.* Double wells // Communications in Mathematical Physics, 1980, **75**(3), 239–261.
- [39] *Polyakov A. M.* Quark confinement and topology of gauge theories // Nuclear Physics B, 1977, **120**(3), 429–458.
- [40] *Доброхотов С. Ю., Колокольцов В. Н., Маслов В. П.* Расщепление нижних энергетических уровней уравнения Шредингера и асимптотика фундаментального решения уравнения $h u_t = h^2 \Delta u / 2 - V(x)u$ // ТМФ, 1991, **87**(3), 323–375.
- [41] *Helffer B.* Semi-classical analysis for the Schrödinger operator and applications // Lecture notes in mathematics. 1336, Berlin: Springer, 1988, 110 pp.
- [42] *Helffer B., Sjöstrand J.* Multiple wells in the semi-classical limit I // Communications in Partial Differential Equations, 1984, **9**(4), 337–408.
- [43] *Simon B.* Semiclassical analysis of low lying eigenvalues. II: Tunneling // Annals of mathematics, 1984, **120**(1), 89–118.
- [44] *Демидовский В. Я., Савинский С. С.* Моделирование резонансных туннельных процессов в гетероструктуре, состоящей из двух квантовых ям // ФТТ, 1992, **34**(8), 2382–2385.

- [45] *Тавгер Б. А., Демиховский В. Я.* Квантовые размерные эффекты в полупроводниковых и полуметаллических пленках // УФН, 1968, **96**(9), 61–86.
- [46] *Славянов С. Ю., Лай. В.* Специальные функции: единая теория, основанная на анализе особенностей // СПб.: Невский Диалект, 2002, 312 стр.
- [47] *Nieto M. M., Gutschick V. P., Bender C. M., et al.* Resonances in quantum mechanical tunneling // Physics Letters B, 1985, **163**(5-6), 336–342.
- [48] *Jona-Lasinio G., Martinelli F., Scoppola E.* New approach to the semiclassical limit of quantum mechanics // Communications in Mathematical Physics, 1981, **80**(2), 223–254.
- [49] *Song D. Y.* Tunneling and energy splitting in an asymmetric double-well potential // Annals of Physics, 2008, **323**(12), 2991–2999.
- [50] *Graffi S., Grecchi V., Jona-Lasinio G.* Tunnelling instability via perturbation theory // Journal of Physics A: Mathematical and General, 1984, **17**(15), 2935–2944.
- [51] *Simon B.* Semiclassical analysis of low lying eigenvalues. IV. The flea on the elephant // Journal of functional analysis, 1985, **63**(1), 123–136.
- [52] *Helfffer B., Sjöstrand J.* Puits multiples en limite semi-classique. II: Interaction moléculaire. Symétries. Perturbation // Annales de l'institut Henri Poincaré (A) Physique théorique, 1985, **42**(2), 127–212.
- [53] *Brown B. M., Eastham M. S. P., Schmidt K. M.* Periodic differential operators // Operator Theory: Advances and Applications, Springer, 2012, Vol. 228, 216 pp.
- [54] *Eastham M. S. P.* The spectral theory of periodic differential equations // Edinburgh: Scottish Academic Press Ltd., 1973, 130 pp.
- [55] *Magnus W., Winkler W.* Hill's Equation // New York: Wiley, 1966, 127 pp.
- [56] *Condon E. U.* The Physical Pendulum in Quantum Mechanics // Physical Review, 1928, **31**, 891–894.
- [57] *Дыхне А. М.* Квазиклассическая частица в одномерном периодическом потенциале // ЖЭТФ, 1961, **40**, 1423–1426.
- [58] *Симонян С. Г.* Асимптотика ширины лакун в спектре оператора Штурма-Лиувилля с периодическим аналитическим потенциалом // Диф. уравн., 1970, **6**, 1265–1272.
- [59] *Федорюк М. В.* Асимптотические методы для линейных обыкновенных дифференциальных уравнений // М.: Наука, 1983, 352 стр.
- [60] *Connor J. N. L., Uzer T., Marcus R. A., Smith A. D.* Eigenvalues of the Schrödinger equation for a periodic potential with nonperiodic boundary conditions: A uniform semiclassical analysis // The Journal of chemical physics, 1984, **80**(10), 5095–5106.
- [61] *Pöschel J.* Hill's potentials in weighted Sobolev spaces and their spectral gaps // Mathematische Annalen, 2011, **349**(2), 433–458.

- [62] *Trubowitz E.* The inverse problem for periodic potentials // Communications on Pure and Applied Mathematics, 1977, **30**(3), 321–337.
- [63] *Hochstadt H.* Estimates on the stability intervals for Hill's equation // Proceedings of the American Mathematical Society, 1963, **14**(6), 930–932.
- [64] *Маслов В. П., Федорюк М. В.* Квазиклассическое приближение для уравнений квантовой механики // М.: Наука, 1976, 296 стр.
- [65] *Маслов В. П.* Операторные методы // М.: Наука, 1973, 544 стр.
- [66] *Арнольд В. И.* Математические методы классической механики // М.: Наука, 1989, 472 стр.
- [67] *Арнольд В. И.* Моды и квазимоды // Функц. анализ и его прил., 1972, **6**(2), 12–20.
- [68] *Дубровин Б. А., Новиков С. П.* Периодический и условно периодический аналог многосолитонных решений уравнения Кортевега-де Фриза // ЖЭТФ, 1974, **67**(6), 2131–2144.
- [69] *Hoehn E. K. H.* On the coexistence problem for a special Hill's equation // ZAMM Journal of Applied Mathematics and Mechanics, 1969, **49**(11), 679–683.
- [70] *Olver F. W. J.* Asymptotics and special functions // New York: Academic Press, 1974, 547 pp.
- [71] *Herring C.* Critique of the Heitler-London method of calculating spin couplings at large distances // Reviews of Modern Physics, 1962, **34**(4), 631–645.
- [72] *Маслов В. П.* Глобальная экспоненциальная асимптотика решений туннельных уравнений и задачи о больших отклонениях // Труды Математического института им. В. А. Стеклова, 1984, **163**, 150–180.
- [73] *Agmon S.* Lectures on exponential decay of solutions of second order elliptic equations: bounds on eigenfunctions of N-body Schrodinger operators // Mathematical Notes, 29, Princeton: Princeton University Press, 1982, 24–87.
- [74] *Heitler W., London F.* Wechselwirkung neutraler Atome und homöopolare Bindung nach der Quantenmechanik // Zeitschrift für Physik, 1927, **44**(6–7), 455–472.
- [75] *Базилевский М. В.* Метод молекулярных орбит и реакционная способность органических молекул // М.: Химия, 1969, 302 стр.
- [76] *Горьков Л. П., Путаевский Л. П.* Энергия расщепления термов молекулы водорода // Докл. Акад. наук СССР, 1963, **151** 822–825.
- [77] *Herring C., Flicker M.* Asymptotic Exchange Coupling of Two Hydrogen Atoms // Physical Review A, 1964, **134**(2), 362–366.
- [78] *Альбеверьо С. А., Доброхотов С. Ю., Семенов Е. С.* О формулах для расщепления верхних и нижних энергетических уровней одномерного оператора Шредингера // ТМФ, 2004, **138**(1), 116–126.
- [79] *Anikin A. Yu.* Asymptotic behavior of the Maupertuis action on a libration and tunneling in a double well // RJMP, 2013, **20**(1), 1–10.
- [80] *Brüning J., Dobrokhotov S. Yu., Semenov E. S.* Unstable closed trajectories, librations and splitting of the lowest eigenvalues in quantum double well problem // Regular and chaotic dynamics, 2006, **11**(2), 167–180.

- [81] *Доброхотов С. Ю., Колокольцов В. Н.* Об амплитуде расщепления нижних энергетических уровней оператора Шредингера с двумя симметричными ямами // ТМФ, 1993, **94**(3), 426–434.
- [82] *Маслов В. П.* Комплексный метод ВКБ в нелинейных уравнениях // М.: Наука, 1977, 384 стр.
- [83] *Панкратова Т. Ф.* Квазимоды и экспоненциальное расщепление гамака // Математические вопросы теории распространения волн. 21, Зап. научн. сем. ЛОУМИ., **195**, СПб.: Наука, 1991, 103–112.
- [84] *Helffer B., Sjöstrand J.* Multiple wells in the semi-classical limit III: Interaction Through Non-Resonant Wells // Mathematische Nachrichten, 1985, **124**(1), 263–313.
- [85] *Simon B.* Instantons, double wells and large deviations // Bulletin of the American Mathematical Society, 1983, **8**(2), 323–326.
- [86] *Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П.* Статистическая физика. Часть 2. Теория конденсированного состояния // Теоретическая физика Т. 9, М.: Наука, 1978, 448 стр.
- [87] *Ayub M., Naseer K., Ali M., Saif F.* Atom optics quantum pendulum // Journal of Russian Laser Research, 2009, **30**(3), 205–223.
- [88] *Leibsch M., Schmidt B.* Quantum dynamics of a plane pendulum // Physical Review A, 2009, **80**(1), p. 012510.
- [89] *Avron J., Simon B.* The asymptotics of the gap in the Mathieu equation // Annals of Physics, 1981, **134**1, 76–84.
- [90] *Harrell E. M.* The band-structure of a one-dimensional, periodic system in a scaling limit // Annals of physics, 1979, **119**(2), 351–369.
- [91] *Harrell E. M.* On the effect of the boundary conditions on the eigenvalues of ordinary differential equations // American Journal of Mathematics, supplement, 1981, 139–150.
- [92] *Harrell E. M.* On the rate of asymptotic eigenvalue degeneracy // Communications in Mathematical Physics, 1978, **60**(1), 73–95.
- [93] *Арнольд В. И.* Замечания о теории возмущений для задач типа Матье // УМН, 1983, **38**(4) (232), 189–203.
- [94] *Hochstadt H.* Instability intervals of Hill's equation // Communications on Pure and Applied Mathematics, 1964, **17**(2), 251–255.
- [95] *Simon B.* Semiclassical analysis of low lying eigenvalues. I. Non-degenerate minima: Asymptotic expansions // Annales de l'institut Henri Poincaré (A) Physique théorique, 1983, **38**(3), 295–308.
- [96] *Браун П. А.* Метод ВКБ для трехчленных рекуррентных соотношений и квазиэнергии ангармонического осциллятора // ТМФ, 1978, **37**(3), 355–370.
- [97] *Васильева А. Б.* О соответствии между некоторыми свойствами решений линейных разностных систем и систем обыкновенных линейных дифференциальных уравнений // Труды семинара по теории дифференциальных уравнений с отклоняющимся аргументом, 1967, **5**, 21–44.

- [98] *Като Т.* Теория возмущений линейных операторов // М.: Мир 1972, 740 стр.
- [99] *Рид М., Саймон Б.* Методы современной математической физики. Том 4. Анализ операторов // М.: Мир, 1982, 428 стр.
- [100] *Федорюк М. В.* Метод перевала // М.: Наука, 1977, 368 стр.
- [101] *Покровский В. Л., Саввиных С. К., Улинич Ф. Р.* Надбарьерное отражение в квазиклассическом приближении // ЖЭТФ, 1958, **34**(5), 1272–1277.
- [102] *Покровский В. Л., Саввиных С. К., Улинич Ф. Р.* Надбарьерное отражение в квазиклассическом приближении. II // ЖЭТФ, 1958., **34**(6), 1629–1631.
- [103] *Покровский В. Л., Халатников И. М.* К вопросу о надбарьерном отражении частиц высоких энергий // ЖЭТФ, 1961, **40**, 1713–1719.
- [104] *Geronimo J. S., Smith D. T.* WKB (Liouville-Green) analysis of second order difference equations and applications // Journal of Approximation Theory, 1992, **69**(3), 269–301.

COORDINATE AND MOMENTUM TUNNELING IN ONE-DIMENSIONAL QUANTUM SYSTEMS WITH DISCRETE SPECTRUM

Vybornyi E.V.

National Research University «Higher School of Economics»

evgeniy.bora@gmail.com

Received 10.01.2015

We consider the problem of constructing semiclassical asymptotic expansions of discrete spectrum and the corresponding stationary states of one-dimensional Schrödinger operator in the case of resonance tunneling. We consider two basic models: tunneling in an asymmetric double-well potential on a line and momentum tunneling of a particle in a potential field on a circle. For an asymmetric double-well potential we obtain the criterion of resonance tunneling, i. e. the necessary and sufficient conditions of stationary states bilocalization. We obtain explicit asymptotic formulas for the tunneling energy splitting in the case of high energy levels and for energies close to the minima of the potential. In the general case of dynamic tunneling we proposed a general method to find the asymptotic estimates for the tunneling energy splitting. In the case of the particle on a circle our method yields an asymptotic formula for the tunneling splitting, which is applicable in the case of analytical potential as well as in the case of finite smoothness. As an example, we consider the problem of momentum tunneling of the quantum pendulum.

TAUTOMERIC MUTATION IN DNA. A THEORETICAL COMPARATIVE STUDY AND SYNTHESIS BETWEEN VARIOUS PROPOSED QUANTUM MODELS

Ranjan Chaudhury

*S.N. Bose National Centre For Basic Sciences
Block-JD, Sector-3, Salt Lake, Kolkata-700098, India*

ranjan@bose.res.in; ranjan 021258@yahoo.com

Поступила 30.11.2014

The tautomeric mutation and its repair in DNA is discussed from the perspective of a theoretical bio-physicist using quantum tools. Many of the well known concepts and techniques borrowed from condensed matter physics in particular, are found to be quite useful in the analysis of this process and to provide important insight. It is shown that the proposed diverse theoretical models for describing this phenomenon can be unified by making use of these tools. Various experimental results of paramount importance, obtained from living organisms, were highlighted and used as input in the calculations and in the analysis. Possible applications of the theoretical procedure adopted here to investigate many related phenomena, are also briefly discussed.

1 Introduction

The mutation process in DNA and its importance to evolution of living systems is quite well studied by now[1-4]. In fact, mutation plays a very crucial role in the evolution and the appearance of a large variety of species on this earth conforming to Darwinian theory. A mutation introduces a defect in the well ordered arrangement or symmetry pattern of nucleotides' distribution within a double stranded DNA molecule, with non trivial consequences in various bio-physical processes DNA undergoes. To elaborate, even

the partial loss of symmetry involving the complementarity of the nucleotides on the two strands, affects the very important processes like replication and transcription. The process of replication in fact, triggers the cell division processes in a living system and provides the pathway for the development of new multicellular organisms. Moreover, it is also responsible for the growth of population of species through geological time scale. The process of transcription leads to Protein synthesis and hence plays an important role in the development of tissues for a living system.

There are different types of mutation classified on the basis of the origin viz. spontaneous and induced. The spontaneous mutation is the one which occurs in the absence of any external radiation or chemical agent. They provide the background mutations and are the main contributors to the evolution of species and the variety present on this earth. The induced mutation is brought about by the presence of certain chemical agents known as mutagens or by irradiation of electromagnetic wave.

A special type of point mutation which is of particular interest to condensed matter physicists is “tautomeric mutation”. In this mutational process each nucleotide viz. Adenine (A), Thymine (T), Cytosine (C) and Guanine (G) fluctuates between various isomeric forms or tautomers. Furthermore, these nucleotides existing in these various forms viz. keto (most common and stable one) and enol/ imino (rare and unstable ones) can sometimes exhibit pairings which violate the conventional Watson-Crick base pairing rule (BPR) for a double stranded DNA[1-4]. Very often intrinsic quantum fluctuations involving proton tunnelling and causing hydrogen bond alterations are responsible for this anomalous behavior. It may be clarified here that hydrogen atom being the lightest atom, exhibits zero point motion, which is at the root of proton tunneling.

This non trivial role of quantum processes has inspired theoretical biophysicists to construct various types of quantum models for describing the phenomenon of tautomeric mutation in DNA. There is in fact a very deep connection between biology and physics with regard to many diverse phenomena seen in biological systems [5]. This originates from the fundamental relation between various microscopic and macroscopic processes underneath as well as the symmetry of various structures and patterns observed in physical and biological systems.

Coming back to the specific phenomenon of tautomeric mutation, it should be remarked however that, sometimes chemical contamination during synthesis may also be the cause for such tautomers to be created in a DNA molecule.

In this communication, we would like to discuss at length about two such proposed models based on quantum physics and establish a mathematical connection between them. One of them is a “quantum spin-pseudo-spin model” (to be called simply “quantum spin model” for brevity from now onwards) of generalized transverse Ising type, while the other one is a “bosonic model” of tight binding nature [1, 2]. It is worth presenting a brief background review of these two well known models from statistical mechanics and condensed matter physics perspective, before we describe their relevance and connection to the DNA problem.

It is worth recalling that a transverse Ising model has two parts viz.:- (i) a usual Ising model involving coupling between the longitudinal spin components S_z 's (taking discrete values) corresponding to the nearest neighbour sites and (ii) a transverse magnetic field (along x or y directions) coupling to the spins [6]. The transverse Ising model can exhibit quantum processes unlike the original conventional Ising model. This is because the transverse magnetic field couples to the spin operators and can flip the spin states from ‘up’ to ‘down’ and vice versa.

The ‘bosons’ are a class of fundamental particles with integral spins and obey Bose-Einstein Statistics [7]. ‘Fermions’ are the other class of fundamental particles which obey Fermi-Dirac Statistics and hence follow the well known Pauli Exclusion principle [7]. In condensed matter systems various excitations of both collective and composite particle nature, often acquire bosonic character after quantization. They include phonons, magnons, plasmons, excitons etc. [8]. These bosons belong to the class ‘quasi-particles’ in condensed matter physics and can propagate as well, transporting charge and spin fluctuations in the system. On the other hand, the ‘real single particles’ which are the original charge carriers and spin carriers in various condensed matter systems, can in general be identified as ‘electron’ or ‘hole’ both of which are of fermionic character [8].

Coming back to our original problem of tautomeric mutation, we now describe the two proposed models viz. (i) the quantum spin based model and (ii) the bosonic model at some length. We then show that the second model above can indeed be obtained mathematically from the first one in a perturbative scheme in low orders and furthermore that the two approaches can be unified in a consistent manner even from a bio-physical view point.

2 Mathematical formulation

The quantum spin model proposed and referred to earlier, in fact contains both interacting ‘spin’ and ‘pseudo-spin degrees’ of freedom which are operators and also includes a ‘generalized transverse field’ coupling to them [1]. In this model, the interactions within a DNA molecule is described by an analogous transverse field Ising Hamiltonian (with spin 1/2) corresponding to a 2-legged ladder, with inter-strand coupling of ferromagnetic type between pseudo-spin operators and antiferromagnetic type between the longitudinal components (z-components) of spin operators. The transverse field here couples to both transverse components of spin operators as well as pseudo-spin operators and causes the mutations by flipping the states and breaking the BPR order. In this model, the nucleotides ‘A’, ‘T’, ‘C’ and ‘G’ are regarded as different quantum states of a DNA molecule at any local site within the molecule and are represented as (X, +1/2), (X, -1/2), (Y, +1/2) and (Y, -1/2) respectively; where the first letter stands for the pseudo-spin label and the second number gives the spin state (“up” or “down”). Thus ‘X’ and ‘Y’ themselves are called “pseudo-spin up state” and “pseudo-spin down state” respectively for convenience. Furthermore, the transverse field term is assumed to have contributions of intra-strand type processes only.

It is worthwhile to point out that in a real DNA molecule, the inter-strand coupling is provided by hydrogen bonds which are weaker in strength than the intra-strand coupling between the nearest neighbour nucleotides generated through covalent bonding, by an order of magnitude [3]. Therefore the tautomeric mutation takes place easily by hydrogen bond rearrangements.

Mathematically the full quantum spin model is given by [1]:-

$$\mathcal{H}_{QSM} = \mathcal{H}_{Ising}^{inter-strand} + \mathcal{H}_{Transverse}^{intra-strand} \quad (1)$$

where

$$\mathcal{H}_{Ising}^{inter-strand} = \sum_{i,M,N,s,s'} \lambda_i^{1,2} \sigma_{i,M,s;1}^z \sigma_{i,N,s';2}^z \delta_{M,N} \delta_{s,-s} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{Transverse}^{intra-strand} = \sum_{i,l} \frac{1}{2} H_i^l & \left[(\sigma_{i,l}^+ + \sigma_{i,l}^-)_{sp} X I_{psp} + I_{sp} X (\sigma_{i,l}^+ + \sigma_{i,l}^-)_{psp} \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} (\sigma_{i,l}^+ + \sigma_{i,l}^-)_{sp} X (\sigma_{i,l}^+ + \sigma_{i,l}^-)_{psp} \right] \end{aligned} \quad (3)$$

We note that the operators σ 's occurring above in equation 2 are in fact composite operators comprising of both spin operators and pseudo-spin operators and I being the identity operator. The parameter H represents the transverse field. In our calculations later for simplicity, we have assumed it to be spatially uniform i.e. site independent.

Thus the quantum spin model above contains the very elements triggering the process of mutation through the presence of the transverse field term, besides having the usual Watson-Crick base pairing term represented by the Ising-like term.

On the other hand, the proposed bosonic model for DNA is based on the assumption of tunnelling states of protons as two-level systems and involves only an intra-strand Hamiltonian containing a single boson site energy term and a nearest neighbour bosonic hopping term [2]. Mathematically it is expressed as [2]:-

$$\mathcal{H}_{bosonic} = \sum_n E_0 b_n^+ b_n + \kappa \sum_n (b_n^+ b_{n+1} + b_{n+1}^+ b_n) \quad (4)$$

where the operators b_n and b_n^+ represent the bosonic destruction and bosonic creation operators respectively at the 'n'th site on a strand. In this model the tautomeric mutation is regarded as a bosonic excitation (of excitonic type) with the parameter E_0 ' being the bosonic energy. Thus the first term represents the site energy of this boson. The second term describes the hopping of this boson between the nearest neighbour sites on any one strand, implying the intra-strand propagation of mutation with an amplitude κ . The inter-site hopping amplitude depends upon the dipolar interactions between the nearest neighbour bases, besides many other factors. It may be recalled that this Hamiltonian is analogous to the well known tight binding model corresponding to band theory in condensed matter physics.

It must be pointed out that the full Hamiltonian corresponding to DNA in the bosonic approach, contains additional parts consisting of structural distortion of the DNA molecule from the solid mechanics perspective as well [2, 3]. This arises from the proton tunneling process combined with the hopping of the excitation, leading to a deformation of elastic DNA through the π -electrons' rearrangement [2]. On the other hand, the quantum spin model contains a fictitious transverse field H causing anomalous pairings [1], which can be linked to the physical relocation and reorientation of the Hydrogen bonds, leading again to the phonon-like distortion modes due to the charge redistribution, along the 'rungs' joining the multiple strands generated in the course of replication process. Thus the presence of an intrinsic coupling between the electronic/ ionic degrees of freedom and the phonon-like modes in both the models, provide a very important conceptual bridge between the two approaches.

The bosonic model thus assumes the existence of mutational process already and looks at the consequences only, as is clear from the structure of the Hamiltonian given in equation 4 and the discussions in the above paragraph.

For the quantum spin model the above coupling would imply that the Fourier Transform of the transverse field (H_q) and the phonon creation and destruction operators can be related in the following way:-

$$H_q = C_q (v_q + v_{-q}^+) \quad (5)$$

where v_q and v_q^+ are the phonon destruction and creation operators respectively and the coefficients C_q involve the proton tunneling matrix elements. The above equation exhibits the possible deformation of nucleotides and the lattice (along the rungs) due to proton tunneling. The portion relevant for the pure mutational process however consists only of C_q .

We would now like to explore a possible mathematical connection between the spin model and the bosonic model. For this we make the following assumptions and adopt the following strategy:-

1. We assume that both of the above models become operational physically only after the completion of many many rounds of replication, so that a large number of mutually complementary strands are already formed in the system in accordance with the BPR.
2. There are long range orderings involving both “spins” and “pseudo-spins” along the directions of ‘rungs’ i.e. perpendicular to the strands with the pseudo-spins exhibiting ferromagnetism and the spins displaying anti-ferromagnetism in the quantum spin model [1]. The arrangements of spins and pseudo-spins along any strand are however random [1].
3. The tautomeric mutation implies excitations in either or both spin channels and pseudo-spin channels brought about by the transverse field H through flipping action in the quantum spin model.
4. We bosonize the entire Hamiltonian corresponding to the quantum spin model for DNA, by making use of Holstein-Primakoff transformations for both spin and pseudo-spin sectors.

Holstein-Primakoff transformations (HPT) are very well known transformations in condensed matter physics, in particular in the field of magnetism [8-11]. It relates the quantum spin operators to a set of bosonic operators in the ordered phase of a ferromagnet or anti-ferromagnet. It is ensured that these transformations preserve the respective commutation algebras of both spin operators and bosonic operators. These bosonic operators are real space bosonic operators to start with, representing spin flips implying excitations or de-excitations in the ordered phase. The corresponding q-space bosonic operators can easily be constructed by taking Fourier Transforms. At very low temperatures, the spin Hamiltonian for a ferromagnet or anti-ferromagnet can be approximately diagonalized in terms of these q-space bosonic operators, representing collective modes. This scheme is known as ‘bosonization’. These above bosonic operators in fact correspond to creation and destruction of new bosonic particles known as “magnons” in the field of magnetism.

In our case with DNA, we apply the above procedure corresponding to the ordered structures for both ‘spin’ and ‘pseudo-spin’ to generate the bosonic excitations. Besides, we take the Fourier Transform along the rungs and proceed accordingly.

5. Treating the inter-strand term as the principal term and the intra-strand term as a perturbation in the bosonized version of the Hamiltonian, we would now like to carry out a Schrieffer-Wolf like transformation and retain terms upto 3rd order in intra-strand part of the spin model.

Schrieffer-Wolf transformation (SWT) is another well known transformation in quantum mechanics and is widely used in various fields of condensed matter physics involving many-body effects in particular [8-11]. In this transformation, a Hamiltonian consisting of a principal term and a secondary one is transformed by a similarity transformation to generate an effective Hamiltonian where the secondary term does not occur in linear order. Thus this new effective Hamiltonian contains the higher order contributions (from 2nd order onwards) of the secondary term besides the principal term. This gives rise to new interaction processes bringing in a lot of additional physics. This transformation is particularly very useful and popular in the field of superconductivity dealing with electron-phonon interaction based pairing mechanism and other types of boson mediated pairing as well. Besides, SWT is also made use of extensively in the theoretical treatment of Anderson-Kondo-Mixed valency problem [11].

6. We apply SWT to the Hamiltonian corresponding to the quantum spin model for DNA, with the inter-strand Ising part as the principal term and the intra-strand transverse field containing part involving flipping operators, as the secondary term. The rationale for this procedure is that from the operator composition of the original quantum spin Hamiltonian, this scheme is expected to generate an effective Hamiltonian quite similar in structure to the one proposed in the bosonic model, when retaining the low order contributions in the transformed expression. This would then lead to a unification of the two quantum models put forward.

It should be pointed out here that whereas the bosonic model proposes the intra-strand hopping of only one kind of boson, the calculations with the quantum spin model is very much likely to produce the hopping of two kinds of bosons viz. the HP bosons belonging to both spin sector and pseudo-spin sector. Besides, the effective Hamiltonian generated from this calculation based on SWT, may also contain an additional term of 2nd order in intra-strand part as well, which has no analogue in the bosonic model.

We now present the calculations in somewhat details in the following section.

3 Calculations

We recall that in the quantum spin model, we have the principal part identified with $\mathcal{H}_{Ising}$ and the perturbation part being $\mathcal{H}_{Transverse}$. The standard Schrieffer-Wolf transformation (SWT) then leads to the following expression for the effective Hamiltonian:-

$$\mathcal{H}_{eff} = \mathcal{H}_{Ising} + [\mathcal{H}_{Transverse}, S] + \frac{1}{2} [[\mathcal{H}_{QSM}, S], S] + higherorders(neglected) \quad (6)$$

by keeping terms up to 3rd order in perturbation, as stated earlier; where the operator $\hat{S}$ satisfies the equation

$$[\mathcal{H}_{Ising}, S] + \mathcal{H}_{Transverse} = 0 \quad (7)$$

ensuring that a term 1st order in $\mathcal{H}_{Transverse}$ does not occur in $\mathcal{H}_{eff}$.

It is assumed here that the operator S has similar structure and is of the same order as $\mathcal{H}_{Transverse}$. Therefore $\hat{S}$ can easily be determined from the above equation (7) as:-

$$S^{mn} = \frac{\mathcal{H}_{Transverse}^{mn}}{(E_n - E_m)} \quad (8)$$

where the corresponding matrix elements of the operators have been related with E 's being the eigenvalues of $\mathcal{H}_{Ising}$, which are $\frac{-\lambda_i}{4}$ and zero only, as can be seen easily from its form.

Thus making use of the above set of equations, one can extract the corresponding matrix elements of the operator term which is of 3rd order in $\mathcal{H}_{Transverse}$, occurring in $\mathcal{H}_{eff}$. Taking into account the two strands, one needs to evaluate 16 matrix elements. This enables one to write down the full formal expression for $\mathcal{H}_{eff}$, which would be pretty long.

We now show below that the term 3rd order in $\mathcal{H}_{Transverse}$ indeed contains the 2nd term (hopping term) of the bosonic model. Besides, we also show that $\mathcal{H}_{Ising}$ of the quantum spin model can easily be identified with the 1st term (site energy term) of the bosonic model as well. To show this explicitly, we need to carry out the bosonization operation as discussed earlier.

The Holstein-Primakoff transformations (HPT) take the following forms here:-

(a): Spins forming anti-ferromagnetic ladder:

$$\begin{aligned} S_i^z &= SI - a_i^+ a_i \\ S_i^+ &= (2S)^{\frac{1}{2}} \left(I - \frac{a_i^+ a_i}{2S} \right)^{\frac{1}{2}} a_i \\ S_i^- &= (2S)^{\frac{1}{2}} a_i^+ \left(I - \frac{a_i^+ a_i}{2S} \right)^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (9)$$

for up spin ($\uparrow$) sublattice with $S = \frac{1}{2}$ and

$$\begin{aligned} S_i^z &= -SI + b_i^+ b_i \\ S_i^+ &= (2S)^{\frac{1}{2}} \left(I - \frac{b_i^+ b_i}{2S} \right)^{\frac{1}{2}} b_i^+ \\ \hat{S}_i^- &= (2S)^{\frac{1}{2}} b_i \left(I - \frac{b_i^+ b_i}{2S} \right)^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (10)$$

for down spin ($\downarrow$) sublattice with $S = \frac{1}{2}$.

The quantities a_i^+ and b_i^+ are the boson operators representing spin flips at site i corresponding to the up and down sublattices respectively.

(b): Pseudo-spins forming ferromagnetic ladder:

The transformations are very similar to the above equation 9, excepting that there is only one lattice with up pseudo-spin ($\uparrow$) present and that the corresponding boson operator is represented as $\tilde{b}_i$ or $\tilde{b}_i^+$ corresponding to destruction or creation of this bosonic excitation.

Making use of the above transformation equations (HPT) corresponding to both spin and pseudo-spin and incorporating them in the original $\hat{\mathcal{H}}_{QSM}$, we get the following equations keeping the bosonic operators in the lowest order:-

$$\mathcal{H}_{Ising}^{inter-strand} = \left[E_G I + \sum_n \left[E_0 \left(a_n^{1+} a_n^1 + b_n^{2+} b_n^2 + \tilde{b}_n^{1+} \tilde{b}_n^1 + \tilde{b}_n^{2+} \tilde{b}_n^2 \right) \right] \right] \quad (11)$$

where

$$E_G = -\frac{\lambda^{1,2}}{16}$$

and

$$E_0 = \frac{\lambda^{1,2}}{8}$$

with ‘ I ’ being the identity operator and assuming site independence of the inter-strand coupling; and

$$\begin{aligned} [\mathcal{H}_{Transverse}^{intra-strand}]^3 = & \left(\frac{1}{8} \right) \sum_{i,j,k,l1,l2,l3} \left[[H_i^{sp} H_j^{sp} H_k^{sp} \{ a_i^{l1+} a_j^{l2} a_k^{l3+} \delta_{\sigma_i, \sigma_k} \right. \\ & + b_i^{l1+} b_j^{l2} b_k^{l3+} \delta_{\sigma_i, \sigma_k} + a_i^{l1+} a_j^{l2} b_k^{l3+} \delta_{\sigma_i, -\sigma_k} + \text{terms with} \\ & \text{similar combinations involving interchanges between} \\ & \text{11, 12 and 13} \} \delta_{ij} \delta_{i\pm 1, k} \delta_{l1, l2} \delta_{l2, l3}] + [H_i^{psp} H_j^{psp} H_k^{psp} \\ & \{ b_i^{\sim l1+} b_j^{\sim l2} b_k^{\sim l3+} \delta_{\sigma_{i(psp)}, \sigma_{j(psp)}} + \text{terms with similar} \\ & \text{combinations involving interchanges between 11, 12} \\ & \text{and 13} \} \delta_{ij} \delta_{i\pm 1, k} \delta_{l1, l2} \delta_{l2, l3}] + \text{terms of different types} \\ & \left. \text{not contributing to the intra-strand hopping of boson} \right. \\ & \left. \text{between nearest neighbors} \right] \end{aligned} \quad (12)$$

We will assume the transverse field H_i to be site independent (H) later.

The quantities $l1$, $l2$ and $l3$ represent strand indices and take values 1 and 2 considering only the two primary strands.

Comparing these expressions with those from $\mathcal{H}_{bosonic}$ (see equation 4) we get,

$$(E_0)_{bosonic} = \left(\frac{1}{8} \right) \lambda^{1,2} \quad (13)$$

and

$$\kappa \approx \left(\frac{1}{4} \right) H^3 \quad (14)$$

In the above calculations, we have taken into account the contributions to the nearest neighbor hopping of the bosons arising from both spin and pseudo-spin sectors in any one strand. Furthermore, we have also assumed the site independence of the transverse field coupling to both spins and pseudo-spins.

Thus we have been able to identify the parameters occurring in the bosonic model in terms of those of the quantum spin model, as given in the equations 13 and 14. This therefore implies a unification of the two approaches based on quantum modelling.

It must be emphasized however, that the exact or more correct relations between the coefficients of the two models can be obtained only after writing down the full (and very long !) expression for $\mathcal{H}_{eff}$.

4 Results and discussions

The main results and the salient features which follow from the calculation reported here are highlighted below:-

1. The two independent quantum Hamiltonians put forward for modelling the tautomeric mutation of DNA, viz. quantum spin model and the bosonic model can indeed be unified. More precisely, the bosonic model can itself be obtained from the spin model in a perturbation expansion retained upto low order, after carrying out bosonization of the spin model.
2. Through our proposed unification scheme for connecting the two quantum models, the nature of bosons occurring in the bosonic model have become more precisely and clearly physically defined and identified. Moreover these bosons are found to be of two different/ distinct types, arising from the spin and the pseudo-spin sectors, as has been explained earlier.
3. The phonons are implicitly present in our calculations through the presence of the external transverse field H_i appearing in the quantum spin model. The existence of this hidden coupling between the phonons and magnons/pseudo-magnons is however extremely important and crucial for providing the physical basis and rationale in the unification of the two quantum models. Moreover, this coupling also plays the pivotal role in future calculations of some more important properties of DNA, to be discussed in the next section.
4. The lowest order processes present in the calculations described in this article are those involving 1 phonon- 1 magnon/1 pseudo-magnon and 1 phonon- 3 magnon/ 3 pseudo-magnon, as the operator structure of $\hat{\mathcal{H}}_{Transverse}$ would suggest. For our unification calculation relating the quantum spin model with the bosonic model presented in this article, we however have only retained the 1 phonon- 1 magnon/ 1 pseudo-magnon process in the very lowest order for simplicity.
5. The lowest order process referred above, is a virtual process not conserving energy strictly speaking. For the macroscopic size of a DNA molecule with a long time duration of observation, which is the case assumed here in the calculations, the bosons (magnons and the pseudo-magnons) acquire very large life times and become almost “stable particles” for all practical purposes, as expected. Therefore these bosons behave really like genuine quasi-particles and contribute to the various thermodynamic and electromagnetic response functions of DNA, to be touched upon in the next section.
6. In our quantum spin model each strand has been assumed to be of paramagnetic nature in both spin and pseudo-spin [1]. In view of the presence of covalent bonding between the adjacent nucleotides situated in a strand for a real DNA molecule [2-4] however, the spins and pseudo-spins in a strand, introduced in our quantum spin

model, should in fact be correlated. This would reduce the degree of degeneracy of the ground state corresponding to any strand, substantially from the ideal value of $4N$ assumed in our calculations and would also affect the expression obtained for the repairing efficiency [1]. The relation between the quantum spin model and the bosonic model derived in this article, remains intact though.

5 Applications and future plans

Our calculations presented in somewhat details in this article, bring out the crucial and non-trivial importance of the role played by the quantum fluctuations in the phenomena of tautomeric mutations in DNA. Quite interestingly, this theoretical approach and calculations find ready and promising applications in several other related phenomena. The most notable amongst these are:- Denaturation dynamics of DNA molecule, response of DNA to terahertz radiation and effective mutation rate observed in various organisms. Our calculations involving quantum models can easily be utilized and extended to study these phenomena and properties. These are discussed below in somewhat details.

(i) Denaturation dynamics:

At a sufficiently high temperature a DNA molecule ‘melts’ i.e. the two complementary strands of DNA get delinked. This is due to the rupture of the hydrogen bonds between the complementary bases. This process is known as denaturation of DNA [4]. Because the G-C bonds are stronger than the A-T bonds, the (G+C) rich DNA configuration has a higher melting temperature than that of (A+T) rich configuration [4]. The melting temperature (T_m) is defined as the temperature at which at least 50 per cent of the hydrogen bonds have been broken.

It may be recalled that in our calculations involving quantum spin model, we had obtained an expression for the Base Pair Transition rate by the 2nd order of perturbation treatment with the transverse field containing term [1]. This contribution would then have an additional effect on the thermally driven melting process and denaturation dynamics in general. Since our calculation has been done at zero temperature, this study would determine the role of pure quantum fluctuations in the melting and denaturation of DNA. Intuitively, it is expected to bring down T_m . It is worthwhile to mention that our treatment has modelled the structure of DNA simply as a pair of linear strands with complementary base pairs facing each other, in accordance with the well known Peyrard-Bishop (PB) model [12]. At the same time it is also to be emphasized that without invoking any inter-ionic potentials i.e. intra-base pair as well as nearest neighbor inter-base pair potentials heuristically, as have been done in several other theoretical approaches using PB model [13], the very quantum origin of tautomeric fluctuations can be made use of readily to directly study the denaturation dynamics in our approach. The parameters in our theoretical procedure would however consist only of 2 quantities viz. the inter-strand coupling λ and the intra-strand transverse field H , as has been explained earlier.

(ii) Response to terahertz radiation:

The mutation rate in DNA under electromagnetic (EM) irradiation shows an enhancement in general [3, 4]. The high energy irradiation with Ultra-violet (UV) rays and X-rays is found to trigger point mutations and the rate/ percentage of mutation grows steeply with increase in radiation dose as well, although exhibiting a linear dependence approximately [4]. This is very much expected as the high frequency EM radiation can easily break the chemical bonds and cause mutations. On the contrary, the effect of low fre-

quency EM radiation on biological systems, more specifically on genetic materials and enzymatic reactions, known as “mw-effect” has been rather debatable [14, 15]. Recently it has been proposed based on improved mathematical modeling (by carrying out calculations on an extension of Peyrard- Bishop model), that a resonance type of interaction between terahertz (THz) radiation and the coupled modes involving torsional modes and the hydrogen bond stretching modes with bond energies in THz range, may cause partial and even complete destruction of hydrogen bonds between the corresponding bases of the two complementary strands of DNA molecule [15]. This idea finds a positive experimental support as well from the study of non-thermal effects of THz radiation on certain biosensor cells [16]. Besides, the experiments with THz radiation can also bring out the nature of phonon modes in DNA molecules [17], which are of great importance in our model calculations.

This phenomenon in turn is very much expected to strongly alter the evolution and dynamics of DNA, influencing various bio-physical processes like replication and transcription. Our formalism and calculational scheme based on quantum spin model can easily be made use of in investigating these aspects by first analysing the nature and properties of the excitations (quasi-particles) in this model of ours and then determining their coupling to an external electromagnetic field. Subsequently, the rates of these processes can be calculated as well through standard quantum mechanical scheme based on Fermi’s Golden rule by enumerating the various relevant matrix elements, very similar to the one described in our earlier work [1]. This investigation would be taken up in near future.

(iii) Compensation and the effective mutation rate observed in organisms:

Our quantum spin model based calculations explicitly provide mathematical expressions for the tautomeric mutation rate and its compensation rate in a DNA molecule [1]. These are found to be quite consistent and are in broad agreement quantitatively with the observations for the effective mutation rate corresponding to a living system viz. a bacteria called *neurospora*, as an example [1-4]. The mutation here is predominantly of ‘spontaneous’ type and its frequency of occurrence is rather low. The effective mutation rate as observed, however also contains a compensatory contribution, considered arising only from the ‘primary repair processes’ or ‘proof reading’, as is called [1-4, 18]. This is believed to be an intrinsic and internal process for a living system carried out by a special class of enzymes. On the other hand, our calculation involving quantum spin modelling very firmly establishes that the observed rate has another hidden non-trivial compensatory contribution in the form of a ‘secondary repair’ originating entirely from the quantum fluctuations [1]. Therefore the conventional quantitative analyses based upon the observed mutational rate should be relooked into, taking into account this novel compensatory mechanism. It is worthwhile to point out that an estimate of the ratio of secondary repair rate and the primary repair rate shows it to be of the order of 1 per cent [1-4, 18]. Therefore the secondary repair process can’t be ignored at all when determining or estimating the effective mutation rate of DNA in various organisms.

6 Concluding Remarks

The understanding of the phenomenon of tautomeric mutation in DNA is very exciting and important for molecular biologists. Nevertheless, it is turning out to be equally challenging for condensed matter physicists to construct appropriate models containing microscopic flavours to describe this phenomenon, which is predominantly of quantum ori-

gin and affects a long-range spatial ordering. In particular, the quantum models proposed and looking quite similar to models or Hamiltonians used to describe various phenomena and processes in condensed matter systems, are found to be very appropriate and extremely powerful in handling the problem of tautomeric mutation. These models have been remarkably successful in explaining the processes of both DNA mutation and compensation/repair in various living organisms, qualitatively as well as semi-quantitatively [1-3]. Besides, a unification between these different types of suggested models has been achieved quite satisfactorily by making use of principles of quantum physics and in a manner analogous to that used in treating various phenomena in condensed matter physics, as has been elaborated in this article.

Furthermore, many other diverse phenomena involving DNA and related to tautomeric mutation, such as denaturation and mutation induced by THz radiation can also be investigated theoretically by applying quantum mechanical formalisms and treatments to these proposed models, in particular the quantum spin model. These extended calculations and the comparison of the corresponding theoretical results with those from experiments performed on DNA extracted from various organisms, would definitely be very crucial to test the strength and the universality of our proposed quantum models further.

This whole endeavour is also greatly expected to throw new light and provide new directions on a meaningful and successful synthesis of molecular bio-physics with condensed matter physics in general and in relation to the problems of DNA in particular.

Acknowledgement

The author would like to express his deep and sincere gratitude to Professor Voislav Golo for his constant encouragement, for stimulating and clarifying discussions and for providing him with valuable information regarding many important references and literature.

References

- [1] *Chaudhury R* Tautomeric Mutation: A quantum spin modelling Europhys. Lett. 2007, **79**, 18005–18009.
- [2] *Golo V.L. and Volkov Yu.S.* Tunneling of protons and tautomeric transitions in base pairs of DNA, Int. Jour. of Mod. Phys. C 2003, **14** (1), 133–156.
- [3] *Golo V.L., Evdokimov Yu.M., Skuridin S.G. and Kats E.I.* Helical ordering of hydrogen bonds between pairs of DNA bases, Jour. of Experimental And Theoretical Physics 1999, **88** (3), 517–522; *Golo V.L. and Kats E.I.* DNA molecule as an elastic Heisenberg chain Jour. of Experimental and Theoretical Physics 1997, **84** (5), 1003–1009.
- [4] *Griffiths A.J.F., Gelbert W.M., Lewontin R.C. and Miller J.H.*, in “Modern Genetic Analysis: Integrating Genes and Genomes”, edited by Noe J. et al. (W.H. Freeman and Company, New York) 2002, Chapter 10, pp. 313–348; Chapter 2, pp. 22–31.

- [5] *Hoskinson A.M., Couch B.A., Zurickl B.M., Hinko K.A. and Caballero M.D.* Bridging physics and biology teaching through modeling, American Jour. of Physics 2014, **82** (5), 434–441; *Som A., Sahoo S., Mukhopadhyay I., Chakrabarti J. and Chaudhury R.* Scaling violations in coding DNA, Europhys. Lett. 2003, **62**, 271–277.
- [6] *Stinchcombe R.B.* Ising Model in a transverse field — basic theory, J. Phys. C 1973, **6** (15), 2459–2483.
- [7] *Huang K.*, “Statistical Mechanics” (Wiley Eastern Private Limited, New Delhi) 1963, Chapter 9, pp. 192–201.
- [8] *Pines D.*, “Elementary excitations in Solids” (Perseus Books, Massachusetts) 1999, Chapter 1, pp. 1–10; Chapter 3, pp. 105–106; *Nagaev E.L.*, “Physics of Magnetic Semiconductors” (MIR Publishers, Moscow) 1983, Chapter 1, pp. 21–25; Chapter 1, pp. 32–34; Chapter 2, pp. 66–76; *Abrikosov A.A., Gorkov L.P. and Dzyaloshinskii I.E.*, “Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics” (Dover Publications, INC, New York) 1975, Chapter 1, pp. 5–27.
- [9] *Lovesey S.W.*, “Theory of Neutron Scattering from Condensed Matter” (Oxford Science Publications, Oxford University Press, Oxford) 1986, Chapter 9, pp. 65–70.
- [10] *White R.M.*, “Quantum Theory of Magnetism — Magnetic Properties of Materials” (Springer-Verlag, Heidelberg) 2007, Chapter 8, pp. 237–248.
- [11] *Kittel C.*, “Quantum Theory of Solids” (John Wiley & Sons, USA) 1987, Chapter 4, pp. 49–63; Chapter 8, pp. 151–152; *Khomskii D.I.*, “Electronic phase transitions and the problem of mixed valence”, in “Quantum Theory of Solids”, edited by I.M. Lifshits (MIR Publishers, Moscow) 1982, Chapter 2, pp. 102–103.
- [12] *Peyrard M. and Bishop A.R.*, Statistical mechanics of a non-linear model for DNA denaturation, Phys. Rev. Lett. 1989, **62**, 2755–2758.
- [13] *Zhang Y., Zheng W., Liu J. and Chen Y.Z.*, Theory of DNA melting based on the Peyrard-Bishop model, Phys. Rev. E 1997, **56** (6), 7100–7116.
- [14] *Frohlich H.*, The extraordinary dielectric properties of biological materials and the action of enzymes, Proc. Nat. Acad. Sci. USA 1975, **72** (11), 4211–4215.
- [15] *Golo V.L.*, Three-Wave interaction between inter-strand modes of the DNA, JETP 2005, **101**, 372–379; *Alexandrov B.S., Gelev V., Bishop A.R., Usheva A. and Rasmussen K.O.* DNA breathing dynamics in the presence of a terahertz field, Phys. Lett. A 2010, **374**, 1214–1217.
- [16] *Demidova E.V., Goryachkovskaya T.N., Malup T.K., Bannikova S.V., Semenov A.I., N.A. Vinokurov N.A., Kolchanov N.A., Popik V.M. and Peltek S.E.*, Studying the non-thermal effects of terahertz radiation on E.coli/pKatG-gfp biosensor cells, Bioelectromagnetics (Wiley Periodicals) 2012, 1–7; *Crowe T.W., Globus T., Woolard D.L. and Hesler J.L.*, Terahertz sources and detectors and their application to biological sensing, Phil. Trans. R. Soc. Lond. A 2004, **362**, 365–377; *Woolard D.L., Koscica T., Rhodes D.L., Cui H.L., Pastore R.A., Jensen J.O., Jensen J.L., Loerop W.R., Jacobsen R.H., Mittleman D. and Nuss M.C.*, Millimeter wave-induced vibrational

modes in DNA as a possible alternative to animal tests to probe for carcinogenic mutations, *J. of Applied Toxicology* 1997, **17** (4), 243–246.

- [17] *Woolard D.L., Globus T.R., Gelmont B.L., Bykhovskaia M., Samuels A.C., Cook-meyer D., Hesler J.L., Crowe T.W., Jensen J.O., Jensen J.L. and Loerop W.R.*, Submillimeter-wave phonon modes in DNA macromolecules, *Phys. Rev. E* 2002, **65**, 051903-1–051903-11.
- [18] *McFadden J.*, “Quantum Evolution: Life in the Multiverse” (Flamingo Publishers, London) 2000, Chapter 3, pp. 49-66.

Информация и правила для авторов

Общие положения

Журнал «Наноструктуры. Математическая физика и моделирование» (сокращенно: НМФМ) публикуется с 2009 года и является периодическим научным изданием. Электронная версия журнала размещается на сайте <http://www.nano-journal.ru>. Основная цель издания: представление новых теоретических и вычислительных методов моделирования наноструктур и мягкой материи, общих подходов в исследовании мезосистем, а также ключевых экспериментальных результатов в данной области и связанных с этим проблем математической физики.

Журнал НМФМ имеет междисциплинарный характер и в силу этого несет определенную образовательную направленность, а не только узко научную. Работы, представляемые в журнал, должны содержать вводные сведения, которые обеспечат понимание постановок задач и восприятие результатов не только прямыми специалистами. Определения понятий, объяснение обозначений и терминов, оценки характерных параметров, теоретические предпосылки и идеи, используемые методы, и т.п., должны быть кратко объяснены в тексте статьи, имея в виду читателей, специализирующихся в иных направлениях. Должны быть описаны базовые математические модели и уравнения. Во Введении и в последующих разделах очерчивается стратегия и основные трудности, это увязывается с используемыми моделями. Структура статьи ориентируется на прояснение общей логики и методики исследования, содержит резюмирующие выводы. В тексте должны быть рассмотрены характерные примеры (хотя бы, методические), ясно иллюстрирующие предлагаемые алгоритмы.

Журнал публикует научные обзоры, исследовательские статьи и краткие научные сообщения, а также избранные аналитические и информационно-образовательные материалы, тексты докладов и циклов лекций, прочитанных в университетах, научных центрах, на школах-семинарах, конференциях, нигде ранее не публиковавшиеся и не принятые к публикации в других изданиях. Язык публикации в журнале НМФМ, как правило, русский. Работы, представляемые в журнал, не могут иметь научно-популярный или компилятивный характер. Все статьи рецензируются и могут быть отклонены редколлегией журнала. В случае принятия работы к печати ее авторы передают издателью журнала НМФМ право на разовую безвозмездную публикацию текста и его размещение в электронной версии на сайте журнала. Перевод опубликованных в журнале статей на другие языки может осуществляться только с разрешения и при участии авторов.

Порядок представления статей

- В редакцию изначально представляются:
 - файл статьи, файлы с иллюстрациями;
 - сопроводительное письмо, можно в электронной форме, содержащее сведения об объеме статьи и обо всех авторах (фамилии, имена, отчества, полные названия мест работы, почтовый адрес с индексом, номер контактного телефона с кодом города, электронный адрес автора, ответственного за переписку с редакцией); предпочтительно, чтобы это письмо было выполнено на бланке учреждения, в котором работает кто-то из авторов, было заверено печатью и содержало утверждение о возможности открытого опубликования статьи;
 - файл с переводом на английский язык названия статьи, фамилий и инициалов авторов, аннотации, ключевых слов.
- Авторские файлы могут быть присланы на электронный адрес: papers@nano-journal.ru; (резервный адрес в случаях затруднений с пересылкой: nano@miem.edu.ru) или переданы в редакцию на любом электронном носителе. Авторы получают из редакции подтверждение о получении их материалов.
- Телефон (факс) редакции: +7 (495) 916-8876. Адрес редакции: Москва 109028, Б. Трехсвятительский пер., 3/12, Московский институт электроники и математики (МИЭМ), комн. 449.

Общие требования к представляемым файлам

- Допускается использование текстовых редакторов WORD и LATEX. К рабочим файлам должна быть приложена их pdf-копия. В названии файлов используется латинский алфавит, пробелы заменяются знаком `_`. Шапка статьи содержит название, инициалы и фамилии авторов, место работы, электронный адрес, краткую аннотацию, ключевые слова. В аннотации не следует использовать формулы и ссылки на текст работы или список литературы; в конце она должна содержать индекс УДК (к английской версии аннотации можно добавить индексы зарубежных рубрикаторов).
- Объем кратких сообщений 4-8 страниц, исследовательских статей, как правило, до 20 страниц, а обзоров – более 20 страниц. Верхняя граница согласуется с редколлегией. При подсчете объема нужно ориентироваться на страницы формата А4, шрифт 12, знаков в строке 80, интервалов между строками 1.
- Авторы не должны злоупотреблять сокращениями, составленными из заглавных начальных букв терминов. Предпочтительней каждый раз использовать полное наименование объекта. Возможно использование только устоявшихся аббревиатур.

Требования к файлам Word

- Рекомендуемый шрифт – Times New Roman.
- Строки в пределах абзаца не должны разделяться символом возврата каретки (Enter).
- Нельзя использовать автоматическое создание сносков, автоматический перенос или автоматический запрет переносов, создание списков, автоматический отступ и т.п.
- Ссылки на список литературы даются цифрами в квадратных скобках: [1], [5,6,7], [1-9].
- Все без исключения формулы и обозначения размерности, даже состоящие из одной латинской буквы, и в тексте и вынесенные в отдельную строку, всегда набираются в формульном редакторе и никогда – в обычном текстовом редакторе.

- При создании таблицы рекомендуется использовать возможности Word или MS Excel. Таблицы, набранные вручную (с помощью большого числа пробелов), не принимаются.

Требования к иллюстрациям

- Иллюстрации представляются в отдельных файлах, черно-белыми. Они должны иметь разрешение не менее 600 dpi.
- Форматы файлов – TIFF, EPS, PSD, JPEG.

Требования к списку литературы

- Ф.И.О. авторов или редакторов выделяются курсивом.
- Для статей приводится название. Названия отделяются от выходных данных знаком //. Расположение выходных данных указано на образце ниже. Номер тома выделяется жирным шрифтом, номер выпуска дается в скобках. Указываются номера первой и последней страниц статьи, либо уникальный номер статьи и ее объем. Для книг желательно указывать их объем. Если известна ссылка на электронный архив или сайт, то ее желательно указать.

Фамилия И.О. Название статьи // Назв. журн., 2000, **1** (1), 1-6.

Family F.M. and Family F. Title of the paper // Name of the Journal, 2006, **73**, 165313, 9 pp.

Фамилия И.О., Фамилия И.О. Название книги // Наука, С.-П., 1999, 176 стр.

Family F.M. Title of the paper // In book: *Family F.M. (et al. eds)*, Title of the collection, Publisher, Boston, 2005, 9-24.

Family F.M. (ed.), Title of the collection // Publisher, N.Y., 2005, 324 pp.

Фамилия И.О. Название доклада // Доклад на конференции «Название конференции (место и дата проведения)»; ссылка на электронный ресурс.

Наноструктуры. Математическая физика и моделирование

Журнал зарегистрирован

в Министерстве РФ по делам печати,
телерадиовещания и средств массовых коммуникаций.

Свидетельство о регистрации

ПИ № ФС77-34934 от 29 декабря 2008 г.

Учредители

Московский государственный институт электроники и математики (МИЭМ),

ФГУ ГНИИ ИТТ «Информика»,

Европейский центр по качеству

Председатель Совета Учредителей

Тихонов А.Н.

Издатель

Европейский центр по качеству

ПОДПИСКА НА ЖУРНАЛ НМФМ

На первое полугодие 2015 г. подписаться на журнал можно в любом отделении связи по каталогу

Агентства Роспечать «Журналы России»,

рубрика «Физико-математические науки», подписной индекс 70017.

Редакция предлагает подписчикам возможность безвозмездно получить подборку прошлых
выпусков журнала. Пришлите на электронный адрес nano@miem.edu.ru (или на почтовый адрес:

109028, Москва, Б. Трехсвятительский пер., 3, к. 452, редакция журнала НМФМ)

копию подписной квитанции, а также адрес для отсылки выпусков.