ТУННЕЛЬНОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ СПЕКТРА И БИЛОКАЛИЗАЦИЯ СОБСТВЕННЫХ ФУНКЦИЙ В НЕСИММЕТРИЧНОЙ ДВОЙНОЙ ЯМЕ

Е.В. Выборный*

Московский институт электроники и математики при Национальном исследовательском университете «Высшая школа экономики»

evgeniy.bora@gmail.com

Поступила 12.09.2012

Рассматривается одномерное стационарное уравнение Шредингера с гладким потенциалом, имеющим вид двойной ямы. Получен критерий наличия двойной локализации волновых функций, экспоненциального расщепления энергетических уровней, туннельной транспортации частицы в несимметричном потенциале. Получены асимптотические формулы для величины расщепления энергий, обобщающие известные формулы для случая зеркально симметричного потенциала. Рассмотрен случай высоких энергетических уровней и случай энергий, близких к положению равновесия потенциала. Приведен пример туннельной транспортации в несимметричной двойной яме.

УДК 517.927.2:530.145

1. Введение

Квантовое туннелирование представляет интерес для многих областей современной физики [1, 2]. Одной из базовых моделей туннелирования является одномерное движение в потенциальном поле, имеющем вид двойной ямы, в общем случае – несимметричной. Задача о аналитическом изучении спектра и волновых функций в двуямном потенциале имеет богатую историю, первые результаты, носящие качественный характер, содержались еще в работе F. Hund [5] 1927 года.

Мы рассматриваем квазиклассическую асимптотику волновых функций стационарного одномерного уравнения Шредингера

*Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант 12-01-00627-а.

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

где $\hbar$ – это малый параметр квазиклассического приближения.

Предполагается, что гладкий вещественный потенциал $V(x)$ имеет вид двойной ямы (см. рис. 1). То есть классическая область движения частицы ($V(x) < E$) состоит из двух конечных интервалов. Между двумя ямами находится потенциальный барьер, причем, энергия E не близка к вершине потенциального барьера. Пусть спектр энергий является дискретным вблизи E.

Известно, что в случае зеркально симметричного потенциала этот спектр состоит из пар экспоненциально близких точек, а соответствующие собственные функции являются симметричными и антисимметричными (см. [3]). Это приводит к эффекту туннельной транспортации, когда частица, находящаяся в начальный момент в одной яме, через некоторый промежуток времени может быть обнаружена в другой яме с вероятностью, близкой к 1.

В данной работе нас интереует случай несимметричного потенциала V. Несимметричные потенциалы интересны с физической точки зрения (см. [1, 6]). Примеры численного исследования двойной локализации собственных функций в несимметричном случае имеются в работах [1, 4, 12].

Из рассмотрения численно решенных примеров становится ясно, что спектр оператора с двуямным потенциалом с некоторой точностью состоит из точек E_l и E_r, соответствующих спектрам операторов Шреденгера в левой и правой потенциальной яме в отдельности. Пусть $\psi_{l,r}$ — волновые функции, локализованные в левой и правой потенциальной яме соответственно. Если E_l и E_r оказываются близки, то в спектре оператора с двуямным потенциалом присутствует пара близких точек, происходит квазивырождение энергетического уровня. В этом случае соответствующие собственные функции имеют вид линейных комбинаций ψ_l и ψ_r.

Основные вопросы, возникающие при исследовании несимметричного потенциала такие: как строго определить $E_{l,r}$ и $\psi_{l,r}$; с какой точностью $E_{l,r}$ принадлежат спектру оператора с двуямным потенциалом и какие именно линейные комбинации ψ_l и ψ_r близки к собственным функциям оператора с двуямным потенциалом в случае квазивырождения энергетического уровня. Одна из основных задач – получение асимптотики величины расщепления Δ для квазивырожденного уровня.

При численном и аналитическом исследовании транспортации в двуямном потенциале большое значение имеет точность ε используемых приближений. Поскольку величина расщепления Δ может быть экспоненциально малой по параметру $\hbar$, то для получения достоверных результатов необходимо, чтобы ε была много меньше, чем Δ, а следовательно, экспоненциально малой. Стандартный метод построения ВКБ приближенных волновых функций, дающих степенную асимптотику по квазиклассическому параметру, не применим на прямую для ответа на эти вопросы.

Один из методов, при помощи которого можно найти величину расщепления и определить вид собственных функций в случае квазивырождения, основан на рассмотрении сужения оператора $\hat{H}$ на подпространство, образованное двумя векторами ψ_l и ψ_r, и последующей диагонализации $\hat{H}$. Данный метод, называемый «двухуровневая апроксимация», широко используется в задачах квантовой механики (см. ссылки в [2]). В данном методе производится вычисление матричных элементов $\langle \hat{H}\psi_i, \psi_j \rangle$ для $i, j = l, r$; искомая величина расщепления находится как расстояние между собствен-

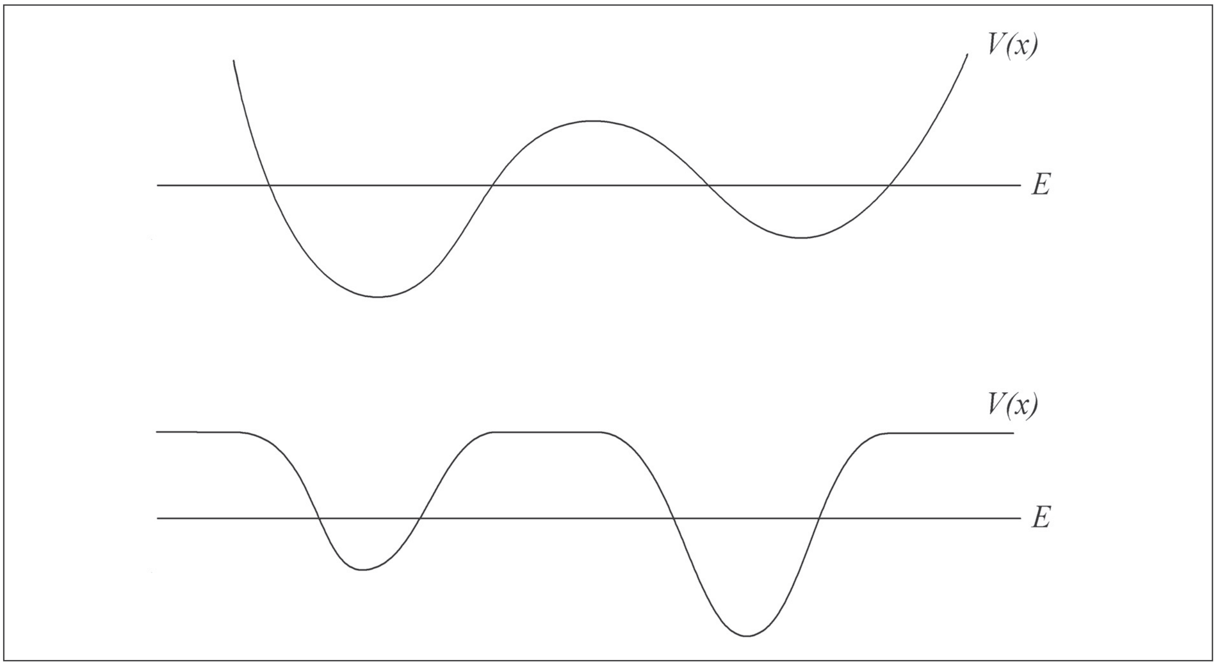

Рис. 1

ными значениями данной матрицы, а собственные вектора данной матрицы дают приближение для коэффицентов линейного разложения собственных векторов оператора $\hat{H}$ по системе ψ_i. Поскольку подпространство, на которое происходит сужение, не является инвариантным, то данный метод дает лишь приближенный результат, точность которого сильно зависит от того, насколько близко данное подпространство к инвариантному, то есть от выбора ψ_l и ψ_r. Общее математическое обоснование данного метода содержится в статье [7].

Правильный выбор функций ψ_l, ψ_r имеет решающее значение; например, выбор этих функций, использованный в [11], как можно показать, приводит к неверному результату. В данной работе мы даем корректное определение $\psi_{l,r}$, позволяющее применить метод двухуровневой апроксимации. Причем наш выбор $E_{l,r}$ и $\psi_{l,r}$. применим как для высоких, так и для низких энергетических уровней для произвольного гладкого потенциала, имеющего вид двойной ямы.

Оказывается, для величины расщепления справедлива асимптотическая формула

$$\Delta = \sqrt{(E_r - E_l)^2 + \delta^2}\,[1 + O(\hbar)]\,,$$

где δ – минимально возможное расщепление, возникающее в случае совпадения уровней E_l и E_r. Величина δ может быть вычислена по обобщенной формуле Ландау-Лифшица:

$$\delta = 2\hbar^2 \left[\psi_l \frac{d\psi_r}{dx} - \psi_r \frac{d\psi_l}{dx}\right]_{x=c}.$$

Для высоких энергетических уровней

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

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

Собственные функции для пары квазивырожденных точек спектра оператора $\hat{H}$ в главном имеют вид линейных комбинаций ψ_l и ψ_r. Построение асимптотики волновой функции сводится к определению вероятностей p_l и p_r обнаружить частицу в левой и правой потенциальной яме соответственно. Из соображений ортогональности и нормированности вытекает, что произведение p_lp_r одинаково для обеих собственных функций, отвечающих паре квазивырожденных точек спектра. Зная p_lp_r и учитывая тождество $p_l + p_r = 1$, можно построить асимптотику волновых функций. В работе показано, что существует асимптотическая формула связи между p_lp_r и величиной расщепления Δ

$$\Delta = \frac{\delta}{2\sqrt{p_lp_r}}\left[1 + O(\hbar)\right].$$

Для высоких энергетических уровней полученный результат согласован с результатом, полученным в [3] при наличии симметрии потенциала; в случае отсутствия симметрии полученный нами результат является обобщением результата из [3].

Для низких энергетических уровней амплитуда расщепления выражена в терминах решения системы в вариациях для инстантона. Полученный нами результат согласуется с результатом работы [10] в одномерном симметричном случае.

Автор благодарен М. В. Карасеву за постановку задачи, плодотворные обсуждения и помощь в подготовке статьи.

2. Величина расщепления и амплитуда туннелирования

В этом разделе мы рассмотрим случай высоких энергетических уровней. Предположим, что энергия E больше, чем минимумы двуямного потенциала и меньше, чем вершина потенциального барьера. Предполагается дискретность спектра вблизи заданной энергии E.

Пусть на интервале (x_l, x_r) находится потенциальный барьер ($V(x) > E, x \in (x_l, x_r)$), точки $x_{l,r}$ называются точками поворота. Пусть $p(x) = \sqrt{E - V(x)}$.

Определим точку c из равенства

$$\int_{x_l}^{c} |p(x)|dx = \int_{c}^{x_r} |p(x)|dx.$$

Точка c является центром потенциального барьера с точки зрения инстантонного действия. Пусть точки a и b выбраны так, что

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

Введем два гладких потенциала $V_{l,r}$, удовлетворяющие следующим двум условиям.

1. Потенциал $V_l(x) = V(x)$ при $x < a$, а $V_r(x) = V(x)$ при $x > b$.
2. Потенциал $V_l(x) > E + e$ при $x > a$, а $V_r(x) > E + e$ при $x < b$, для некоторого $e > 0$.

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

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

Потенциалы $V_{l,r}$ являются одноямными для энергии E, поскольку классическая область движения частицы в потенциале $V_{l,r}(x)$ представляет собой один интервал.

Следовательно, для спектров операторов $\hat{H}_i$ справедливы хорошо известные результаты квазиклассического анализа (см. [3], [8]), перечисленные ниже.

I Вблизи энергии E точки спектра $\hat{H}_i$ являются дискретными и невырожденными. 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. Пусть ψ_i – соответствующая нормированная собственная функция. Тогда справедливы, равномерно по $x \in [b, a]$, асимптотические формулы

$$\psi_l(x) = \frac{C_l}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{x_l}^{x} |p| dx\right) [1 + O(\hbar)],$$

$$\psi_r(x) = \frac{C_r}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{x_r} |p| dx\right) [1 + O(\hbar)],$$

и эту асимптотику можно дифференцировать.

III Константы нормировки $C_{l,r}$ можно выбрать следующим образом:

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

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 $\hat{H}$. Несложно показать, 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_i. В случае квазивыраждения 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. Пусть ψ собственная функция оператора $\hat{H}$. Вероятности $p_{l,r}(\hbar)$ обнаружить частицу в левой и правой потенциальной яме могут быть посчитаны 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 отношение вероятностей $p_r(\hbar)$ к $p_l(\hbar)$.

Определим амплитуду туннелирования μ

$$\mu = \lim_{\hbar \to 0} \sqrt{\frac{p_r(\hbar)}{p_l(\hbar)}}$$

Будем говорить, что волновая функция ψ имеет двойную локализацию, если этот предел существует и не равен 0. Тогда вероятности $p_{l,r}(\hbar)$ обнаружить частицу как в

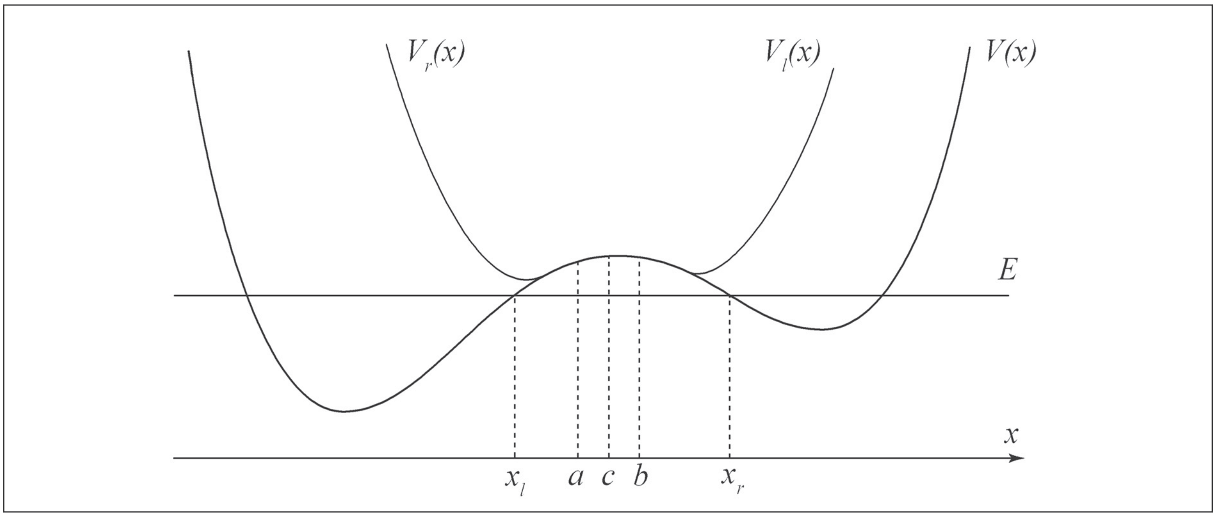

Рис. 2

левой, так и в правой потенциальной яме обе отличны от нуля и для них справедливы асимптотические формулы

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

$$p_r(\hbar) = \frac{1}{\mu^2(1+\mu^2)}\left[1 + O(\hbar)\right].$$

От значения величины μ во многом зависит динамика частицы в двуямном потенциале, как будет рассмотрено ниже в разделе 4.

Определим

$$\delta(\hbar) = 4\hbar C_1 C_2 \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} |p| dx\right).$$

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

Следующая теорема является критерием резонансного туннелирования и устанавливает связь между расщеплением энергетических уровней Δ, амплитудой туннелирования μ и расстоянием между E_l и E_r.

Теорема 2.1.
Для фиксированного положительного числа λ следующие три условия эквивалентны:

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

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

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

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

3. Для расстояния между точками E_i верна асимптотическая формула

$$|E_2 - E_1| = \lambda\delta(\hbar)\left[1 + O(\hbar)\right],$$

при $\lambda > 0$, и $|E_2 - E_1|/\delta(\hbar) = O(\hbar)$ при $\lambda = 0$.

Приведем ряд замечаний.

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

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

В общем случае число λ, как и μ, количественно характеризует двойную локализацию собственных функций. Если $\lambda = 0$, то $\mu = 1$, и имеет место туннельная транспортация. При $\lambda = 0$ для величины расщепления справедлива асимптотическая формула

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

Величина $\delta(\hbar)$ может быть посчитана по обобщенной формуле Ландау-Лифшица

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

это следует непосредственно из определения δ и асимптотики функций $\psi_{l,r}(x)$.

Исключая константу λ из условий 1 и 2 теоремы 2.1, можно найти уравнение связи между расщеплением энергетических уровней Δ и амплитудой туннелирования μ:

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

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

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

Из последних формул хорошо видно, как с ростом расщепления Δ быстро исчезает двойная локализация собственных функций, то есть одна из вероятностей $p_{l,r}$ стремится к 0. Минимальное расщепление соответствует максимальной билокализации и $p_l = p_r = 1/2$. При фиксированном Δ существует два решения для μ, которые соответствуют двум собственным функциям, для которых и посчитано расщепление энергетических уровней Δ.

Также отметим, что данная теорема может применяться для анализа туннелирования и в случае зависимости потенциала от $\hbar$. Тогда необходимо следить за справедливостью пунктов I, II, и пересчитывать величину δ. Такая зависимость может возникнуть неявно при зависимости потенциала от внешнего параметра.

3. Случай энергии, близкой к минимуму потенциала

Аналог теоремы 2.1 справедлив для нижних энергетических уровней. Необходимо только пересчитать величины C_i и соответственно изменить δ. Следует разделять случаи, когда оба локальных минимума потенциала $V(x)$ соответствуют одной энергии, и когда значения $V(x)$ в локальных минимумах не совпадают. Для примера рассмотрим случай совпадения значений $V(x)$ в точках локальных минимумов.

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

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

Тогда для величины δ, при совпадении n-го уровня левой ямы с m-ым уровнем правой ямы, справедлива асимптотическая формула

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

где

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

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

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

Выразим пределы J_1 и J_2 через асимптотику решения системы в вариациях. Подобный метод был применен в работе [9].

Рассмотрим гамильтонову систему, определяющую инстантон:

$$\begin{cases} \dot{q} = 2p, \\ \dot{p} = V'(q), \end{cases}$$

с граничными условиями $q(-\infty) = \xi_1, q(0) = c, q(\infty) = \xi_2$. Инстантон можно задать неявной формулой

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

Рассмотрим систему в вариациях:

$$\begin{cases} \ddot{z} = 2V''(q(t))z; \\ z(\pm\infty) = 0; \\ z(0) = 1. \end{cases}$$

Ее решение имеет вид

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

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

$$z(t) \sim (V(c))^{-1/2}\omega_1(q - \xi_1).$$

Из определения J_1 следует

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

$$z(t) \sim J_1 \frac{\sqrt{\omega_1}}{\sqrt{V(c)}} e^{2\omega_1 t}.$$

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

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

Величины $J_{1,2}$ можно определять из полученных равенств, вычислив асимптотику решения задачи в вариациях $z(t)$ другими методами.

4. Динамика частицы в случае резонансного туннелирования

Рассмотрим оператор

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

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

Рассмотрим динамику частицы в двуямном потенциале при энергии, близкой к паре квазивыражденных стационарных энергетических уровней. Пусть справедливы условия теоремы 2.1, два уровня $E_{1,2}$ находятся экспоненциально близко друг к другу, а соответствующие собственные функции $\psi_{1,2}$ билокализованны.

Учитывая условие ортогональность для ψ_i, получаем:

$$\psi_1 = u_l + \mu u_r + O(\hbar),$$

$$\psi_2 = \mu u_l - u_r + O(\hbar).$$

Функции u_l и u_r можно выбрать одинакого для ψ_1 и ψ_2, поскольку E_1 и E_2 экспоненциально близки.

Рассмотрим задачу Коши

$$\begin{cases} i\hbar \dfrac{\partial u}{\partial t} = \hat{H} u \\ u\big|_{t=0} = \psi_1 + \mu \psi_2 \end{cases}$$

Поскольку

$$\psi_1 + \mu \psi_2 = (1 + \mu^2) u_l + O(\hbar),$$

то начальные данные сосредоточены в левой потенциальной яме. Точное решение данной задачи Коши имеет вид

$$u = e^{-\frac{iE_1}{\hbar} t} \psi_1 + \mu e^{-\frac{iE_2}{\hbar} t} \psi_2$$

Подставляя выражение для ψ_1 и ψ_2 с точностью $O(\hbar)$, получаем

$$u = e^{-\frac{iE_1}{\hbar} t} \left(u_l + \mu u_r + e^{-\frac{i}{\hbar}(E_2 - E_1)t} \mu(\mu u_l - u_r) \right) =$$

$$= e^{-\frac{iE_1}{\hbar} t} \left(\left(\mu^2 e^{-\frac{i}{\hbar}(E_2 - E_1)t} + 1 \right) u_l + \mu \left(1 - e^{-\frac{i}{\hbar}(E_2 - E_1)t} \right) u_r \right).$$

Полная туннельная транспортация означает, что есть момент времени T такой, что решение сосредоточено в иной яме, чем яма, в которой сосредоточено начальное условие. Следовательно, транспортация имеет место, если коэффицент перед u_l обращается в 0. Учитывая, что μ — положительное число, получаем

$$\mu = 1.$$

При положительных значениях $\mu \neq 1$ возникает только частичная транспортация.

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

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

Используя формулу для расщепления $\Delta = E_2 - E_1$, при $\mu = 1$ можно найти время транспортации

$$T = \pi\hbar/\delta(\hbar)$$

Заметим, что в случае изолированной с точностью $O(\hbar^2)$ (или некоторой степенной точностью) точки спектра, собственная функция не имеет двойной локализации и транспортация не происходит. В случае наличия двух близких точек спектра транспортация возможна и определяется значением μ.

5. Примеры несимметричной транспортации

Полином четвертого порядка

Классическим примером двуямного потенциала является полином четвертого порядка. Рассмотрим оператор $\hat{H}$ с потенциалом $V(x)$:

$$V(x, r) = (x-1)^2(x+1)^2 + rx,$$

где r — параметр, характеризующий асимметрию. Будем исследовать спектр $\hat{H}$ вблизи E, где $0 < E < 1$. Параметр r меняется в пределах $[0, r_0]$, где $r_0 = r_0(E)$ выбрано так, что уравнение $V(x, r_0) = E$ имеет 4 простых корня. Следовательно, рассматривается случай высоких энергетических уровней.

Как и ранее в разделе 2, введем операторы $\hat{H}_i$, константы $c = c(r)$ и $\delta = \delta(r, \hbar)$. Пусть $E_n^{(i)}$ — точки спектра оператора $\hat{H}, i = 1, 2$. Квантовые числа $n = n(\hbar)$ выбираются так, что $E_n^{(i)}$ близки к E. При фиксированном малом $\hbar$ $E_n^{(i)}$ и соответсвующие им собственные функции непрерывно зависят от r.

При $r = 0$ оператор $\hat{H}_1$ отличается от $\hat{H}_2$ заменой x на $-x$. Следовательно, $E_n^{(1)} = E_n^{(2)}$. Из теоремы 2.1 следует билокализация собственных функций. При увеличении r $E_n^{(1)}$ будет убывать, а $E_n^{(2)}$ — возрастать с точностью $O(\hbar^2)$. Это следует из того, что они удовлетворяют правилу дискретезации Бора-Зоммерфелда. Из непрерывной зависимости от r следует существование r_1 такого, что:

$$E_{n+1}^{(1)} = E_n^{(2)}, \ r = r_1.$$

При $r = r_1$ собственные функции оператора $\hat{H}$, отвечающие собственным значениям с номерами $2n$ и $2n+1$ билокализованны, имеет место транспортация. Данный пример можно рассмотреть и для случая низких энергий.

Две финитные потенциальные ямы

Рассмотрим потенциал $V_1(x)$ такой, что:

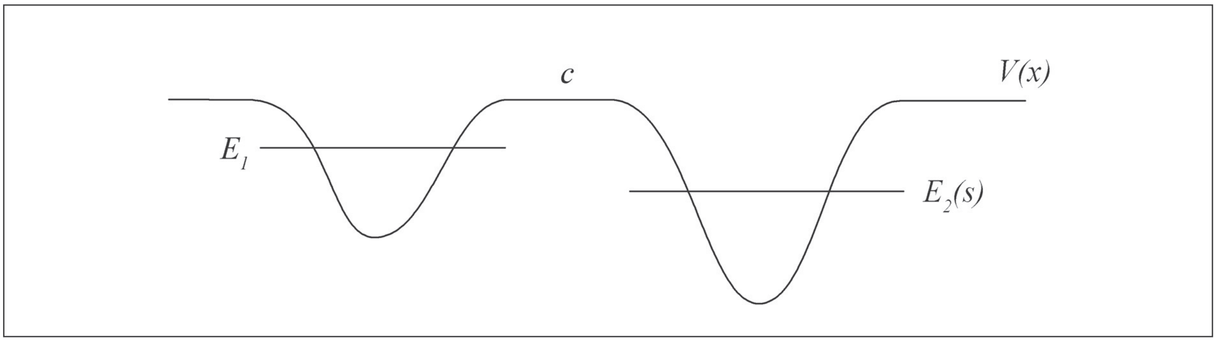

Рис. 3

$$V_1(x) = 0, \ \forall x > \omega_1,$$

и $V_1(x)$ является одноямным для отрицательных энергий, близких к E. Пусть $V_2(x)$ — отрицательная гладкая финитная функция:

$$V_2(x) = 0, \ \forall x \in [\omega_2, \omega_3].$$

Предположим, что для энергий, близких к E, функция $V_2(x)$ является одноямным потенциалом, то есть уравнение $V_2(x) = E$ имеет два простых корня.

Определим операторы:

$$\hat{H}_1 = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} + V_1(x),$$

$$\hat{H}_2 = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} + V_2(x),$$

$$\hat{H}_3 = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} + s^2 V_2(x) \left(\frac{x-l}{s}\right),$$

$$\hat{H} = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} + V_1(x) + s^2 V_2(x) \left(\frac{x-l}{s}\right).$$

Пусть $E_{1,2}$ близки к E и принадлежат спектрам операторов $\hat{H}_{1,2}$ соответственно. Найдем связь между точками спектра оператора $\hat{H}_2$ и $\hat{H}_3$.

В уравнении

$$-\hbar^2 \frac{d^2\psi}{dx^2} + s^2 V_2 \left(\frac{x-l}{s}\right) = \lambda\psi$$

сделаем замену:

$$y = \frac{x-l}{s}.$$

Получаем:

$$-\hbar^2 \frac{d^2\psi}{dy^2} + V_2(y)\psi = s^{-2}\lambda\psi.$$

Следовательно, $s^{-2}E_2$ принадлежит спектру $\hat{H}_3$. Определим s из равенства:

$$E_1 = s^{-2}E_2.$$

Выберем l так, что $w_1 < w_2 + l$. Можно определить точку $c(l)$ как в параграфе 2, при достаточно больших l имеем:

$$w_1 < c(l) < w_2 + l.$$

Следовательно, в качестве двух одноямных операторов, фигурирующих в теореме 2.1, можно выбрать $\hat{H}_1$ и $\hat{H}_3$. Из теоремы 2.1, следует, что у оператора $\hat{H}$ имеется пара экспоненциально близких точек спектра, а также имеет место транспортация.

Литература

1. Razavy M. Quantum theory of tunneling // World Scientific 2003.
2. Ankerhold J. Quantum Tunneling in Complex Systems. The Semiclassical Approach // Springer-Verlag 2007.
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Курс теоретической физики в 10 томах, Т.3 Квантовая механика (нерелятивистская теория) // Физматлит 2002.
4. Славянов С.Ю., Лай В. Специальные функции: единая теория, основанная на анализе особенностей // СПб.: Невский Диалект, 2002.
5. Hund F. On the Interpretation of Molecular Spectra // Z. Phys. 40, 742 (1927).
6. Gangopadhyay A., Dzero M., Galitski V. Exact solution for quantum dynamics of a periodically driven two-level system// Phys. Rev. B 82, 024303 (2010).
7. Панкратова Т.Ф. Квазимоды и экспоненциальное расщепление собственных значений // Сб. Проблемы математической физики, т. 11 (дифференциальные уравнения и теория рассеяния), стр. 167-177, изд-во Ленинградского ун-та, Л., 1986.
8. Федорюк М.В. Асимптотические методы для линейных обыкновенных дифференциальных уравнений // М. Наука, 1977.
9. Доброхотов С.Ю., Колокольцов В.Н., Маслов В.П. Расщепление нижних энергетических уровней уравнения Шредингера и асимптотика фундаментального решения уравнения $hu_t = h^2 Au/2 - V(x)u$ // ТМФ, 87:3 (1991), стр. 323-375.
10. Доброхотов С.Ю., Колокольцов В.Н. Об амплитуде расщепления нижних энергетических уровней оператора Шредингера с двумя симметричными ямами // ТМФ, 94:3 (1993), стр. 426-434.
11. Song D.-Y. Tunneling and energy splitting in an asymmetric double-well potential // Ann. Phys. 323, 2991 (2008).
12. Nieto M.M., Gutschick V.P., Bender C.M., Cooper F. and Strottman D. Resonances in quantum mechanical tunneling // Phys. Lett. B 163 (1985) 336.

TUNNEL SPLITTING OF SPECTRUM AND BILOCALIZATION OF WAVE FUNCTIONS IN ASYMMETRIC DOUBLE-WELL

E.V. Vybornyi

Moscow Institute for Electronics and Mathematics
at National Research University Higher School of Economics

evgeniy.bora@gmail.comc

Received 12.09.2012

The one-dimensional stationary Schrödinger equation with smooth double-well potential is considered. We obtained a necessary and sufficient conditions for bilocalization of the wave functions, as well as for exponentially small energy splitting and forth-back tunneling of the particle in asymmetric double-well potential. We obtained the asymptotics of the energy splitting which is a generalization of the known result for the symmetric potential. The case of high energy levels and the case of energies close to the equilibrium points are considered. We describe an example of the forth-back tunneling in an asymmetric double-well.