О ТУННЕЛЬНОМ ВОЗМУЩЕНИИ ДИСКРЕТНОГО СПЕКТРА

Е.В. Выборный

Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

evgeniy.bora@gmail.com

Поступила 17.11.2015

Рассматривается задача о квазиклассической асимптотике смещения дискретного спектра одномерного оператора Шредингера при деформации потенциала в классически запрещенной области. Поскольку подобная деформация потенциала влияет на квантовую частицу только за счет туннельных эффектов, то величина смещения энергетических уровней оказывается экспоненциально малой. В работе получены асимптотические квазиклассические формулы для величины смещения энергий для различных деформаций потенциала.

УДК 517.927.25:530.145

1. Введение

В работе рассматривается одномерное стационарное уравнение Шредингера:

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

где $\hbar>0$ – малый параметр квазиклассического приближения. Обозначим через $\hat{H}_0$ соответствующий оператор:

$$\hat{H}_0=-\frac{\hbar^2}{2}\frac{d^2}{dx^2}+V(x).$$

Рассмотрим не весь спектр оператора $\hat{H}_0$, а только точки в некоторой окрестности фиксированного энергетического уровня. Предположим, что для рассматриваемых энергий E спектр оператора $\hat{H}_0$ является дискретным, а исходный потенциал является одноямным, то есть уравнение $V(x)=E$ имеет два простых корня $x_1 < x_2$ и $V(x) < E$ при $x \in (x_1, x_2)$.

Для упрощения изложения, в дальнейшем предполагается, что потенциал $V(x)$ является гладкой функцией, хотя большинство результатов остаются справедливыми и для случая кусочно-гладких потенциалов.

Пусть к исходному потенциалу $V(x)$ добавлено финитное возмущение $f(x)$, которое сосредоточено вне области движения классической частицы в потенциале $V(x)$. Соответствующий оператор Шредингера имеет вид:

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

Для определенности будем считать, что деформация потенциала локализована справа от потенциальной ямы и $\operatorname{supp} f = [a,b]$, где $x_2 < a$. Функции $f(x)$ предполагается непрерывной, быть может, за исключением точки $x = a$, в которой допускается наличие скачка. Далее будет показано, что значение имеет лишь характер поведения функции $f(x)$ в малой окрестности точки $x = a$.

Мы не предполагаем малости возмущения $f(x)$, но будем считать, что подобная деформация потенциала $V(x)$ не создала дополнительной потенциальной ямы, то есть $V(x) + f(x) > E$ при $x \in [a,b]$ для всех рассматриваемых энергий E.

Рассмотрим фиксированный уровень E_0 дискретного спектра оператора $\hat{H}_0$. Очевидно, в спектре оператора $\hat{H}$ присутствует энергетический уровень E_1, который соответствует уровню E_0 и разность между E_0, и E_1 экспоненциально мала при $\hbar \to 0$. Задачу построения асимптотических формул для разности $E_1 - E_0$ называют задачей о туннельном возмущении спектра. Подробный обзор результатов, связанных с данной задачей, представлен, например, в работе [1].

Изучение экспоненциально малых поправок к энергетическим уровням дискретного спектра особенно интересно в случае, когда рассматриваемый одноямный потенциал $V(x)$ является частью большей системы, в которой присутствует туннельный резонанс. Тогда экспоненциально малые смещения энергетических уровней в одной потенциальной яме могут оказать существенное влияние на поведение системы в целом.

Задача о туннельном возмущении впервые была рассмотрена в знаменитой работе [2] в связи с задачей о разрушении туннельного резонанса в симметричном двуямном потенциале при деформации одной из сторон потенциального барьера, – так называемый эффект «блоха на слоне» (название предложено в работе [3]). В дальнейшем эффект локализации состояний при туннельном возмущении в симметричной двойной яме рассматривался в работах [3,4], где было построено многомерное обобщение результатов работы [2].

В работе [6] эта модель была применена для описания туннелирования и локализации состояний оптических изомеров молекул. Задача о туннельном возмущении также возникает при описании эффектов андерсоновской локализации состояний. В этом случае рассматривают многоямный потенциал, который состоит из идентичных потенциальных ям, а деформации подвергается один из потенциальных барьеров [7].

Таким образом, задача о туннельном возмущении дискретного спектра оператора Шредингера при деформации потенциала в области барьера представляет значительный интерес для исследования ряда важных квантово-механических моделей, включающих резонансное туннелирование.

С другой стороны, задача о туннельном возмущении принципиально важна для развития математических методов квазиклассического приближения, поскольку в этом случае стандартные методы теории возмущений и стандартные методы построения квазиклассической асимптотики спектра не дают удовлетворительного результата. Различные подходы к решению этой проблемы были представлены в работах [5,8,9].

В работе [2] была получена базовая асимптотическая оценка:

$$E_1 - E_0 = \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\big(S(a) + o(1)\big)\right) \qquad (\hbar \to 0), \tag{1}$$

где $S(a) = \int_{x_2}^{a} \sqrt{2\big(V(x) - E\big)}\, dx$ – туннельное действие от точки поворота x_2 до носителя деформации потенциала. Эта оценка позволяет найти показатель экспоненты, который зависит только от расположения носителя функции $f(x)$, но не дает представления об асимптотическом поведении величины смещения энергетических уровней $E_1 - E_0$ и не позволяет выявить зависимость этой величины от вида функции $f(x)$.

Задача о туннельном возмущении дискретного спектра в случае одноямного потенциала рассматривалась в работе [8] в качестве вспомогательной задачи для построения описания туннельного резонанса в несимметричном двуямном потенциале. В работе [8] доказана асимптотическая формула

$$E_1 - E_0 = \langle f\psi_0, \psi_0\rangle\big(1 + o(1)\big) \qquad (\hbar \to 0), \tag{2}$$

где $\psi_0(x)$ – волновая функция стационарного состояния невозмущенной системы, соответствующая энергетическому уровню E_0. Оценка (2) доказана в предположении знакопостоянства и непрерывности функции $f(x)$ в некоторой фиксированной окрестности точки a. Подставляя ВКБ асимптотику для функции $\psi_0(x)$ в формулу (2), можно легко получить оценку (1).

В данной работе проведено более детальное исследование задачи о туннельном возмущении. Оценка погрешности в формуле (2) улучшена для дифференцируемой функции $f(x)$. Для ряда случаев, когда известно асимптотическое поведение функции $f(x)$ в окрестности точки a, получены явные асимптотические формулы, удобные для приложений.

С точки зрения приложений в наноэлектронике большой интерес представляют также модели с кусочно-гладким потенциалом. Задача о туннельном возмущении в случае, когда при деформации потенциала $V(x)$ в точке a возникает конечный скачок потенциальной энергии, была рассмотрена в работе [10]. В этом случае функция $f(x)$ имеет вид $f(x) = \gamma\,\theta(x-a)w(x)$, где $\theta(x)$ – функция Хэвисайда, γ – величина скачка, а $w(x)$ – непрерывная функция такая, что $w(a) = 1$. Подобная задача может служить, например, моделью ситуации, когда $V(x)$ – гладкий внешний электрический потенциал, а функция $f(x)$ моделирует неоднородную среду, состоящую из двух материалов, соединенных в точке a.

В работе [10] была предложена формула для величины смещения энергетических уровней в случае малого скачка γ. В нашей работе представлено обобщение и строгое доказательство этой формулы, а также показано, что линейное приближении (2) сохраняет силу в случае произвольного малого скачка γ, то есть, если $\gamma \to 0$ $(\gamma \neq 0)$ при $\hbar \to 0$, вне зависимости от соотношения между γ и $\hbar$.

2. Общие оценки туннельного возмущения

Результаты настоящей работы во многом опираются на методы, представленные в работах [1,8], при помощи которых была доказана оценка (2). В данном разделе представлено подробное изложение этих идей. Строгое доказательство оценки (2) разбито на три этапа (теорема 1, лемма и теорема 2), что позволило аккуратно разобрать ряд частных случаев, в которых оценка (2) может быть улучшена, а также случай малого ступенчатого разрыва.

Заметим, что задача о туннельном возмущении спектра не может быть решена прямым применением методов операторной теории возмущений, поскольку величина возмущения f, то есть разность между операторами $\hat{H}$ и $\hat{H}_0$, не предполагается малой, а малость смещения энергетического уровня E_0 связана с экспоненциальным убыванием волновой функции ψ_0 на носителе функции f. Оказывается, что данную задачу, все же, можно свести к задаче теории возмущений, но вместо исходного оператора $\hat{H}_0$ необходимо рассматривать специальный, искусственно построенный оператор.

Теорема 1

Справедлива асимптотическая оценка:

$$E_1 - E_0 = \left\langle f\psi_0, \psi_0 \right\rangle + O\left(\left\langle f\psi_0, f\psi_0 \right\rangle\right) \qquad (\hbar \to 0). \tag{3}$$

Доказательство

Пусть Π – оператор ортогонального проектирования на вектор ψ_0, а $\Pi' = 1 - \Pi$ проектор на дополнительное подпространство.

Рассмотрим пару операторов:

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

Операторы A и B, очевидно, являются самосопряженными. Справедливы равенства:

$$A + B = \hat{H},$$
$$A\psi_0 = E_0\psi_0,$$
$$B\psi_0 = f\psi_0.$$

Заметим, что оператор B конечномерен, поскольку его образ представляет собой линейную оболочку векторов ψ_0 и $f\psi_0$.

Оценим норму оператора B:

$$\|B\| \le \|f\Pi\| + \|\Pi f \Pi'\| \le 2\|f\psi_0\|. \tag{4}$$

Волновая функция ψ_0 является экспоненциально малой на носителе функции f, следовательно, норма оператора B является экспоненциально малой при $\hbar \to 0$.

Таким образом, операторы $\hat{H}$ и A отличаются на экспоненциально малое (при $\hbar \to 0$) конечномерное возмущение B. Следовательно, спектр оператора A в некоторой окрестности E_0 является дискретным, и расстояние между точками спектра оператора A в некоторой окрестности E_0 имеет порядок $\hbar$, как и у оператора $\hat{H}$.

Применяя формулу теории возмущений для оператора $\hat{H} = A + B$ для изолированной точки спектра E_0 оператора A, и учитывая, что $B\psi_0 = f\psi_0$ получаем оценку:

$$E_1 = E_0 + \left\langle f\psi_0, \psi_0 \right\rangle + \sum_{k=1}^{N} \frac{|\left\langle f\psi_0, \varphi_k \right\rangle|^2}{E_0 - \lambda_k} + O\left(\|\mathrm{B}\|^2\right), \tag{5}$$

где λ_k – точка дискретного спектра оператора A, а φ_k - соответствующий собственный вектор. Сумма в формуле (5) берется по всем точкам дискретного спектра оператора A из некоторой фиксированной окрестности точки E_0, за исключением собственного значения E_0. Поскольку расстояние между соседними точками спектра λ_k имеет порядок $\hbar$, величина N имеет порядок $1/\hbar$.

Необходимость учитывать нелинейные члены теории возмущений в формуле (5) связана с наличием малого знаменателя $E_0 - \lambda_k$, который имеет порядок $\hbar$ для первых значений k. Без учета этих членов мы получили бы более простую, но не достаточно точную оценку:

$$E_1 = E_0 + \left\langle f\psi_0, \psi_0 \right\rangle + O\left(\frac{\|\mathrm{B}\|^2}{\hbar}\right).$$

Учитывая оценку (4) для нормы оператора B, остается только показать, что нелинейные члены теории возмущений, представленные в формуле (5), оцениваются величиной $O\left(\|\mathrm{B}\|^2\right)$ и не дают существенного вклада в итоговую оценку смещения энергетического уровня E_0.

Поскольку оператор A и оператор $\hat{H}$ отличаются на экспоненциально малое возмущение B, то в спектре оператора $\hat{H}$ присутствует единственная точка $\tilde{\lambda}_k$ из экспоненциально малой окрестности каждой точки λ_k оператора A $(k = 1, \ldots, N)$.

Пусть $\tilde{\varphi}_k$ – собственный вектор оператора $\hat{H}$, который соответствует точке $\tilde{\lambda}_k$.

Из нашего предположения, что добавление возмущения f к потенциалу V не создает дополнительных потенциальных ям, следует, что волновая функция стационарного состояния $\tilde{\varphi}_k$ экспоненциально мала в классически запрещенной области на носителе функции f. Из теории возмущений также следует, что разность $\tilde{\varphi}_k$ и φ_k экспоненциально мала по норме.

Таким образом, величина $\|\sigma\varphi_k\|$, где $\sigma(x)$ – функция, равная единице при $x \in [a,b]$ (носитель f) и нулю для других x, убывает быстрее любой степени $\hbar$:

$$\|\sigma\varphi_k\| = O\left(\hbar^{+\infty}\right)$$

Следовательно,

$$\left|\left\langle f\psi_0, \varphi_k \right\rangle\right|^2 = \left|\left\langle f\psi_0, \sigma\varphi_k \right\rangle\right|^2 \le \|f\psi_0\|^2 \cdot \|\sigma\varphi_k\|^2 = \|f\psi_0\|^2\, O\left(\hbar^{+\infty}\right).$$

Учитывая оценку снизу для разности $E_0 - \lambda_k$ и оценки сверху для числа слагаемых N, получаем, что

$$\left|\sum_{k=1}^{N} \frac{|\left\langle f\psi_0, \varphi_k \right\rangle|^2}{E_0 - \lambda_k}\right| = \|f\psi_0\|^2\, O\left(\hbar^{+\infty}\right),$$

что и требовалась доказать.

Рассмотрим подробнее интегралы, представляющие главный член и величину оценки погрешности в формуле (3):

$$I_1 = \left\langle f\psi_0, \psi_0 \right\rangle = \int_a^b f(x)\,|\psi_0(x)|^2\,dx,$$

$$I_2 = \left\langle f\psi_0, f\psi_0 \right\rangle = \int_a^b f^2(x)\,|\psi_0(x)|^2\,dx.$$

Для волновой функции ψ_0, равномерно по $x \in [a,b]$, справедлива ВКБ оценка (см., например, [11]):

$$\psi_0(x) = \frac{c}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S(x)\right)\left(1 + O(\hbar)\right),$$

где $S(x) = \int_{x_2}^{x} |p|\,dx$ – туннельное действие, $p = \sqrt{2\left(E_0 - V(x)\right)}$ – классический импульс, а $c > 0$ – нормировочная константа, возможно, зависящая от $\hbar$.

Поскольку $S'(x) = |p(x)| > 0$ при $x \in [a,b]$, то в интегралах $I_{1,2}$ можно сделать невырожденную замену переменных $z = 2\left(S(x) - S(a)\right)$. Тогда интегралы $I_{1,2}$ примут вид:

$$I_j = \left(1 + O(\hbar)\right)|c|^2\, e^{-\frac{2}{\hbar}S(a)} \cdot \int_0^{z_0} g_i(z)\, e^{-\frac{1}{\hbar}z}\,dz, \qquad (6)$$

где $z_0 = 2(S(b) - S(a))$ и функции $g_i(z)$ не зависят от $\hbar$:

$$g_1(z) = \frac{1}{2|p|^2} f(x)\Big|_{x = x(z)}, \qquad g_2(z) = \frac{1}{2|p|^2} f^2(x)\Big|_{x = x(z)}.$$

Приведем Лемму, которая содержит основные сведения об асимптотическом поведении интегралов вида:

$$G(\hbar) = \int_0^{z_0} g(z)\, e^{-\frac{1}{\hbar}z}\,dz.$$

Лемма

Пусть $g(z) \in C[0, z_0]$, $g(z) \geq 0$ и $g(z)$ не равна тождественно 0 в некоторой окрестности точки $z = 0$. Тогда

1. Справедлива оценка $G(\hbar) = O(\hbar)$. *Если* $g(0) \neq 0$, *то*

$$G(\hbar) = \hbar g(0)\left(1 + o(1)\right).$$

2. Если $g(z) \in C^k[0, z_0]$ *и* $g^{(i)}(0) = 0$ *при* $i = 0, \dots, k-1$, *то*

$$G(\hbar) = O(\hbar^{k+1}).$$

3. Интеграл G *не является экспоненциально малым:*

$$\hbar \ln G(\hbar) = o(1). \qquad (9)$$

4. Основной вклад в величину интеграла G *дает малая окрестность точки* $z = 0$, *то есть существует* $z_1(\hbar) = o(1)$ *такое, что*

$$G(\hbar) = \left(1 + O(\hbar)\right)\int_0^{z_1(\hbar)} g(z)\, e^{-z/\hbar} dz. \tag{10}$$

Доказательство

Оценки пункта 1 и 2 является стандартными для асимптотики интегралов вида (7) и приведены, например, в [11].

Докажем утверждение пункта 3.

По условию леммы, для произвольной константы $C > 0$ существует точка $w \in (0, C)$ такая, что $g(w) \neq 0$. Следовательно,

$$G(\hbar) \geq \int_w^{z_0} g(z)\, e^{-z/\hbar} dz = e^{-w/\hbar} \hbar g(w)\left(1 + o(1)\right) \geq e^{-C/\hbar}, \tag{11}$$

для достаточно маленьких значений $\hbar > 0$. Логарифмируя неравенство (11), получаем необходимую оценку (9).

Остается доказать утверждение пункта 4 данной леммы.

Определим

$z_1(\hbar) = -\hbar \ln G(\hbar)$.

Тогда из оценок (8) и (9) следует, что $z_1(\hbar) \geq 0$, $z_1(\hbar) \to 0$ и

$$\int_{z_1(\hbar)}^{z_0} g(z)\, e^{-z/\hbar} dz = e^{-z_1(\hbar)/\hbar} O(\hbar) = O(\hbar G(\hbar)).$$

Следовательно, справедлива оценка

$$\int_0^{z_1(\hbar)} g(z) e^{-z/\hbar} dz = G(\hbar) - \int_{z_1(\hbar)}^{z_0} g(z) e^{-z/\hbar} dz = G(\hbar)\left(1 + O(\hbar)\right),$$

которая эквивалентна искомой оценке (10). Лемма полностью доказана.

Утверждение леммы о том, что основной вклад в интеграл G дает малая окрестность точки $z = 0$, является очевидным в случае, когда $g(0) \neq 0$. Нетривиальный результат заключается в том, что данное утверждение остается верным и в случае, когда $g(0) = 0$ и значения $g(z)$ является очень маленькими в окрестности нуля (но не равными нулю тождественно).

Поскольку интеграл G не является экспоненциально малым при $\hbar \to 0$ (оценка (9)), то оба интеграла I_1 и I_2 имеют вид

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

Из этой оценки и утверждения теоремы 1 следует формула (1).

Из утверждения леммы следует, что интеграл G всегда может быть оценен величиной $O(\hbar)$, но действительная скорость стремления $G(\hbar)$ к 0 определяется поведением функции $g(z)$ в малой окрестности точки $z = 0$. Этот факт позволяет в ряде случаев утверждать, что интеграл I_1 много больше интеграла оценки погрешности I_2.

Теорема 2

Пусть функция $f(x)$ непрерывна на всей оси и не меняет знак ($f(x) \geq 0$ или $f(x) \leq 0$) в некоторой фиксированной окрестности точки $x = a$. Тогда

$$E_1 - E_0 = \left\langle f\psi_0, \psi_0 \right\rangle \left(1 + o(1)\right) \qquad (\hbar \to 0). \tag{12}$$

Если функция $f(x)$ непрерывно дифференцируема при $x \geq a$ и $f'(x)$ не меняет знак в окрестности $x = a$, то оценка $o(1)$ в формуле (12) может быть заменена на $O(\hbar)$.

Доказательство

Из условий непрерывности функции $f(x)$ следует, что

$$g_2(z) = f\left(x(z)\right) g_1(z) = \mathrm{o}\left(g_1(z)\right), (z \to 0),$$

поскольку $f(a) = 0$ и $f(x) = o(1)$ при $x \to a$.

Применяя лемму (формула (10)) и учитывая постоянство знака функции $g_1(z)$, получаем оценку

$$\int_0^{z_0} g_2(z) e^{-z/\hbar} dz =$$

$$= \left(1 + O(\hbar)\right) \cdot \int_0^{z_1(\hbar)} g_2(z) e^{-z/\hbar} dz \leq 2 \max_{0 \leq z \leq z_1(\hbar)} \left| f\left(x(z)\right) \right| \cdot \left| \int_0^{z_1(\hbar)} g_1(z) e^{-z/\hbar} dz \right| =$$

$$= o(1) \left| \int_0^{z_1(\hbar)} g_1(z) e^{-z/\hbar} dz \right| \leq o(1) \left| \int_0^{z_0} g_1(z) e^{-z/\hbar} dz \right|.$$

Следовательно,

$$I_2 = \left(1 + O(\hbar)\right) |c|^2 \, e^{-\frac{2}{\hbar} S(a)} \cdot \int_0^{z_0} g_2(z) e^{-z/\hbar} dz =$$

$$= \left(1 + O(\hbar)\right) |c|^2 \, e^{-\frac{2}{\hbar} S(a)} o\left(\int_0^{z_0} g_1(z) e^{-z/\hbar} dz \right) = o\left(I_1\right).$$

Применяя теорему 1, получаем искомую оценку (12).

Остается показать, что $o(1)$ в формуле (12) можно заменить на $O(\hbar)$ в случае непрерывно дифференцируемой функции $f(x)$.

Напомним, что исходный потенциал $V(x)$ предполагался гладким. Следовательно, функции $g_{1,2}(z)$ являются непрерывно дифференцируемыми.

Интегрируя по частям, получаем

$$\int_0^{z_0} g_2(z) e^{-z/\hbar} dz = \hbar(1 + O(\hbar)) \int_0^{z_0} g'_2(z) e^{-z/\hbar} dz$$

Оценим производную $g_2'(z)$ в окрестности точки $z = 0$:

$$g_2'(z) = \frac{1}{2|p|} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{2|p|^2} f^2(x) \right) = O(1) f^2(x) + O(1) f(x) f'(x) = O(1) f(x) = O\left(g_1(z)\right),$$

где $x = x(z)$ и $z \to 0$. Основной вклад в интеграл от функции $g_2'(z)$ дает малая окрестность точки $z = 0$ (см. лемму), где справедлива оценка $g_2'(z) = O\left(g_1(z)\right)$. Следовательно, справедлива оценка:

$$\int_0^{z_0} g_2(z)e^{-z/\hbar}dz = O(\hbar)\cdot\left|\int_0^{z_0} g_1(z)e^{-z/\hbar}dz\right|,$$

что и требовалось доказать.

3. Явная формула для туннельного возмущения

В данном разделе показано, как общие результаты предыдущего раздела могут быть применены для анализа величины туннельного возмущения энергий в случае, когда известно асимптотическое поведение функции $f(x)$ в окрестности точки $x=a$.

Для начала рассмотрим случай, когда $f(x)$ имеет скачек в точке $x=a$. Тогда

$$f(x)=\gamma\,\theta(x-a)w(x),$$

где $\theta(x)$ – функция Хэвисайда, γ – величина скачка, а $w(x)$ – гладкая функция такая, что $w(a)=1$.

Применяя теорему 1 и оценку (6), получаем

$$E_1-E_0=\gamma\,|c|^2\,e^{-S(a)/\hbar}\cdot\left(\int_0^{z_0} g_1(z)e^{-z/\hbar}dz+\gamma\,O\left(\int_0^{z_0} g_2(z)e^{-z/\hbar}dz\right)\right)\bigl(1+O(\hbar)\bigr)$$

Вычислим значения

$$g_1(0)=\frac{1}{4\bigl(V(a)-E_0\bigr)},\qquad g_2(0)=\frac{1}{4\bigl(V(a)-E_0\bigr)}.$$

Применяя оценку (8) для интегралов от $g_1(z)$ и $g_2(z)$, получаем, что

$$E_1-E_0=\frac{\gamma\hbar\,|c|^2}{4\bigl(V(a)-E_0\bigr)}e^{-S(a)/\hbar}\cdot\bigl(1+O\bigl(\hbar+|\gamma|\bigr)\bigr) \tag{13}$$

Отметим, что в частном случае основного состояния и невырожденного минимума потенциала $V(x)$ эта асимптотика совпадет с результатом, представленным в работе [10], если в (13) вместо нормировочной константы подставить ее известное асимптотическое выражение.

Общая оценка (13) позволяет легко найти главный член асимптотического разложения величины туннельного возмущения энергетических уровней не только для основного состояния, а также для первых возбужденных состояний, когда энергия E_0 имеет конечный номер n энергетического уровня в потенциальной яме $V(x)$, и для высоких энергетических уровней (уровни с номерами n порядка $1/\hbar$). Соответствующие нормировочные константы, которые нужно использовать в (13), имеют вид [1,12]:

$$|c|^2=\frac{\omega}{2\pi}\bigl(1+O(\hbar)\bigr) \tag{14}$$

- для высоких энергетических уровней, или

$$|c|^2=\frac{\omega}{2\pi}\sqrt{\frac{\pi}{e}}u(n)\bigl(1+O(\hbar^{1/2})\bigr) \tag{15}$$

- для энергий, близких к невырожденному минимуму потенциала, где ω – частота классического движения в потенциале $V(x)$ для рассматриваемой энергии E_0, а $u(n)$ - универсальная функция, имеющая вид:

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

Заметим, что условие малости амплитуды скачка является существенным для построенных асимптотических формул, поскольку в случае скачка конечной величины интеграл I_2 имеет тот же порядок, что и интеграл I_1. В случае конечного скачка формула (13) оказывается недостаточно точной.

Несложно получить асимптотические формулы для туннельного возмущения в случае *непрерывной деформации потенциала*. Например, при

$$f(x)=(x-a)^m\,\theta(x-a)w(x),$$

где $w(x)$ – гладкая функция такая, что $w(a)\neq 0$.

Асимптотика интеграла I_1 в этом случае вычисляется по частям (см. [11]):

$$\left\langle f\psi_0,\psi_0\right\rangle=|c|^2\,e^{-\frac{2}{\hbar}S(a)}\,\frac{m!w(a)\hbar^{m+1}}{2^{m+1}\,|\,p(a)|^{m+2}}\left(1+O(\hbar)\right).$$

Тогда, применяя теорему 2 и подставляя подходящую формулу для нормировочной константы (формула (14) или (15)), можно сразу получить явную формулу для главного члена асимптотики туннельного возмущения. Так, например, для высоких энергетических уровней получаем:

$$E_1-E_0=\frac{m!w(a)\omega\hbar^{m+1}}{2^{m+2}\,|\,p(a)|^{m+2}\,\pi}e^{-\frac{2}{\hbar}S(a)}\left(1+O(\hbar)\right).$$

Благодарности

Данная работа выполнена в департаменте прикладной математики МИЭМ при поддержке Научного фонда Национального исследовательского университета Высшая школа экономики.

Литература

1. *Выборный Е. В.* Координатное и импульсное туннелирование в одномерных квантовых системах с дискретным спектром // Наноструктуры. Математическая физика и моделирование, **12**(1), 2015, 5-84.
2. *Jona-Lasinio G., Martinelli F., Scoppola E.* New approach to the semiclassical limit of quantum mechanics / // Comm. in Math. Phys., **80**(2), 1981, 223–254.
3. *Simon B.* Semiclassical analysis of low lying eigenvalues. IV. The ea on the elephant // J. Funct. Anal. **63,** 1985, 123-136.
4. *Simon B.* Instantons, double wells and large deviations // Bull. Amer. Math. Soc. (N.S.) **8**, 1983, 323-326.
5. *Helffer B., Sjostrand J.* Puits multiples en limite semi-classique. II. Interaction moléculaire. Symétries. Perturbation // Ann. Inst. H. Poincare A **42**(2)**,** 1985, 127-212.
6. *Claverie P., Jona-Lasinio G.* Instability of tunneling and the concept of molecular structure in quantum mechanics: The case of pyramidal molecules and the enantiomer problem // Physical Review A., **33**(4), 1986, 2245-2253.
7. *Graffi S., Grecchi V., Jona-Lasinio G.* Tunnelling instability via perturbation theory // J. of Phys. A: Math. and General, **17**(15), 1984, 2935-2944.
8. *Выборный Е.В.* Туннельное расщепление спектра и билокализация собственных
9. функций в несимметричной двойной яме // ТМФ, **178**(1), 2014, 107–130.
10. *Yoon S. H.* The Semiclassical Limit of Tunneling in Asymmetric Double-Wells: Arbitrary Fleas // J. of Korean Phys. Soc., **26**(3), 1993, 280-284.
11. *Cesi F., Rossi G. C., Testa M.* Non-symmetric double well and Euclidean functional integral //Annals of Physics, **206**(2), 1991, 318-333.
12. *Федорюк М. В.* Метод перевала // М.: Наука, 1977.
13. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Курс теоретической физики в 10 томах, Т.3 Квантовая механика (нерелятивистская теория) // М.: Наука 1974.

ON THE TUNNELING PERTURBATION OF THE DISCRETE SPECTRUMS

E.V. Vybornyi

National Research University Higher School of Economics (HSE)

evgeniy.bora@gmail.com

Received 17.11.2015

We consider the semiclassical asymptotics of the discrete spectrum shift for the Schrödinger operator under a deformation of the potential in the classically forbidden region. Since such a deformation of the potential effects on the quantum particle only due to the tunneling effects, then the corresponding shift of the energy levels is exponentially small. We obtain asymptotic semiclassical formulas for the energy shift for various types of the potential deformation.