Т. Ф. Панкратова, Анзац с полиномами Эрмита для многомерной потенциальной ямы, *Зап. научн. сем. ПОМИ*, 1994, том 218, 149–165

Т. Ф. Панкратова

АНЗАЦ С ПОЛИНОМАМИ ЭРМИТА ДЛЯ МНОГОМЕРНОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЫ

§ 1. Введение

Рассмотрим стационарное уравнение Шредингера

$$-\frac{h^2}{2}\Delta u + Vu = Eu, \tag{1.1}$$

где $\Delta = \sum\limits_{i=1}^{d} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$ – оператор Лапласа, V – вещественнозначная функция в $\mathbb{R}^d$, имеющая невырожденный минимум в начале координат $V(0) = 0$ (потенциальную яму).

Будем считать, что вне некоторой окрестности минимума $V(x) > C > 0$. Известно, что тогда ниже C спектр самосопряженного оператора Шредингера $\mathfrak{H}$, порожденного левой частью уравнения (1.1), дискретен [1]. Речь пойдет о квазиклассической асимптотике ($h \to 0$) нижней части этого спектра.

Интерес представляет задача с потенциалом, имеющим несколько одинаковых ям, когда дискретный спектр оператора $\mathfrak{H}$ устроен следующим образом. Собственные значения расположены на числовой оси группами. Число значений в группе равно числу ям. Расстояние между группами порядка h. Расстояние между числами в группе экспоненциально мало при $h \to 0$. Место расположения каждой группы определяется своим квантовым вектором $n \in \mathbb{N}^d$, $|n| = 0, 1, 2, \ldots$.

Явыления эти исследованы достаточно полно и строго для одномерного оператора [2–12].

Случай размерности $d \geqslant 2$ – намного сложнее [12–18]. Работ в этой области очень много, и много результатов (на уровне теорем) содержится в трудах Хелффера–Шостранда ([12–14] и др.) (с использованием техники псевдо-дифференциальных операторов) и Доброхотова-Колокольцова-Маслова ([16–18] и др.) (с применением туннельного канонического оператора). Однако нужная асимптотика (как в одномерной задаче) амплитуды расщепления энергетических уровней, отвечающих произвольному квантовому вектору, в задаче с несколькими одинаковыми ямами так и не написана. Методика, используемая в [16–18] позволяет находить ширину только самых нижних расщеплений ($n = 0$).

В настоящей работе построены асимптотические ряды для набора собственных значений в некоторой полосе $0 \leqslant E \leqslant E^* < C$ и отвечающих им собственных функций в области, не зависящей от h, при $d \geqslant 2$. Методы отличаются от указанных выше. Анзац с полиномами Эрмита навеян задачей о гармоническом осцилляторе [19]. Построенные ряды для собственных функций являются новыми. Выписаны формальные разложения по степеням h , с коэффициентами, полученными в некоторой области, не зависящей от h, аналитическими для аналитического потенциала. Ряды эти расходятся, но если оборвать каждый ряд на N-м члене, то оставшиеся суммы удовлетворят уравнению (1.1) с погрешностью порядка $h^{N+2} \cdot e^{-\frac{S}{h}}$, где S– некоторая неотрицательная функция, определенная ниже. Указанные суммы – это так называемые *квазимоды* [20], удовлетворяющие уравнению Шредингера с экспоненциально малой погрешностью. Возможность построить *квазимоды* для задачи с расщеплениями в достаточно широкой области и с погрешностью меньшей величины расщепления дает возможность писать асимптотики таких расщеплений достаточно строго (следуя программе, реализованной в [10] для $d = 1$). Построенные ряды могут быть использованы для исследования множества нулей в задаче с одной потенциальной ямой. Некоторые примеры такого исследования приведены в §5.

§ 2. Асимптотические ряды для собственных значений и собственных функций

Для каждого квантового вектора $n = (n_1, n_2, \dots, n_d) \in \mathbb{N}^d$, будем искать пару: число E_n и функцию $u_n(x)$, удовлетворяющую уравнению (1.1), в виде следующих формальных рядов

$$E_n = \sum_{j=1}^{\infty} E_{nj} h^j, \tag{2.1}$$

$$u_n = \exp\Big\{-\frac{S^0}{h}\Big\} \sum_{k=0}^{\infty} u_{nj} h^j, \tag{2.2}$$

где $S^0 = S^0(x)$, $x = (x_1, x_2, \dots, x_d) \in \mathbb{R}^d$, $u_{nj} = u_{nj}(x)$, $j = 0, 1, 2, \dots$, функции, не зависящие от h.

Будем искать $S^0(x)$ в виде полусуммы квадратов d новых неизвестных функций $\psi_1(x)$, $\psi_2(x), \dots, \psi_d(x)$:

$$S^0(x) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{d} \psi_i^2, \tag{2.3}$$

связанных следующими условими ортогональности

$$\langle \nabla\psi_i, \nabla\psi_j \rangle = 0, \quad i \neq j, \tag{2.4}$$

(символы ∇ и $\langle\cdot,\cdot\rangle$ означают *градиент* и *скалярное произведение* в $\mathbb{R}^d$ соответственно), а $u_{n0}(x)$ – в виде следующего произведния:

$$u_{n0}(x) = e^{\mathcal{P}_n(x)} \prod_{i=1}^{d} H_{n_i}\Big(\frac{\psi_i(x)}{\sqrt{h}}\Big), \tag{2.5}$$

где $\mathcal{P}_n(x)$ – новая неизвестная функция.

$H_{n_i}(t) = (-1)^{n_i} e^{t^2} (e^{-t^2})^{(n_i)}$ – полиномы Эрмита, удовлетворяющие дифференциальному уравнению

$$H''_{n_i}(t) - 2tH'_{n_i}(t) + 2n_i H_{n_i}(t) = 0. \tag{2.6}$$

Подставим ряды (2.1) и (2.2) в уравнение Шредингера (1.1) и приравняем коэффициенты при каждой степени h к нулю.

Равенство нулю коэффициента при нулевой степени h приводит к уравнению эйконала для функции $S^0(x)$:

$$(\nabla S^0)^2 = 2V, \tag{2.7}$$

или, что эквивалентно, к системе d нелинейных уравнений (2.4), (2.7) для d неизвестных функций $\psi_1(x)$, $\psi_2(x), \dots, \psi_d(x)$, если левую часть уравнения (2.7) записать в терминах этих функций, используя формулу (2.3).

Приравнивание к нулю коэффициента при первой степени h с учетом условий (2.4)-(2.7) приводит к следующему уравнению для функции $\mathcal{P}_n$ и числа E_{n1}, а именно,

$$\langle \nabla S^0, \nabla\mathcal{P}_n \rangle = E_{n1} - \frac{\nabla S^0}{2} - \sum_{i=1}^{d} n_i (\nabla\psi_i)^2. \tag{2.8}$$

Аналогичные требования для коэффициентов при h^{j+1}, $j \geqslant 1$, приводят к следующим уравнениям для u_{nj} и $E_{n,j+1}$:

$$\langle \nabla S^0, \nabla u_{nj} \rangle + \Big(\frac{\nabla S^0}{2} - E_{n1}\Big) u_{nj} = F_j, \tag{2.9}$$

где

$$F_1 = \left\{ \frac{1}{\sqrt{h}} \sum_{i=1}^{d} H'_{n_i}\left(\frac{\psi_i}{\sqrt{h}}\right) \left[\langle \nabla\psi_i, \nabla\mathcal{P}_n \rangle + \frac{\nabla\psi_i}{2} \right] \prod_{j\neq i} H_{n_j}\left(\frac{\psi_j}{\sqrt{h}}\right) \right.$$

$$\left. + \left[\frac{(\nabla\mathcal{P}_n)^2 + \Delta\mathcal{P}_n}{2} + E_{n2} \right] \prod_{j=1}^{d} H_{n_j}\left(\frac{\psi_j}{\sqrt{h}}\right) \right\} e^{\mathcal{P}_n}, \qquad (2.10)$$

$$F_{j,j\geqslant 2} = \frac{\Delta u_{n,j-1}}{2} + \sum_{2\leqslant l\leqslant j} E_{nl} u_{n,j+1-l} + E_{n,j+1} e^{\mathcal{P}_n} \prod_{i=1}^{d} H_{ni}\left(\frac{\psi_i}{\sqrt{h}}\right). \qquad (2.11)$$

Для описания вектора $\psi(x) = (\psi_1(x), \psi_2(x), \ldots, \psi_d(x))$ удобно ввести следующие функции

$$S^j = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{d} (1 - 2\delta_{ij})\psi_i^2, \quad \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{при} \quad i = j, \\ 0, & \text{при} \quad i \neq j \end{cases}. \qquad (2.12)$$

Нетрудно видеть, что квадраты их градиентов совпадают с квадратом градиента S^0 и, следовательно, они также должны удовлетворять уравнению эйконала. В §3 будет сформулирована теорема существования и единственности аналитических функций S^j, $j = 0, 1, 2, \ldots, d$, удовлетворяющих уравнению (2.7) с заданными условиями в начале координат, и одновременно теорема существования и единственности диффеоморфизмов, приводящих векторные поля вида $\langle \nabla S^j, \nabla \cdot \rangle$ к некоторой нормальной форме. В §4 будут получены аналитические функции $\psi_i(x)$, $i = 1, 2, \ldots, d$, удовлетворяющие уравнениям (2.4) и (2.7), (2.3), найдены числа E_{nj}, $j = 1, 2, \ldots$, для некоторого набора квантовых векторов n, $|n| = 0, 1, 2, \ldots$, и функции $u_{nj}(x)$, $j = 0, 1, 2, \ldots$, в некоторой окрестности начала координат, не зависящей от h. В §5 изложен способ описания множества нулей собственной функции, указан путь исследования окрестностей квазипересечений, рассмотрены примеры ($n = (0, 0)$, $(1, 0)$ и (1.1)).

§ 3. Теорема о фазах, нормальных формах и диффеоморфизмах для аналитического потенциала

Пусть V – аналитическая функция, представимая в некотором полицидре $|x_i| \leqslant r$, $i = 1, 2, \ldots, d$, тейлоровским разложением следующего вида

$$V(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{d} \omega_i^2 x_i^2 + \sum_{|k|\geqslant 3} v_k x^k, \qquad (3.1)$$

где $k = (k_1, k_2, \dots, k_d) \in \mathbb{N}^d$, $|k| = \sum_{i=1}^{d} k_i$, $\omega_i > 0$, $i = 1, 2, \dots, d$.

Поставим начальные условия для функций S^j, $j = 0, 1, \dots, d$, а именно:

$$S^j(0) = 0, \quad \frac{\partial S^j}{\partial s_i}(0) = 0, \quad \frac{\partial^2 S^j}{\partial x_j \partial x_k}(0) = (1 - 2\delta_{ij})\,\delta_{ik}\omega_k.$$

В соответствии с этим будем искать решения уравнения (2.7) в виде следующих степенных рядов

$$S^j(x) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{d}\omega_i(1 - 2\delta_{ij})x_i^2 + \sum_{|k|\geqslant 3}(S^j)_k x^k, \quad j = 0, 1, \dots, d \tag{3.2}$$

Подставляя (3.2) в (2.7) и сравнивая коэффициенты при x^k, мы получим следующие рекуррентные соотношения для $(S^j)_k$:

$$(S^j)_k = \frac{\widetilde{v}_k}{\langle k, I_j\omega\rangle}, \tag{3.3}$$

где $\omega = (\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_d)$; I_0 –единичная матрица; I_j, $j = 1, \dots, d$, – диагональные матрица порядка d, у которых все элементы диагонали равны единице за исключением j-го, который равен -1, .

$$\widetilde{v}_k = v_k \quad \text{для} \quad |k| = 3 \quad \text{и} \quad \widetilde{v}_k = v_k + \text{члены,}$$
$$\text{зависящие от} \quad (S^j)_\varkappa, \quad |\varkappa| < |k|, \quad \text{для} \quad |k| \geqslant 4.$$

Нетрудно видеть, что для положительных чисел ω_i, $i = 1, 2, \dots, d$, знаменатели в формулах (3.3) для $j = 1, 2, \dots d$, могут равняться нулю. Для того, чтобы это исключить, даже при формальном построении указанных рядов необходимо наложить некоторые дополнительные условия на потенциал.

Рассмотрим одновременно замену переменных

$$\Phi^j : y_j = (y_{j1}, \dots, y_{jn}) \to (x_1 = \Phi_1^j(y_j), \dots, x_d = \Phi_d^j(y_j)), \tag{3.4}$$

которая переводит каждое векторное поле $\langle \nabla S^j, \nabla \cdot \rangle$ в нормальную для него форму:

$$L_0^j = \sum_{i=1}^{d}\omega_i(1 - 2\delta_{ij})y_{ji}\frac{\partial}{\partial y_{ji}}. \tag{3.5}$$

Будем искать функции $\Phi_i^j(y)$, $i = 1, 2, \dots, d$ в виде следующих рядов

$$\Phi_i^j(y_j) = y_{ji} + \sum_{|k|\geqslant 2}(\Phi_i^j)_k\, y_j^k. \tag{3.6}$$

Для того, чтобы получить формулы для коэффициентов $(\Phi_i^j)_k$ заменим x_i, $i = 1, 2, \ldots, d$, в $\langle \nabla S^j, \nabla \cdot \rangle$ их выражениями $\Phi_i^j(y)$ вида (3.6) и приравняем полученные ряды (в переменных y) к L_0^j. Отсюда мы найдем следующие выражения для коэффициентов

$$(\Phi_i^j)_k = \frac{\widetilde{S}_{i,j,k}}{\langle k - \mathrm{ort}_i, I_j\omega\rangle}, \quad j = 0, 1, \ldots, d, \quad |k| \geqslant 2, \tag{3.7}$$

где

$$\widetilde{S}_{i,j,k} = (k_i + 1)(S^j)_{k+\mathrm{ort}_i} + \text{члены, зависящие от} \quad (\Phi_l^j)_\varkappa,$$
$$l = 1, 2, \ldots, d, \quad |\varkappa| < |k|.$$

ort_i – элемент стандартного базиса $\{\mathrm{ort}_i\}_1^d$, у которого все компоненты равны 0 кроме i-й, которая равна 1.

Видно, что некоторые знаменатели в (3.7) обращаются в ноль при некоторых значениях ω. Требуется исключить эти значения.

Примем следующие определения.

Будем называть положительные $\omega_1, \omega_2, \ldots, \omega_d$ *нерезонансными*, если они линейно независимы над кольцом целых чисел.

Положительные числа $\omega_1, \omega_2, \ldots, \omega_d$ будем называть *диофантовыми*, если существуют положительные константы α и C такие, что для любого $k \in \mathbb{Z}^d$, $k \neq 0$,

$$|\langle k, \omega\rangle| \geqslant \frac{C}{|k|^\alpha}. \tag{3.8}$$

Обозначим множество всех векторов $\omega = (\omega_1, \omega_2, \ldots, \omega_d)$ с положительными компонентами буквой Ω, то его подмножество, которое состоит из векторов ω с *нерезонансными* компонентами, – буквой Ω_{nr}, подмножество же состоящее из ω с *диофантовыми* компонентами – буквой Ω_D.

Теорема. *Пусть потенциал V – аналитическая функция d комплексных переменных $x_1, x_2, \ldots, s_d$, представимая рядом вида* (3.1) *в некоторой окрестности начала координат.*

(1) *Если $\omega \in \Omega_{nr}$, то существует единственная пара (S^0, Φ^0), где S^0 – аналитическая функция, представимая рядом вида* (3.2) *для $j = 0$ в некоторой окрестности начала координат и удовлетворяющая уравнению (2.7), а Φ^0 – аналитический диффеоморфизм, преобразующий векторное поле $\langle \nabla S^0, \nabla \cdot \rangle$ в нормальную форму L_0^0, заданную выражением* (3.5).

(2) *Если $\omega \in \Omega_D$, то для каждого $j \in \{1, 2, \ldots, d\}$ существует единственная пара (S^j, Φ^j), где S^j – аналитическая функция, представимая рядом вида* (3.2) *в некоторой окрестности начала координат и удовлетворяющая уравнению* (2.7), *а Φ^j – аналитический*

диффеоморфизм, преобразующий векторное поле $\langle \nabla S^j, \nabla \cdot \rangle$ *в нормальную форму* L_0^j, *заданную равенством* (3.5).

Доказательство этой теоремы основано на методе Ньютона, который позволяет подавить малые знаменатели в (3.3) и (3.7), и будет опубликовано в другой статье (в журнале Annales de l'Institut Henri Poincaré, Physique Théorique, в 1994 или 1995 г.).

Замечание 1. При $j = 0$ знаменатели в (3.3) в ноль не обращаются. Существование аналитической S^0 для аналитического потенциала доказано в [21] без дополнительных условий нерезонансности. Здесь эти условия нужны для построения диффеоморфизма Φ^0.

Замечание 2. Утверждение теоремы может быть следующим образом интерпретировано с точки зрения классической механики. Функции S^j – это производящие функции для инвариантных лагранжевых многообразий в классической динамической системе с потенциалом – $V(x)$. В отличие от потенциала $V(x)$, имеющего "яму" в начале координат, потенциал $-V(x)$ имеет там "вершину". Таким образом наша квантовомеханическая задача "на дне ямы" эквивалентна задаче классической динамики "в окрестности вершины". Начало координат является особой точкой в этой задаче, точкой, в которой время равно $-\infty$, точкой, в которой энергия лагранжевых многообразий стремится к нулю. Сформулированная выше теорема есть теорема существования производящих функций S^j для инвариантных лагранжевых многообразий в малой окрестности такой точки.

Замечание 3. Геометрия, связанная с подобной задачей исследуется в работе [22].

Замечание 4. Функции S^j можно продолжить аналитически на значительно большую область, используя формулы $S^j = \int \sum_{i=1}^{d} p_i^j dx_i^j$, $j = 1, 2, \ldots, d$, где при каждом j интеграл берется вдоль траектории соответствующей гамильтоновой системы.

§ 4. Построение рядов (2.1), (2.2)

Для построения рядов (2.1), (2.2) требуется найти все функции $\psi_j(x)$ – решения следующих уравнений:

$$\psi_j(x)^2 = S^0(x) - S^j(x), \quad j = 1, 2, \ldots, d. \tag{4.1}$$

Лемма 1. *Пусть $S^j(x)$, $j = 0, 1, \dots, d$, – аналитические функции, удовлетворяющие условиям теоремы. Тогда правые части в равенствах (4.1) являются полными квадратами, т.е. для каждого $j = 1, 2, \dots, d$, существует и единственная аналитическая функция $\psi_j(x)$, которая удовлетворяет уравнению (4.1) и представима тейлоровским разложением следующего вида:*

$$\psi_j = \sqrt{\omega_j}x_j + \sum_{|k|\geqslant 2}(\psi_j)_k x^k, \quad j = 1, 2, \dots, d, \tag{4.2}$$

в некоторой окрестности начала координат.

Доказательство. Из (3.2) следует, что

$$S^0 - S^j = \omega_j x_j^2 + \sum_{|k|\geqslant 3}(S^0 - S^j)_k x^k, \quad j = 1, 2, \dots, d. \tag{4.3}$$

Обозначим через $x_{\perp j}$ точку $(d-1)$-мерного пространства, ортогонального к ort_j. В соответствии с подготовительной теоремой Вейерштрасса для каждого $j = 1, 2, \dots, d$, в окрестности $x_{\perp j} = (0, \dots, 0)$ существует аналитические функции $f_j(x_{\perp j})$ и $g_j(x_{\perp j})$ такие, что

$$S^0 - S^j = [x_j^2 + x_j f_j(x_{\perp j}) + g_j(x_{\perp j})]F_j(x), \quad j = 1, 2, \dots, d, \tag{4.4}$$

где $F_j(x)$ – аналитическая функция в некоторой окрестности начала координат, удовлетворяющая условию $F_j(0, \dots, 0) \neq 0$). (Из (4.3) видно, что $F_j(0, \dots, 0) = \omega_j$).

Система уравнений (2.4), (2.7) и (2.3) для функций $\psi_1(x)$, $\psi_2(x), \dots, \psi_d(x)$ выглядит следующим образом:

$$\begin{cases} \langle\nabla\psi_i, \nabla\psi_j\rangle & = \delta_{ij}(\nabla\psi_j)^2, \\ \sum\limits_{i=1}^{d}\psi_i^2\nabla\psi_i^2 & = 2V \end{cases} \tag{4.5}$$

Решения уравнений (4.5) можно найти формально в виде рядов (4.2). В самом деле, подставив (4.2) в (4.5) и приравняв коэффициенты при каждой степени x^k к нулю, мы получим системы линейных уравнений для $(\psi_j)_k$ с отличными от нуля определителями при $\omega \in \Omega_D$. Так мы можем последовательно вычислить коэффициенты $(\psi_j)_k$ и построить функции ψ_j в виде формальных рядов. Отсюда будет следовать, что $S^0 - S^j$ для каждого $j = 1, 2, \dots, d$ является полным квадратом в смысле формальных рядов, а следовательно выражение в квадратных скобках формулы (4.4) является полным квадратом в том же самом смысле. Этого достаточно для доказательства леммы 1, ввиду аналитичности и единственности функций в (4.4). □

Построение решений уравнений (2.9), (2.10) удобно предварить еще одной вспомогательной леммой – о разрешимости уравнений следующего вида

$$L_n u = f, \tag{4.6}$$

где

$$L_n = -\langle \omega, n \rangle + L_0^0, \tag{4.7}$$

$n \in \mathbb{N}^d$, L_0^0 определен в (3.5). Рассмотрим класс операторов вида (4.7) в следующем банаховым пространстве. Пусть $B(r)$ – поли-цилиндр радиуса r с центром в начале координат:

$$B(r) = \{y \in \mathbb{C}^d : |y_i| < r, \quad i = 1, 2, \dots d\} \tag{4.8}$$

Обозначим через $\mathcal{B}_r$ банахово пространство аналитических функций в $B(r)$ с нормой

$$\|f\| = \sup_{y \in B(r)} |f(y)|, \tag{4.9}$$

через $\mathcal{B}_r, M, n, 0$ подпространство пространство $\mathcal{B}_r$, состоящее из функций, коэффициенты f_k тейлоровских разложений которых равны нулю при следующих условиях: если $k = n$ и если $|k| < M$, где $n \in \mathbb{N}^d$, $M \in \mathbb{N}$, через $\omega_0 = \min_{i \in \{1,\dots,d\}} \omega_i$.

Лемма 2. *Для $r' < r$, существует ограниченный оператор $\{L_n\}^{-1}$*

$$\{L_n\}^{-1} : \mathcal{B}_{r,M,n,0} \to \mathcal{B}_{r',M,n,0} \tag{4.10}$$

разрешающий уравнение

$$L_n u = f\big|_{B(r')}, \quad u \in \mathcal{B}_{r',M,n,0}, \quad f \in \mathcal{B}_{r,M,n,0}. \tag{4.11}$$

в следующих случаях

(1) *для любого $\omega \in \Omega$, $j = 0$, $n = (0, \dots, 0)$,*

(2) *для $\omega \in \Omega_{nr}$, $j = 0$ и произвольного n при этом существует такая положительная константа $c_1 = c_1(M, d, \omega, r)$ что в обоих случаях* (1), (2)*:*

$$\|\{L_n\}^{-1}\| \leqslant \frac{c_1}{(r - r')^{d-1}} \tag{4.12}$$

Доказательство. Рассмотрим уравнение (4.11)в предположении, что f в правой части представима следующим тейлоровским разложением в $B(r)$

$$f(y) = \sum_{|k| \geqslant M} f_k y^k. \tag{4.14}$$

$$u(y) = \sum_{|k|\geqslant 0} u_k y^k. \tag{4.15}$$

Из уравнения (4.11) мы легко получим формулы для коэффициентов u_k

$$u_k = \frac{f_k}{\langle\omega, k-n\rangle}\bigg|_{k\neq n}, \quad u_n = f_n = 0, \quad u_k\big|_{|k|<M} = 0. \tag{4.16}$$

Отсюда вытекают следующие оценки для $k \neq n$

$$|u_k| \leqslant \frac{|f_k|}{|k-n|\omega_0} \leqslant \frac{c|f_k|}{|k|\omega_0} \leqslant \frac{c\|f\|}{|k|\omega_0 r^k}. \tag{4.17}$$

Последнее неравенство является следствием формулы Коши.

Таким образом справедливы следующие оценки

$$\begin{aligned}\|u\| &\leqslant \Big|\sum_{|k|\geqslant M} u_k y^k\Big| \leqslant c\sum_{l\geqslant M}(l+d-2)\dots(l+1)\Big(\frac{r'}{r}\Big)^l\|f\| \\ &\leqslant \frac{c_1}{(r-r')^{d-1}}\|f\|\end{aligned} \tag{4.18}$$

что и завершает доказательство леммы 2. □

Легко увидеть теперь, что уравнение (2.9) после замены переменных (3.4) с $j = 0$ будет удовлетворять условиям леммы 2, случай (1), $M = 1$, если мы выберем число E_{n1} следующим образом:

$$E_{n1} = \sum_{i=1}^{d}\Big(n_i + \frac{1}{2}\Big)\omega_i. \tag{4.19}$$

Тогда, согласно лемме 2, в некотором полицилиндре можно построить аналитическое решение уравнения (2.9), обращающееся в ноль в начале координат.

Перейдем теперь к "нормальным" переменным y в уравнениях (2.10) и будем искать решения этих уравнений в виде произведения:

$$\widetilde{u}_j = \widetilde{U}_j e^{\widetilde{\mathcal{P}}_0}, \tag{4.20}$$

где тильдой обозначена замена переменной: $\widetilde{f}(y) = f(x)$; $\mathcal{P}_0$ – решений уравнения (2.9) при $n = (0, \dots, 0)$, т.е.

$$\langle\nabla S, \nabla e^{\mathcal{P}_0}\rangle + \Big(\frac{\Delta S}{2} - E_{(0,\dots,0)1}\Big)e^{\mathcal{P}_0} \equiv 0. \tag{4.21}$$

Подставив (4.20) в (2.10) и приняв во внимание (4.21) и (4.19) (откуда видно, что $E_{n1} = E_{(0,\dots,0)1} + \langle n, \omega\rangle$, мы получим следующие уравнения для функций U_j:

$$L_0\widetilde{U}_j - \langle n,\omega\rangle\widetilde{U}_j = \widetilde{F}_j e^{-\mathcal{P}_0}, \quad j = 0, 1, \dots . \tag{4.22}$$

Теперь оператор в левой части удовлетворяет условиям леммы 2, случай (2). Уравнения разрешимы при:

$$\left(\widetilde{F}_j e^{-\widetilde{\mathcal{P}}_0}\right)_n = 0, \tag{4.23}$$

где $(\widetilde{F})_n$ –коэффициент Тейлора при y^n функции $\widetilde{F}$.

Так мы получим следующие выражения для всех членов ряда (2.1):

$$E_{n2} = -\frac{1}{2}\left(\left[\Delta\widetilde{\mathcal{P}}_n + (\nabla\widetilde{\mathcal{P}}_n)^2\right]\right)_0 - \omega^{-\frac{n}{2}}\left(\widetilde{\mathcal{F}}_1 e^{\widetilde{\mathcal{P}}_n - \widetilde{\mathcal{P}}_0}\right)_n, \tag{4.24}$$

$$E_{nj} = \omega^{-\frac{n}{2}}\left(\left[\frac{\Delta\widetilde{u}_{j-1}}{2} - \sum_{i=1}^{j-1} E_{n,l+1}\widetilde{u}_{n,j-1}\right] e^{-\widetilde{\mathcal{P}}_0}\right)_n, \quad j \geqslant 2, \tag{4.25}$$

$$\text{где} \quad \omega^{-\frac{n}{2}} = \omega_1^{-\frac{n_1}{2}}\omega_2^{-\frac{n_2}{2}}\dots\omega_d^{-\frac{n_d}{2}},$$

выражение для $\widetilde{\mathcal{F}}_1$ легко получить из (2.11), и найдем все функции u_{nj}, $j = 1, 2, \dots$ в виде (4.20). Каждая из этих функций (равно как и $\psi_j(x)$, $j = 1, 2, \dots, d$) может быть продолжена вне малой окрестности начала координат (см. Замечание 3, §3).

§ 5. Множество нулей собственной функции. Квазипересечения. Примеры

Главный член u_{n0} собственной функции u_n содержит множителем произведение полиномов Эрмита. Следовательно в нулевом приближении множество нулей функции u_n есть сеть пересекающихся поверхностей Σ_i : $\psi_i(x) = t_{ij}$, $i = 1, 2, \dots, d$, $t_{ij} \in \mathfrak{R}_i$, $\mathfrak{R}_i$ – множество корней полинома $H_{n_i}(t)$. Следующий (первый) член в (2.2) зависит от третьих и четвертых производных потенциала V. В общем случае уже в этом приближении видно, что поверхности, составляющие множество нулей u_n – не пересекаются, а образуют квази-пересечения в окрестности точек пересечения поверхностей Σ_i.

В случае $d = 2$

$$u_{n0}(x) = H_{n1}\left(\frac{\psi_1}{\sqrt{h}}\right)H_{n2}\left(\frac{\psi_2}{\sqrt{h}}\right)\exp\left\{-\frac{S}{h} + \mathcal{P}_n\right\}. \tag{5.1}$$

Множество нулей u_n в главном приближении есть сеть пересекающихся линий Σ_i на плоскости. Эта сеть преобразуется в квазипересекающийся набор кривых после учета следующих членов. Характер квазипересечений зависит от старших производных потенциала. Возможно в принципе подобрать потенциал так, чтобы обеспечить наперед заданную картину квазипересечений. Рассмотрим несколько примеров.

Пример первый: $n = (0, 0)$.

Хоть в этом случае собственная функция и не имеет нулей, но формулы (4.20) показывают, что при построении следующих членов в любой моде надо знать несколько тейлоровских коэффициентов $\mathcal{P}_0$ – решения уравнения (2.9) для нулевого квантового вектора. При $d = 2$ обозначим

$$S^0 = S^+, \quad S^2 = S^-. \tag{5.2}$$

Формулы (3.3) принимают в этом случае следующий вид

$$\begin{aligned} S_{03}^{\pm} &= \pm\frac{v_{03}}{3\omega_2}, \\ S_{12}^{\pm} &= \frac{v_{12}}{\omega_1 \pm 2\omega_2}, \\ S_{21}^{\pm} &= \frac{v_{21}}{2\omega_1 \pm \omega_2}, \qquad \text{при} \quad i + j = 3, \\ S_{30}^{\pm} &= \frac{v_{30}}{3\omega_1}, \end{aligned} \tag{5.3}$$

и

$$\begin{aligned} S_{04}^{\pm} &= \pm\frac{v_{04}}{4\omega_2} \mp \frac{v_{12}^2}{8\omega_2(\omega_1 \pm 2\omega_2)^2} \mp \frac{v_{03}^2}{8\omega_2^3}, \\ S_{13}^{\pm} &= \frac{v_{13}}{\omega_1 \pm 3\omega_2} \\ &- \frac{2v_{21}v_{12}}{(\omega_1 \pm 3\omega_2)(\omega_1 \pm 2\omega_2)(2\omega_1 \pm \omega_2)} \mp \frac{2v_{03}v_{12}}{\omega_2(\omega_1 \pm 3\omega_2)(\omega_1 \pm 2\omega_2)}, \\ S_{22}^{\pm} &= \frac{v_{22}}{2(\omega_1 \pm \omega_2)} - \frac{v_{30}v_{12}}{\omega_1(\omega_1 \pm \omega_2)(\omega_1 \pm 2\omega_2)} \mp \frac{v_{03}v_{21}}{2\omega_2(\omega_1 \pm \omega_2)(2\omega_1 \pm \omega_2)} \\ &- \frac{v_{12}^2}{(\omega_1 \pm \omega_2)(\omega_1 \pm 2\omega_2)^2} - \frac{v_{21}^2}{(\omega_1 \pm \omega_2)(2\omega_1 \pm \omega_2)^2}, \\ S_{31}^{\pm} &= \frac{v_{31}}{3\omega_1 \pm \omega_2} \\ &- \frac{2v_{12}v_{21}}{(\omega_1 \pm \omega_2)(\omega_1 \pm 2\omega_2)(2\omega_1 \pm \omega_2)} - \frac{2v_{30}v_{21}}{\omega_1(3\omega_1 \pm \omega_2)(2\omega_1 \pm \omega_2)}, \\ S_{40}^{\pm} &= \frac{v_{40}}{4\omega_1} - \frac{v_{21}^2}{8\omega_1(2\omega_1 \pm \omega_2)^2} - \frac{v_{30}^2}{8\omega_1^3}, \end{aligned} \tag{5.4}$$

при $i+j=4$.

После подстановки (5.3)-(5.4) в (2.9) при $n_1 = n_2 = 0$, мы получим первые тейлоровские коэффициенты функции $\mathcal{P}_0$:

$$(\mathcal{P}_0)_{10} = -\frac{1}{\omega_1}(3S_{30} + S_{12}), \tag{5.5}$$

$$(\mathcal{P}_0)_{01} = -\frac{1}{\omega_1}(3S_{03} + S_{21}), \tag{5.6}$$

$$(\mathcal{P}_0)_{20} = -\frac{1}{2\omega_1}\left(3S_{40} + \frac{1}{2}S_{22} + \frac{3}{2}S_{30}(\mathcal{P}_0)_{10} + \frac{1}{2}S_{21}(\mathcal{P}_0)_{01}\right), \tag{5.7}$$

$$(\mathcal{P}_0)_{02} = -\frac{1}{2\omega_1}\left(3S_{04} + \frac{1}{2}S_{22} + \frac{3}{2}S_{03}(\mathcal{P}_0)_{01} + \frac{1}{2}S_{21}(\mathcal{P}_0)_{10}\right), \tag{5.8}$$

Теперь мы сразу можем написать уже два члена разложения (2.1) для собственного числа

$$\begin{aligned} E_{00}^{[2]} = {} & \frac{\omega_1+\omega_2}{2}h \\ & + \left(\frac{3}{4\omega_1^2}v_{40} + \frac{1}{4\omega_1\omega_2}v_{22} + \frac{3}{4\omega_2^2}v_{04}\right. \\ & - \frac{15}{8\omega_1^4}v_{30}^2 - \frac{3\omega_1+10\omega_2}{4\omega_1^3\omega_2(\omega_1+2\omega_2)}v_{30}v_{12} \\ & - \frac{3\omega_1^2+8\omega_1\omega_2+8\omega_2^2}{8\omega_1^2\omega_2^2(\omega_1+2\omega_2)^2}v_{12}^2 - \frac{8\omega_1^2+8\omega_1\omega_2+3\omega_2^2}{8\omega_1^2\omega_2^2(2\omega_1+\omega_2)^2}v_{21}^2 \\ & \left. - \frac{10\omega_1+3\omega_2}{4\omega_1\omega_2^3(\omega_1+2\omega_2)}v_{03}v_{21} - \frac{15}{8\omega_2^4}v_{03}^2\right)h^2. \end{aligned} \tag{5.9}$$

Пример второй: $n=(1,0)$. Здесь $H_1(t)=2t$, $H_0(t)=1$. Найдем первые тейлоровские коэффициенты функций $\psi_1(x)$ и $\psi_1(x)$ по формулам (4.1) и (5.3)-(5.4) и, приравнивая коэффициенты при одинаковыых степенных x в уравнении (2.9), получим выражения для первых коэффициентов Тейлора функции $\mathcal{P}_{(1,0)}$. После этого по формуле (4.24) найдем второй член собственного числа $E_{(1,0)}$, а именно

$$\begin{aligned} E_2^{10} = {} & \frac{15}{4\omega_1^2}v_{40} + \frac{3\omega_1^2 - 2\omega_1\omega_2 + 3\omega_2^2}{4\omega_1\omega_2(\omega_1^2-\omega_2^2)}v_{22} + \frac{3}{4\omega_2^2}v_{04} \\ & + \mathcal{R}_1(\omega_1,\omega_2)\langle v_3, v_3\rangle, \end{aligned} \tag{5.10}$$

где $v_3 = (v_{30}, v_{21}, v_{12}, v_{03})$, $\mathcal{R}_1(\omega_1,\omega_2)$ – матрица, элементы которой – рациональные функции от ω_1 и ω_2.

В нулевом приближении собственная функция $u_{(1,0)}$ обращается в ноль на линии

$$\psi_1 = 0.$$

Если ряд (2.2) обрезать после второго слагаемого, то оставшийся отрезок ряда обращается в ноль на кривой

$$\psi_1 e^{\mathcal{P}_{(1,0)}} + hU_1 e^{\mathcal{P}_0} = 0, \tag{5.11}$$

уравнение которой в малой окрестности нуля принимает вид:

$$x_1 = -\frac{h(U_{(1,0)1})_{00}}{\sqrt{\omega_1}},$$

число

$$(U_{(1,0)})_{00} = -\frac{2}{\omega_1}[(\psi_1)_{20} + (\psi_1)_{02} + \sqrt{\omega_1}(\mathcal{P}_{(1,0)})_{10}],$$

$$(\psi_1)_{20} = \frac{\sqrt{\omega_1}}{3\omega_1^2} v_{30},$$

$$(\psi_1)_{02} = \frac{\sqrt{\omega_1}}{\omega_1^2 - 4\omega_2^2} v_{12},$$

$$(\mathcal{P}_{(1,0)})_{10} = -\frac{7}{3\omega_1^2} v_{30} - \frac{1}{\omega_1(\omega_1 + 2\omega_2)} v_{12}.$$

Пример третий: $n = (1,1)$. Здесь

$$u_{(1,1)0}(x) = 4\psi_1(x)\psi_2(x)e^{\mathcal{P}_{(1,1)}(x)},$$

$$u_{(1,1)1}(x) = U_{(1,1)}(x)e^{\mathcal{P}_0(x)},$$

$$E_{(1,1)1} = \frac{3}{2}\omega_1 + \frac{3}{2}\omega_2,$$

$$E_{(1,1)2} = -\left(\frac{\Delta\widetilde{\mathcal{P}}_{(1,1)} + (\nabla\widetilde{\mathcal{P}}_{(1,1)})^2}{2}\right)_{00}$$

$$-\left(\frac{e^{\widetilde{\mathcal{P}}_{1,1)} - \widetilde{\mathcal{P}}_0}}{\sqrt{\omega_1\omega_2}}\left[\frac{\widetilde{\psi}_2\Delta\widetilde{\psi}_1 + \widetilde{\psi}_1\Delta\widetilde{\psi}_2}{2} + \langle\nabla\widetilde{S}^0, \nabla\widetilde{\mathcal{P}}_{(1,1)}\rangle\right]\right)_{11}.$$

Нетрудно убедиться, что $(U_{(1,1)})_{00} = 0$,

$$(U_{(1,1)})_{10} = \frac{1}{\sqrt{\omega_1}}[(\psi_2)_{20} + (\psi_2)_{02}] + 2\sqrt{\frac{\omega_2}{\omega_1}}(\mathcal{P}_{(1,1)})_{01},$$

$$(U_{(1,1)})_{01} = \frac{1}{\sqrt{\omega_2}}[(\psi_2)_{20} + (\psi_2)_{02}] + 2\sqrt{\frac{\omega_1}{\omega_2}}(\mathcal{P}_{(1,1)})_{10},$$

$$(\mathcal{P}_{(1,1)})_{10} = -\frac{7}{3\omega_1^2}v_{30} - \frac{\omega_1 - 6\omega_2}{\omega_1(\omega_1^2 - 4\omega_2^2)}v_{12},$$

$$(\mathcal{P}_{(1,1)})_{01} = -\frac{6\omega_1 - \omega_2}{\omega_2(4\omega_1^2 - \omega_2^2)}v_{21} - \frac{7}{3\omega_2^2}v_{03}.$$

Из приведенных выше формул следует, что в окрестности координат в нулевом приближении линии нулей собственной функции $u_{(1,1)}$ это – две пересекающиеся прямые

$$\begin{cases} x_1 = 0, \\ x_2 = 0, \end{cases}$$

учет второго члена в рядах (2.1)-(2.2) показывает, что это – две ветви гиперболы

$$2\sqrt{\omega_1\omega_2}x_1x_2 + h\big[(U_{(1,1)})_{10}x_1 + (U_{(1,1)})_{01}x_2\big] = 0,$$

одна из которых проходит через начало координат.

Таким образом можно рассмотреть *квазимоды*, отвечающие любому квантовому вектору с $|n| \geqslant 1$ и исследовать их узловые линии. Это интересно с точки зрения физики и очень важно для эффективного асимптотического описания амплитуды расщепления в задаче с одинаковыми потенциальными ямами. Дело в том, что эту асимптотику можно выразить в терминах интеграла от произведения собственных функций по некоторой линии (см., например, [12–14]). Надо при этом знать, что на пути интегрирования собственные функции не равны нулю.

Литература

1. Ф. А. Березин, М. А. Шубин, Уравнение Шредингера, М.: 1983.
2. С. Ю. Славянов, *Асимптотика сингулярных задач Штурма–Лиувилля по большому параметру в случае близких точек перехода.* — Дифф. уравнения **2, No. 2** (1969), 313–325.
3. М. В. Федорюк, *Асимптотика дискретного спектра оператора* $-\omega'' + \lambda^2 p(x)\omega$. — Мат. сборник **68** (1965), 81–110.
4. А. Г. Аленицын, *Расщепление спектра, порожденное потенциальным барьером в задачах с симметричным потенциалом.* — Дифф. уравнения **18, No. 11** (1982), 1971–1975.
5. B. Simon, *Semiclassical analysis of low lying eigenvalues, I.Nondegenerate minima: Asymptotic expansions.* — Ann. Inst, Henri Poincaré **38** (1983), 295–307.
6. B. Simon, *Semiclassical analysis of low lying eigenvalues, II. Tunneling.* — Ann. Math. **120** (1984), 89–118.

7. В. П. Маслов, Комплексный метод ВКБ в нелинейных уравнениях, М.
8. E. M. Harrel, *Double wells.* — Comm. Math. Phys. **75** (1980), 239–261.
9. G. Jona–Lasinio, F. Martinelli, E. Scoppola, *New approach to the semiclassical limit of quantum mechanics.* — Comm. Math. Phys. **80** (1981), 223–254.
10. Т. Ф. Панкратова, *Квазимоды и расщепление собственных значений.* — Докл. АН СССР **276, No. 4** (1984), 795–799.
11. E. Delabaere, H. Dillinger, Contribution a la resurgence quantique, These de doctoral de math. L'Université de Nice Sophia-Antipolis.
12. B. Helffer, J. Sjöstrand, *Multplewells in the semi-classical limit I.* — Comm. in partial differential equations **9** (1984), 337–408.
13. B. Helffer, J. Sjöstrand, *Puits multples en limite semi-classique II Interaction moléculaire.* — Ann. Inst, Henri Poincaré **42** (1985), 127–212.
14. B. Helffer, J. Sjöstrand, *Multplewells in the semi-classical limit III – Interaction through nonresonant wells.* — Math. Nachr. **124** (1985), 263–313.
15. С. Ю. Славянов, Н. А. Вешев, *Квантование нижних состояний ангармонического осциллятора с помощью методов классической динамики.* — Проблемы Мат. Физ. вып. 13 (1991).
16. С. Ю. Доброхотов, В. Н. Колокольцев, В. П. Маслов, *Расщепление нижних энергетических уровней уравнения Шредингера и асимптотика фундаментального решения уравнения* $hu_t = 1/2h^2\Delta u - V(x)u$. — Теор. и Мат. Физ. **87 No. 3** (1991), 323–375.
17. Ц. Ю. Доброхотов, В. Н. Колокольцев, *Об амплитуде расщепления нижних энергетических уровней оператора Шредингера с двумя симметричными ямами.* — Теор. и Мат. Физ. **94 No. 3** (1993), 323–375.
18. В. Н. Колокольцев, *Об асимптотике нижних собственных значений и функций оператора Шредингера.* — Докл. Акад. Наук **328, No. 6** (1993), 649–653.
19. В. А. Фок, *Начала квантовой механики.* М.
20. В. И. Арнольд, *Моды и квазимоды.* — Функц. Анализ **6**, вып. **2** (1972), 12–20.
21. J. Sjöstrand, *Analytic wavefront sets and operators with multiple characteristics.* — Hokkaido Math. **12** (1983), 392–433.
22. Nguyên Hu'u Du'c, F. Pham, *Germes de configurations legendriennes stables et functions d'Airy–Weber généralisées.* — Annales de l'institut Fourier, Grenoble, **41** (1991), 905–936.

Pankratova T. F. Ansatz with Hermite polynomials for a multidimensional well.

The Schrödinger operator in $\mathbb{R}^d$ with an analytic potential, having a nondegenerated minimum (well) at the origin, is considered. The *ansatz* with Hermite polynomials is used. Under a *Diophantine* condition on the frequencies, full asymptotic series (the Plank constant h tending to zero) for eigenfunctions with given quantum numbers $n \in \mathbb{N}^d$ concentrated at the bottom of the well, is constructed, the Gaussian-like asymptotics being valid in a neighbourhood of the origin which is independent of h. The obtained asymptotic series can be prolonged on a larger domain with the help of ray methods. The way to find zero-sets of the eigenfunctions is described. Some examples are considered.

С.-Петербургский государственный университет

Поступило