В. В. Белов, С. Ю. Доброхотов, С. О. Синицын, Асимптотические решения уравнения Шредингера в тонких трубках, *Тр. ИММ УрО РАН*, 2003, том 9, номер 1, 15–25

ТРУДЫ ИНСТИТУТА МАТЕМАТИКИ И МЕХАНИКИ УрО РАН

Том 9 № 1 2003

# АСИМПТОТИЧЕСКИЕ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА В ТОНКИХ ТРУБКАХ

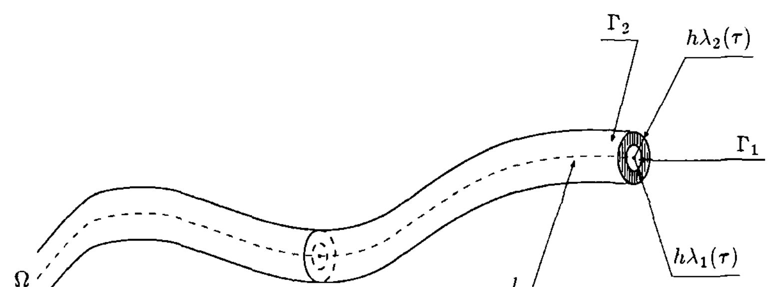
**В. В. Белов, С. Ю. Доброхотов, С. О. Синицын**

В работе построены быстроосциллирующие решения уравнения Шредингера в тонких трубках. Длина волн волновой функции предполагается сравнимой с диаметром трубки. Рассмотрены две задачи: специальная задача Коши и спектральная задача. В первом случае решения описывают движение волновых пакетов по трубке, во втором – стационарные и квазистационарные состояния. Ответ выражается с помощью одномерного канонического оператора Маслова.

## Введение

В нанотехнологии при облучении кристаллов (диэлектриков) жестким рентгеном возникают протяженные структуры. Поперечный размер таких структур имеет порядок нескольких ангстрем (размер атома водорода $r \sim \frac{h^2}{me^2} = 0,5$ Å)[1], – своеобразные "квантовые провода" [27] для передачи информации.

Простейшей моделью такой структуры в трехмерном пространстве $\mathbb{R}^3_x$ является бесконечная тонкая цилиндрическая трубка $\Omega$ с границей $\partial\Omega = \Gamma_1 \cup \Gamma_2$, изображенная на рисунке. Ось трубки – кривая $l$, задаваемая уравнением $x = X(\tau)$, где $x \in \mathbb{R}^3$, $X(\tau)$ – гладкая трехмерная вектор-функция, $\tau$ – *натуральный параметр* ($\tau \in \mathbb{R}$) кривой $l$, т.е. такая координата на $l$, что $|X'(\tau)| = 1$. В простейшем случае сечением трубки является кольцо с внутренним радиусом $h\lambda_1(\tau)$ и внешним радиусом $h\lambda_2(\tau)$, где $\lambda_1(\tau) \sim 1$, $\lambda_2(\tau) \sim 1$, $h$ – малый параметр ($h \ll 1$).




Представляют интерес (см., например, [24–26], [28] и цитируемую там литературу) процессы (как стационарные, так и нестационарные) распространения пучка электронов в таком квантовом канале связи. В одночастичном приближении эти процессы описываются решениями уравнения Шредингера в некомпактной области $\Omega$ с условиями на границе $\partial\Omega$.

В настоящей работе мы изучаем в рамках квазиклассического ($h \to 0$) приближения две следующие задачи (ограничившись условиями Дирихле для упрощения формулировок результатов):

а) начально-краевую задачу для нестационарного уравнения Шредингера во внешнем по-

[1]Здесь $m$ – масса, $e$ – заряд электрона, $h$ – постоянная Планка.

ле $v(x,t)$ с условием Дирихле на границе $\partial\Omega$:

$$ih\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -h^2\Delta\Psi + v(x,t)\Psi, \qquad x\in\Omega, \tag{0.1}$$

$$\Psi|_{t=0} = \Psi_0(x) = \varphi_0(x)e^{\frac{iS^0(x)}{h}}, \tag{0.2}$$

$$\Psi|_{\Gamma_1} = \Psi|_{\Gamma_2} = 0 \tag{0.3}$$

(задача об эволюции быстроосциллирующего пакета с частотой порядка $\frac{1}{h}$, $h\to 0$), где начальная фаза $S^0(x)\in C^\infty(\Omega)$, а амплитуда $\varphi_0(x)\in C^\infty(\Omega)$ имеет компактный носитель $\Omega_0 = \operatorname{supp}\varphi_0$ и $v(x,t)\in C^\infty(\Omega\times\mathbb{R}^1)$.

б) стационарную (спектральную) задачу

$$-h^2\Delta\Psi + v(x)\Psi = E\Psi, \qquad \Psi\in W_2^1(\Omega), \tag{0.4}$$

$$\Psi|_{\Gamma_1} = \Psi|_{\Gamma_2} = 0 \tag{0.5}$$

(задача построения связанных состояний электрона в трубке $\Omega$), где $v(x)\in C^\infty(\Omega)$, $W_2^1(\Omega)$ – пространство Соболева. При этом мы считаем, что характерная длина волны волновой функции $\Psi$ сравнима с поперечным размером трубки.

Существование связанных состояний (при $h=1$), т.е. существование области дискретного спектра задачи (0.4)–(0.5) (в случае $v\equiv 0$), следует из результатов, представленных в работах [24–27] при дополнительных условиях на кривизну поверхности $\partial\Omega$. Там же приведены оценки для числа связанных состояний и при наличии потенциала $v(x)$ специального вида (см., например, [27]).

С другой стороны, в последней задаче (для бесконечной трубки) могут существовать так называемые локализованные квазистационарные состояния [2, 17]. Они могут соответствовать и непрерывным частям спектра. В степенном (по $h$) квазиклассическом приближении квазистационарные состояния и точные связанные состояния мало отличаются по параметру $h$, $h\to 0$. Такие локализованные квазистационарные состояния в *плоском* эквидистантном одномодовом волноводе ($v(x)\equiv 0$) впервые были построены в [11] без предположения, что расстояние между кривыми $\Gamma_1$ и $\Gamma_2$ мало. Трехмерное обобщение такой ситуации возможно, по крайней мере, в двух направлениях: соответствующая геометрическая структура $\Omega\in\mathbb{R}^3$ – либо пленка (трехмерный слой [25]), либо трубка.

Исследованию движения волн в плоских тонких пленках посвящено большое число работ (см., например, [15]). Математическую теорию этих волновых процессов в квазиклассическом приближении при условии, что толщина пленок мала, порядка $h$, $h\ll 1$ (интегральная оптика), можно найти в работах [30, 31]. Интерес к такого рода задачам в трехмерных тонких трубках возник в последнее время в связи с прогрессом в нанотехнологиях [32, 33].

Цель нашей работы – дать строгий вывод явных формул для асимптотических решений задач (0.1)–(0.3) и (0.4)–(0.5) в трехмерных трубках (см. рисунок). Мы строим квазиклассическую асимптотику решения этих задач с помощью канонического оператора Маслова с вещественной фазой [19, 20], рассматривая уравнения (0.1) и (0.4) в тонкой трубке $\Omega$ как одномерные уравнения Шредингера (по переменной $\tau$) с операторнозначным символом, действующим в пространстве функций двух других переменных[1]. Это означает, что оператор Шредингера

$$\widehat{H} = -h^2\Delta_x + v(x,t) \tag{0.6}$$

в области $\Omega$ в подходящей криволинейной системе координат $(\tau, q_1, q_2)$ содержит малый параметр $h$ лишь при производных по переменной $\tau$ (медленной переменной) и не содержит $h$ при производных по быстрым переменным $(q_1, q_2)$.

[1]Эта теория есть строгое математическое обобщение на интегро-дифференциальные (псевдодифференциальные) уравнения адиабатического приближения, или приближения Борна–Оппенгеймера [17], в квантовой механике атомов и молекул (см. также [3]).

## 1. Операторнозначный символ оператора Шредингера в тонкой трубке

Введем в области $\Omega$ ортогональные (нормальные) координаты $(\tau, \tilde q_1, \tilde q_2)$, связанные с кривой $l$:

$$x = X(\tau) + \tilde q_1 \boldsymbol{n}_1(\tau) + \tilde q_2 \boldsymbol{n}_2(\tau), \quad \langle \boldsymbol{n}_1(\tau), \boldsymbol{n}_2(\tau)\rangle = 0, \ \langle \boldsymbol{n}_j(\tau), X'(\tau)\rangle = 0, \ j = 1,2, \tag{1.1}$$

где $\boldsymbol{n}_1(\tau)$ и $\boldsymbol{n}_2(\tau)$ – единичные векторы, образующие с вектором $X'(\tau)$ правую ортонормированную систему. В частности, можно выбрать в качестве $\boldsymbol{n}_1(\tau)$ вектор нормали $\boldsymbol{n}(\tau)$, а в качестве $\boldsymbol{n}_2(\tau)$ – вектор бинормали $\boldsymbol{b}(\tau)$ [16] к кривой $l$ в точке $X(\tau)$.

В этих криволинейных координатах $(\tau, \tilde q_1, \tilde q_2)$ $(\tau \in \mathbb{R},\ h\lambda_1(\tau) \le |\tilde q| \le h\lambda_2(\tau))$ метрический тензор $\|g^{ij}(\tau, \tilde q)\|$, $\tilde q = (\tilde q_1, \tilde q_2)$, $i, j = 1,2,3$ имеет вид

$$\|g^{ij}(\tau,\tilde q)\| = \frac{1}{g}\begin{Vmatrix} 1 & \langle \boldsymbol{n}_{1\tau}, \boldsymbol{n}_2\rangle \tilde q_2 & -\langle \boldsymbol{n}_{1\tau}, \boldsymbol{n}_2\rangle \tilde q_1 \\ \langle \boldsymbol{n}_{1\tau}, \boldsymbol{n}_2\rangle \tilde q_2 & g_{11} - \langle \boldsymbol{n}_{1\tau}, \boldsymbol{n}_2\rangle^2 \tilde q_1^2 & -\langle \boldsymbol{n}_{1\tau}, \boldsymbol{n}_2\rangle^2 \tilde q_1 \tilde q_2 \\ -\langle \boldsymbol{n}_{1\tau}, \boldsymbol{n}_2\rangle \tilde q_1 & -\langle \boldsymbol{n}_{1\tau}, \boldsymbol{n}_2\rangle^2 \tilde q_1 \tilde q_2 & g_{11} - \langle \boldsymbol{n}_{1\tau}, \boldsymbol{n}_2\rangle^2 \tilde q_2^2 \end{Vmatrix},$$

где

$$g_{11} = 1 + \langle \tilde q_1 \boldsymbol{n}_{1\tau} + \tilde q_2 \boldsymbol{n}_{2\tau}\rangle^2 + 2\big(\langle X', \boldsymbol{n}_{1\tau}\rangle \tilde q_1 + \langle X', \boldsymbol{n}_{2\tau}\rangle \tilde q_2\big),$$

$$g = \det\|g_{ij}(\tau,\tilde q)\| = 1 + \sum_{j=1}^{2} \tilde q_j^2\big(\langle \boldsymbol{n}_{j\tau}\rangle^2 - \langle \boldsymbol{n}_{1\tau}, \boldsymbol{n}_2\rangle^2\big) + 2\tilde q_1 \tilde q_2 \langle \boldsymbol{n}_{1\tau}, \boldsymbol{n}_{2\tau}\rangle + 2\big(\langle X', \boldsymbol{n}_{1\tau}\rangle \tilde q_1 + \langle X', \boldsymbol{n}_{2\tau}\rangle \tilde q_2\big),$$

$\boldsymbol{n}_{j\tau}(\tau) = \dfrac{d}{d\tau}\boldsymbol{n}_j(\tau)$, $j = 1, 2$, а оператор Лапласа $\Delta$ определяется формулой

$$\Delta = \frac{1}{\sqrt{g(y)}} \sum_{i,j=1}^{3} \frac{\partial}{\partial y_i}\left(\sqrt{g(y)}\, g^{ij}(y) \frac{\partial}{\partial y_j}\right), \qquad y = (y_1, y_2, y_3) = (\tau, \tilde q_1, \tilde q_2). \tag{1.2}$$

Перейдем теперь в этих формулах к быстрым переменным $q = \dfrac{\tilde q}{h}$ $(q = (q_1, q_2))$ и разложим коэффициенты оператора $\Delta$ (1.2) и потенциал $v\big(X(\tau) + hq_1\boldsymbol{n}_1(\tau) + hq_2\boldsymbol{n}_2(\tau), t\big)$ в ряд Тейлора по степеням малого параметра $h$, $h \to 0$. Тогда с точностью до членов порядка $O(h^2)$, $h \to 0$, оператор Шредингера $\widehat H$ (0.6) примет вид

$$\begin{aligned}\widehat H = \left(-ih\frac{\partial}{\partial \tau}\right)^2 + v\big(X(\tau), t\big) - \Delta_q + (-ih)\cdot 2\varkappa(\tau)\left(-ih\frac{\partial}{\partial \tau}\right)\left(q_2\frac{\partial}{\partial q_1} - q_1\frac{\partial}{\partial q_2}\right) \\ + h\sum_{j=1}^{2} q_j \Big\langle \nabla_x v\big(X(\tau), t\big), \boldsymbol{n}_j(\tau)\Big\rangle - 2h\left(-ih\frac{\partial}{\partial \tau}\right)^2 \sum_{j=1}^{2}\langle X', \boldsymbol{n}_{j\tau}\rangle q_j \\ - h\sum_{j=1}^{2}\langle X', \boldsymbol{n}_{j\tau}\rangle \frac{\partial}{\partial q_j} + O(h^2),\end{aligned} \tag{1.3}$$

где $\Delta_q = \sum\limits_{j=1}^{2} \dfrac{\partial^2}{\partial {q_i}^2}$, а $\varkappa(\tau) = \big\langle \boldsymbol{n}_{1\tau}(\tau), \boldsymbol{n}_2(\tau)\big\rangle$ в силу известных формул Френе [16] есть кручение кривой[2] $l$ в точке $X(\tau)$, если $\boldsymbol{n}_1(\tau)$ – нормаль, а $\boldsymbol{n}_2(\tau)$ – бинормаль.

Оператор $\widehat H$ (1.3) есть функция некоммутирующих операторов $\big(-ih\frac{\partial}{\partial\tau}, \tau\big)$, $(\nabla_q, q)$: $\widehat H = L\big(\tau, q_1, q_2, -ih\frac{\partial}{\partial\tau}, \frac{\partial}{\partial q_1}, \frac{\partial}{\partial q_2}, h\big)$, в которую переменные $\tau$ и $(q_1, q_2)$ входят различным образом:

[2]Поскольку $\big\langle \boldsymbol{n}_{1\tau}(\tau), \boldsymbol{n}_2(\tau)\big\rangle = -\big\langle \boldsymbol{n}_1(\tau), \boldsymbol{n}_{2\tau}(\tau)\big\rangle$ и $\boldsymbol{n}_{2\tau} = -\varkappa \boldsymbol{n}_1$.

малый параметр $h$ содержится лишь при производных по переменной $\tau$. Поэтому $h$-дифференциальный символ оператора $\widehat{H}$ есть оператор $L\big(\tau, q_1, q_2, p, \frac{\partial}{\partial q_1}, \frac{\partial}{\partial q_2}, h\big)$, действующий в пространстве функций, зависящих от $q_1$, $q_2$, и тем самым указанные выше задачи построения квазиклассических асимптотик относятся к классу задач с операторнозначным символом. (Аналогичная ситуация возникает в задачах с быстроосциллирующими коэффициентами, которые подобным же образом сводятся к задаче с операторнозначным символом (см. [9, 10, 12, 13])). Здесь этот символ есть дифференциальный оператор в частных производных по двум переменным в отличие от задач интегральной оптики, где операторнозначный символ есть дифференциальный оператор лишь по одной переменной.

При каждом $\tau \in \mathbb{R}$ обозначим через $B_\tau$ гильбертово пространство суммируемых с квадратом функций пространства $L_2\Big(\widetilde{\Omega}_\tau\Big)$ в кольце $\widetilde{\Omega}_\tau = \big\{q\colon \lambda_1(\tau) \le |q| \le \lambda_2(\tau)\big\}$ и обращающихся в нуль на границе $\partial\widetilde{\Omega}_\tau$. Тогда оператор $H(\tau, p, t, h)\colon B_\tau \to B_\tau$ (зависящий от параметров $(\tau, p, t) \in \mathbb{R}^3$) вида

$$H(\tau,p,t,h) = H(\tau,p,t,0) + hH_1(\tau,p,t) + O(h^2),$$

где

$$H(\tau,p,t,0) = p^2 + v\big(X(\tau),t\big) - \Delta_q = H_0(\tau,p,t), \tag{1.4}$$

$$H_1(\tau,p,t) = 2\varkappa(\tau)p\left(q_2\frac{\partial}{\partial q_1} - q_1\frac{\partial}{\partial q_2}\right) + \sum_{j=1}^{2} q_j\Big\langle \nabla_x v\big(X(\tau),t\big), \boldsymbol{n}_j(\tau)\Big\rangle$$
$$- 2p^2\sum_{j=1}^{2}\langle X', \boldsymbol{n}_{j\tau}\rangle q_j - \sum_{j=1}^{2}\langle X', \boldsymbol{n}_{j\tau}\rangle\frac{\partial}{\partial q_j}, \tag{1.5}$$

называется операторнозначным символом оператора $\widehat{H}$ [19]. При этом оператор $H_0(\tau,p,t)$ – гамильтониан оператора Шредингера $\widehat{H}$ (0.6).

## 2. Термы гамильтониана оператора Шредингера

В конструкции квазиклассических асимптотик уравнений (0.1) и (0.4) с оператором Шредингера $\widehat{H}$ в виде (1.3) существенную роль играют термы – собственные функции и собственные значения гамильтониана $H_0(\tau,p,t)$ $(\tau \in \mathbb{R}^1,\ p \in \mathbb{R}^1)$:

$$H_0(\tau,p,t)\chi(\tau,q) = \lambda(\tau,p,t)\chi(\tau,q), \qquad \chi(\tau,q) \in L_2\Big(\widetilde{\Omega}_\tau\Big), \quad (\tau,p,t) \in \mathbb{R}^3. \tag{2.1}$$

С учетом вида гамильтониана $H_0$ (1.4), очевидно, имеем

$$\lambda(\tau,p,t) = p^2 + v\big(X(\tau),t\big) + \nu(\tau), \tag{2.2}$$

где $\nu(\tau)$ – собственное значение хорошо известной задачи Штурма–Лиувилля для оператора Лапласа в кольце $\widetilde{\Omega}_\tau$ с граничным условием Дирихле

$$-\Delta_q\chi_\nu = \nu(\tau)\chi_\nu, \qquad \chi_\nu\big|_{\partial\widetilde{\Omega}_\tau} = 0, \quad \chi_\nu \in L_2\Big(\widetilde{\Omega}_\tau\Big). \tag{2.3}$$

Ее решение (в полярных координатах $(q_1 = \rho\cos\varphi,\ q_2 = \rho\sin\varphi)$) определяется явными формулами [21]: нормированные собственные функции

$$\chi^{\pm}_{nm}(\tau,\rho,\varphi) = g_{nm}(\tau,\rho)e^{\pm in\varphi} \tag{2.4}$$

отвечают собственным значениям $\nu_{nm}(\tau) = \mu^2_{nm}(\tau)$, $n = 0, 1, 2, \ldots$, $m = 1, 2, 3, \ldots$, где $\mu_{nm}(\tau)$ – положительные корни трансцендентного уравнения

$$J_n\big(\mu\lambda_1(\tau)\big)Y_n\big(\mu\lambda_2(\tau)\big) - J_n\big(\mu\lambda_2(\tau)\big)Y_n\big(\mu\lambda_1(\tau)\big) = 0. \tag{2.5}$$

Здесь $J_n(x)$ и $Y_n(x)$ – функции Бесселя соответственно первого и второго родов $n$-го порядка, $g_{nm}(\tau,\rho) = N_{nm}(\tau)\Big[J_n\big(\mu_{nm}(\tau)\rho\big)Y_n\big(\mu_{nm}(\tau)\lambda_1(\tau)\big) - J_n\big(\mu_{nm}(\tau)\lambda_1(\tau)\big)Y_n\big(\mu_{nm}(\tau)\rho\big)\Big]$, где

$$N_{nm}(\tau) = \frac{\pi\mu^2_{nm}}{2\varepsilon_n}\frac{J^2_n\big(\mu_{nm}\lambda_2(\tau)\big)}{J^2_n\big(\mu_{nm}\lambda_1(\tau)\big) - J^2_n\big(\mu_{nm}\lambda_2(\tau)\big)}$$

– нормировочный множитель, $\varepsilon_n = 1$ при $n = 0$, $\varepsilon_n = 2$ при $n \neq 0$. Очевидно, что кратность терма равна 1 при $n = 0$ и 2 при $n > 0$.

В дальнейшем будем предполагать выполненным следующее условие:

(i) *при фиксированных значениях $n$ и $m$ кратность собственного значения $\nu_{nm}(\tau)$ задачи* (2.3) *не зависит от параметра $\tau \in \mathbb{R}$.*

## 3. Асимптотическое решение начально-краевой задачи

Приведем асимптотическое (с точностью до $O(h^2)$) решение задачи (0.1)-(0.3). Введем одномерный классический гамильтониан

$$H = H_{nm}(\tau, p, t) = p^2 + V^{nm}_{\text{ef}}(\tau, t), \tag{3.1}$$

где $V^{nm}_{\text{ef}}(\tau,t) = v\big(X(\tau), t\big) + \nu_{nm}(\tau)$ – эффективный потенциал. Пусть $\tau = Q(\tau_0, t)$, $p = P(\tau_0, t)$ – однопараметрическое семейство решений на интервале $[0, T]$, $T > 0$, задачи Коши для системы Гамильтона

$$\begin{cases} \dot p = -\dfrac{\partial H}{\partial \tau} = -\Big\langle \nabla_x v\big(X(\tau), t\big), X'(\tau)\Big\rangle - \dfrac{\partial \nu_{nm}(\tau)}{\partial \tau}, & p|_{t=0} = \dfrac{\partial S_0}{\partial \tau}(\tau_0), \\ \dot\tau = \dfrac{\partial H}{\partial p} = 2p, \qquad \tau|_{t=0} = \tau_0, \end{cases} \tag{3.2}$$

где $\tau_0 \in \Omega_0$, $\Omega_0$ – компакт в $\mathbb{R}^1_\tau$, и $S_0(\tau) \in C^\infty\big(\mathbb{R}^1_\tau\big)$.

**Утверждение 1.** *Пусть выполнено условие* (i). *Тогда*

(1) *Если выполнено условие на якобиан*

(ii) $J(\tau_0, t) = \dfrac{\partial Q}{\partial \tau_0}(\tau_0, t) \neq 0$, $t \in [0, T]$, $\tau_0 \in \Omega_0$,

*то для каждой финитной бесконечно дифференцируемой вектор-функции $f_0(\tau) = \big(f^+_0(\tau), f^-_0(\tau)\big)$ с носителем $\Omega_0$ асимптотическое решение задачи Коши* (0.1)-(0.3) *с начальным условием*

$$\Psi|_{t=0} = e^{\frac{i}{h}S_0(\tau)} g_{nm}(\tau,\rho)\Phi_n(\tau,\varphi) \tag{3.3}$$

*(где*

$$\begin{aligned} &\Phi_n(\tau,\varphi) = f^+_0(\tau) + f^-_0(\tau) = f_0(\tau), && n = 0, \\ &\Phi_n(\tau,\varphi) = \sum_{\pm} f^\pm_0(\tau)e^{\pm in\varphi}, && n \geq 1) \end{aligned}$$

*представимо в виде*

$$\Psi_{nm}(\tau,\rho,\varphi,t) = \frac{e^{\frac{i}{h}S_{nm}(\tau,t)}}{\sqrt{J(\tau,t)}} g_{nm}(\tau,\rho)A_{nm}(\tau,t). \tag{3.4}$$

*Здесь*

$$A_{nm}(\tau,t) = f_0\big(\tau_0(\tau,t)\big), \qquad n=0,$$
$$A_{nm}(\tau,t) = \sum_{\pm} f_0^{\pm}\big(\tau_0(\tau,t)\big)e^{\pm in(\varphi-\Delta\theta(\tau,t))}, \qquad n\geq 1, \tag{3.5}$$

$\tau_0(\tau,t)$ *- гладкий корень уравнения* $\tau = Q(\tau_0,t)$, $\tau_0\in\Omega_0$, $t\in[0,T]$, $J(\tau,t) = J\big(\tau_0(\tau,t),t\big)$ *- якобиан*, $S_{nm}(\tau,t)$ *- фаза*,

$$S_{nm}(\tau,t) = \left.\left[S^0(\tau) + \int\limits_0^t \Big(\dot Q^2(\tau_0,t') - v\big(X(Q(\tau_0,t')),t'\big) - \nu_{nm}\big(Q(\tau_0,t')\big)\Big)dt'\right]\right|_{\tau_0=\tau_0(\tau,t)}, \tag{3.6}$$

$\Delta\theta(\tau,t) = \theta(\tau) - \theta\big(\tau_0(\tau,t),t\big)$ *- фазовый сдвиг, где* $\theta(\tau) = \int\limits_{\tau_0^*}^{\tau}\varkappa(\tau')d\tau'$, $\varkappa(\tau)$ *- кручение оси трубки* $l$ *в точке* $X(\tau)$, $\tau_0^*$ *- фиксированная точка на оси;*

(2) *если условие* (ii) *не выполнено, и на траектории* $Q(\tau_0,t) = \tau$, $\tau_0\in\Omega_0$, $t\in[0,T]$, *при некоторых* $t$ *возникают фокальные точки* $\tau^{\mathrm f} = Q\big(\tau_0^{\mathrm f},t\big)$, *т.е. точки, в которых* $\dfrac{\partial Q}{\partial\tau_0}\big(\tau_0^{\mathrm f},t\big) = 0$, *то глобальная* ($\tau\in\mathbb{R}^1$) *асимптотика решения задачи* (0.1)–(0.3) *на интервале* $[0,T]$ *определяется с помощью канонического оператора Маслова с вещественной фазой* [19,20]*:*

$$\Psi_{nm} = e^{i\gamma(t)}\widehat{K}^{\tau_0^*}_{\Lambda_t^1}\left(\sum_{\pm} f_0^{\pm}(\tau_0)g_{nm}(\tau',\rho)e^{\pm in(\varphi+\theta(\tau)-\theta(\tau_0))}\right)(\tau,\rho,\varphi,h,t). \tag{3.7}$$

*Здесь* $\Lambda_t^1$ *получена сдвигом кривой* $\Lambda_0^1 = \left\{p = \dfrac{\partial S^0}{\partial\tau}(\tau),\quad \tau\in\Omega_0\right\}$ *вдоль траекторий системы Гамильтона* (3.2), $\Lambda_t^1 = \Big\{(p,\tau)\colon p = \dot Q(\tau_0,t),\ \tau = Q(\tau_0,t),\quad \tau_0\in\Omega_0\Big\}$*;*

$$\gamma(t) = -\frac{\pi}{2}\operatorname{Ind}\mu(t) + \frac{1}{h}\int\limits_0^t\left(\frac{\dot Q^2(\tau_0^*,t')}{4} - v\Big(X\big(Q(\tau_0^*,t'),t'\big)\Big) - \nu_{nm}\big(Q(\tau_0^*,t')\big)\right)dt',$$

$\mu(t)$ *- индекс Морса для луча* $l_t = \{\tau = Q(\tau_0^*,t'),\ 0\leq t'\leq t\}$, *т.е. число нулей якобиана* $J(\tau_0^*,t') = \dfrac{\partial Q(\tau_0^*,t')}{\partial t'}$ *при* $0<t'<t$, $\tau_0^*\in\Omega_0$ *- фиксированная точка.*

З а м е ч а н и е 1. При $n\geq 1$ коэффициенты $f_0^{\pm}$ в формуле (3.5) для амплитуды волновой функции являются аналогами коэффициентов, определяющих поляризацию электромагнитных волн в электродинамике или поляризацию спина электрона в квантовой теории. Вообще говоря, в асимптотических решениях системы уравнений Максвелла или уравнения Паули эти коэффициенты $(f_0^+, f_0^-) = f$ определяются из системы уравнений, называемых уравнениями поляризации (см., например, [1,5,6]). В данном случае эта система расщепляется, и каждая из функций $f_0^+, f_0^-$ является решением соответствующего скалярного обыкновенного дифференциального уравнения. Динамика квазиклассического волнового пакета $\Psi_{nm}$ (3.4) определяется как классической одномерной гамильтоновой системой (3.2) с эффективным потенциалом $V_{\mathrm{ef}}^{nm}(\tau,t) = v\big(X(\tau),t\big) + \nu_{nm}(\tau)$, так и фазовым сдвигом $\Delta\theta(\tau,t)$ (аналог фазы Берри [22]) в амплитуде решения, зависящим от кручения $\varkappa(\tau)$ оси трубки.

З а м е ч а н и е 2. В частном случае эквидистантной трубки, когда $\lambda_1$ и $\lambda_2$ не зависят от $\tau\in\mathbb{R}$, т.е. $\lambda_j = c_j$, $c_j = \mathrm{const}$, $j = 1,2$, динамика волновых пакетов $\Psi_{nm}$ (3.4) одинакова для всех термов. При этом фаза решения равна $S_{nm}(\tau,t) = S_{00}(\tau,t) + \nu_{nm}(\tau)t$, где $S_{00}(\tau,t)$ – действие, отвечающее эффективному гамильтониану $H_{00}(\tau,p,t) = p^2 + V\bigl(X(\tau),t\bigr)$. В частности, при $v(x) \equiv 0$ гамильтониан $H_{00}$ есть гамильтониан нерелятивистской свободной частицы. Если же трубка $\Omega$ находится, например, в однородном нестационарном поле с напряженностью $E(t)$, направленном без ограничения общности вдоль оси $x_1$: $v(x_1,x_2,x_3,t) = E(t)x_1$, то квантовая динамика волнового пакета в трубке описывается одномерным уравнением Шредингера с эффективным потенциалом $V_{\text{ef}}(\tau,t) = E(t)X_1(\tau)$. Таким образом, мы можем моделировать различные одномерные потенциалы, меняя геометрию оси трубки $l$: $x = X(\tau)$, $\tau \in \mathbb{R}$. Например, если трубка $\Omega$ намотана на цилиндр постоянного радиуса $({x_1}^2+{x_2}^2 = R^2)$, то потенциал $V_{\text{ef}}(\tau,t)$ является периодической функцией $\tau$. Если ее намотать на тор с несоизмеримыми периодами $T_1$ и $T_2$ вдоль образующих тора соответственно, то эффективный потенциал является почти периодической функцией $\tau$. Ясно, что аналогичным способом можно создать одномерные эффективные потенциалы типа одной ямы, двух ям и т.д. Если при этом поле $E(t)$ – периодическая функция времени, то тогда квантовая динамика волнового пакета $\Psi_{nm}$ (3.4) по переменной $\tau$ определяется так называемыми квазиэнергетическими состояниями [4,7,14] соответствующего одномерного уравнения Шредингера с $t$-периодическим потенциалом. Заметим также, что в рассматриваемой ситуации гамильтонова система (3.2) не зависит от типа краевых условий на поверхности трубки (условия Дирихле, условия Неймана или импедансного краевого условия). Они влияют лишь на радиальную часть амплитуды $g_{nm}(\tau,\rho)$ и фазу $S_{nm}(\tau,t)$.

З а м е ч а н и е 3. Утверждение 1 дает решение исходной задачи (0.1)–(0.3) при специальном выборе начальных данных, когда амплитуда $\varphi_0(x)$ из (0.2) имеет вид, указанный в (3.3). Суммируя по $n$ и $m$ функции $g_{nm}(\tau,\rho)\Phi_n(\tau,\varphi)$, можно получить данные в задаче Коши. Тогда возникает вопрос о сходимости (равномерной по $h$, $h \to 0$) рядов по функциям $\Psi_{nm}$ (3.4), который требует отдельного обсуждения.

## 4. Схема вывода формул для асимптотических решений

После того как исходные задачи переписаны в виде уравнений с операторнозначным символом, остается лишь реализовать общую схему и формулы [19] в нашей конкретной ситуации. Для полноты изложения мы кратко повторим эту схему в предположении (ii) (отсутствия фокальных точек).

Вначале рассмотрим случай, когда кратность терма $\nu_{nm}(\tau)$ равна 1, т.е. в формулах (2.4), (2.5) $n = 0$. Зафиксируем $m \in \mathbb{Z}_+$ и обозначим через $\nu_m(\tau) = \mu_{0m}^2(\tau)$ – однократное собственное значение задачи (2.3) и через $\chi_m(\tau) = \chi_{0m}^+(\tau)$ – соответствующую собственную функцию (2.4); $\bigl\langle\chi_m(\tau),\chi_m(\tau)\bigr\rangle = 1$. Здесь и далее скобки $\langle\ ,\ \rangle$ обозначают скалярное произведение функций от $(q_1,q_2) \in \widetilde{\Omega}_\tau$ в пространстве $L_2\Bigl(\widetilde{\Omega}_\tau\Bigr)$.

Асимптотическое решение $\Psi_m(\tau,q,t)$ задачи (0.1)–(0.3) (с точностью до $O(h^2)$ по правой части) в этом случае ищем в виде

$$\Psi_m(\tau,q,t) = e^{\frac{i}{h}S_m(\tau,t)} f_m(\tau,t)\chi_m(\tau,q). \tag{4.1}$$

Подставив (4.1) в (1.3) и в (0.1), получим формулу коммутации с экспонентой

$$\begin{aligned}\Bigl(-ih\frac{\partial}{\partial t} + \widehat{H}\Bigr)\Psi_m(\tau,q,t) &= e^{\frac{i}{h}S_m(\tau,t)}\left\{\left[\frac{\partial S_m}{\partial t} + \left(\frac{\partial S_m}{\partial \tau}\right)^2 + v\bigl(X(\tau),t\bigr) + \nu_m(\tau)\right] f_m\chi_m\right.\\ &+ (-ih)\left[\left(\frac{\partial f_m}{\partial \tau} + 2\frac{\partial S_m}{\partial \tau}\frac{\partial f_m}{\partial \tau} + \frac{\partial^2 S_m}{\partial \tau^2} f_m\right)\chi_m + 2f_m\frac{\partial S_m}{\partial \tau}\frac{\partial \chi_m}{\partial \tau}\right.\\ &\left.\left. + H_1\left(\tau, \frac{\partial S_m}{\partial \tau}, t\right) f_m\chi_m\right]\right\} + O(h^2).\end{aligned}$$

Приравняв к нулю выражения при $h^0$ и $h^1$ и домножив их скалярно на $\chi_m(\tau) \in L_2\Big(\widetilde{\Omega}_\tau\Big)$ с учетом ортонормированности функции $\chi_m(\tau)$, получим уравнение для фазы $S_m(\tau,t)$ (уравнение Гамильтона–Якоби)

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \left(\frac{\partial S}{\partial \tau}\right)^2 + v\big(X(\tau),t\big) + \nu_m(\tau) = 0 \tag{4.2}$$

(здесь и далее индекс $m$ у решений $S_m(\tau,t)$ и $f_m(\tau,t)$ может быть опущен) и уравнение для амплитуды $f_m(\tau,t)$ (уравнение переноса)

$$\frac{\partial f}{\partial t} + 2\frac{\partial S}{\partial \tau}\frac{\partial f}{\partial \tau} + \frac{\partial^2 S}{\partial \tau^2} f + \left\langle \chi_m(\tau), H_1\left(\tau, \frac{\partial S}{\partial \tau}, t\right)\chi_m(\tau)\right\rangle f = 0. \tag{4.3}$$

Из вида оператора $H_1\left(\tau, \dfrac{\partial S}{\partial \tau}, t\right)$ (1.5) с учетом того, что $\chi_m(\tau,\rho)$ не зависит от $\varphi$, следует, что $\left\langle \chi_m(\tau), H_1\left(\tau, \dfrac{\partial S}{\partial \tau}, t\right)\chi_m(\tau)\right\rangle = 0$.

Пусть теперь $n \geq 1$ (кратность терма $\nu_{nm}(\tau)$ равна 2). Тогда анзац решения задачи (0.1)–(0.3) имеет вид

$$\Psi_{nm}(\tau,q,t) = e^{\frac{i}{h}S_{nm}(\tau,t)}\big(f^+_{nm}(\tau,t)\chi^+_{nm}(\tau) + f^-_{nm}(\tau,t)\chi^-_{nm}(\tau)\big), \tag{4.4}$$

где $S_{nm}(\tau,t)$ – решение уравнения Гамильтона–Якоби (4.2) с эффективным потенциалом $v\big(X(\tau),t\big) + \nu_{nm}(\tau)$. Проведя выкладки, аналогичные случаю $n=0$, с учетом ортогональности $\big\langle \chi_{nm}(\tau), \chi_{n'm'}(\tau)\big\rangle = \delta_{nn'}\delta_{mm'}$, $\tau \in \mathbb{R}$, для вектор-функции амплитуд $f_{nm} = {}^t(f^+_{nm}, f^-_{nm}) = f$, получим следующее уравнение (уравнение поляризации [30])

$$\frac{\partial f}{\partial t} + 2\frac{\partial S}{\partial \tau}\frac{\partial f}{\partial \tau} + \frac{\partial^2 S}{\partial \tau^2} f + M^{(nm)}(\tau,t) f = 0, \tag{4.5}$$

где $M^{(nm)}(\tau,t) = \left(\left\langle \chi^\pm_{nm}(\tau), H_1\left(\tau, \dfrac{\partial S}{\partial \tau}, t\right)\chi^\pm_{nm}(\tau)\right\rangle\right)$ – матрица поляризации порядка $2 \times 2$. Поскольку $\langle \chi^\pm_{nm}, q_j\chi^\pm_{nm}\rangle = 0$, $\left\langle \chi^\pm_{nm}, \dfrac{\partial}{\partial q_j}\chi^\pm_{nm}\right\rangle = 0$, $j = 1,\ 2$, то матрица поляризации с учетом формулы (1.5) имеет вид

$$M^{(nm)}(\tau,t) = \varkappa(\tau)\frac{\partial S_{nm}}{\partial \tau}\left(\left\langle \chi^\pm_{nm}(\tau), \left(q_2\frac{\partial}{\partial q_1} - q_1\frac{\partial}{\partial q_2}\right)\chi^\pm_{nm}(\tau)\right\rangle\right), \tag{4.6}$$

где, напомним, $S_{nm}(\tau,t)$ – решение уравнения Гамильтона–Якоби (4.2), отвечающее терму $\nu_{nm}(\tau)$.

Оператор $\hat{L} = q_1\dfrac{\partial}{\partial q_2} - q_2\dfrac{\partial}{\partial q_1}$, т.е. оператор проекции углового момента электрона на мгновенную ось вдоль вектора $X'(\tau)$, в полярных координатах $(\rho,\varphi)$ имеет вид $\hat{L} = \dfrac{\partial}{\partial \varphi}$. Отсюда и из (4.6) с учетом формулы (2.4) для $\chi^\pm_{nm}(\tau)$ окончательно получим

$$M^{(nm)}(\tau,t) = in\varkappa(\tau)\frac{\partial S_{nm}}{\partial \tau}(\tau,t)\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}, \tag{4.7}$$

и, следовательно, система (4.5) сводится к двум скалярным уравнениям.

## 5. Связанные состояния. Асимптотические собственные значения

Пусть потенциал $v$ не зависит от $t$, т.е. $v = v(x)$ и эффективный потенциал $v(X(\tau))+\nu_{nm}(\tau)$ имеет устойчивую точку минимума $\tau_0$. Положим $E_0 = v(X(\tau_0))+\nu_{nm}(\tau_0)$. Тогда этой точке отвечает семейство замкнутых фазовых кривых системы Гамильтона (3.2) $\Lambda^1(E) = \Big\{H_{nm} = p^2 + v(X(\tau)) + \nu_{nm}(\tau) = E\Big\}$ при $E \in (E_0 - \varepsilon, E_0 + \varepsilon)$, где $\varepsilon > 0$ – значение функции $v(X)$ в точке максимума, ближайшей к $X_0 = X(\tau_0)$. Эти кривые удобно параметризовать переменной действия

$$I = I_{mn}(E) = \frac{1}{2\pi}\oint\limits_{\Lambda^1(E)} p\,d\tau = \frac{1}{4\pi}\int\limits_0^{T(E)} \dot{Q}^2(t', E)\,dt', \tag{5.1}$$

где $T(E)$ – период кривой $\Lambda^1(E)$. Обращая эту функцию, найдем гамильтониан $H_{nm}$ как функцию действия:

$$\widetilde{H}_{nm}(I) = {I_{nm}}^{-1}(I), \qquad I_+ \le I \le I_-, \quad I_\pm = I_{nm}(E_0 \pm \varepsilon).$$

Правило квантования Бора–Зоммерфельда [19, 20] кривой $\Lambda^1(I)$ определяет последовательность чисел $I^k_{nm}(h) \in (I_+, I_-)$ (квантованные значения переменной действия):

$$I^k_{nm}(h) = \frac{1}{2\pi}\oint\limits_{\Lambda^1(I)} p\,d\tau = h(k+1/2), \qquad k \in \mathbb{N}. \tag{5.2}$$

**Утверждение 2.** *Числа*

$$E^{(k)}_{nm}(h) = \widetilde{H}_{nm}\big(h(k+1/2)\big) \tag{5.3}$$

*и функции*

$$\Psi^{(k,\pm)}_{nm}(\tau,\rho,\varphi,h) = g_{nm}(\tau,\rho,\varphi)e^{\pm in(\varphi-\theta(\tau))}\Big(\widehat{K}^{\alpha_0^*}_{\Lambda^1(I^k_{nm})}\cdot 1\Big)(\tau,h), \tag{5.4}$$

*где $\widehat{K}^{\alpha_0^*}_{\Lambda^1(I^k_{nm})}$ – канонический оператор Маслова* [19, 20] *на кривой $\Lambda^1(I^k_{nm})$, являются асимптотическим (с точностью до $O(h^2)$) решением (спектральной серией) задачи* (0.4)-(0.5).

Поскольку $\Big\|\Psi^{(k,\pm)}_{nm}\Big\|_{L_2(\Omega)} = 1 + O(h)$, то расстояние между спектром задачи (0.4)-(0.5) и любым числом $E^{(k)}_{nm}(h)$ равно $O(h^2)$. Если спектр этой задачи на промежутке $(E_0-\varepsilon, E_0+\varepsilon)$ дискретный, то тем самым $E^{(k)}_{nm}(h)$ дают асимптотику собственных значений. Если на этом промежутке спектр непрерывен, то числа $E^{(k)}_{nm}(h)$, по-видимому, приближают экспоненциально малые по параметру $h$ зоны спектра (ср. с [18, гл. 6, §55, пример 3] и [23, 29]). Отметим также, что квазиклассические уровни энергии не зависят от фазового множителя (аналога фазы Берри), и при $n \ge 1$ построенные асимптотические собственные значения оказываются двукратно вырожденными (этому факту отвечают знаки $\pm$ в формулах для собственных функций). Эта зависимость в квазиклассическом спектре задачи, по-видимому, появится в следующем приближении по $h \to 0$ (в поправках порядка $h^2$): произойдет расщепление соответствующих значений.

## 6. Благодарности

Авторы благодарят В. А. Гейлера, Л. А. Чернозатонского и П. Экснера (P. Exner), привлекших наше внимание к рассмотренным задачам.

Поступила 30.10.02

## СПИСОК ЦИТИРОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ


1. **Бабич В.М., Булдырев В.С., Молотков И.А.** Пространственно-временной лучевой метод. Л., 1985. 120 с.
2. **Базь А.М., Зельдович Я.Б., Переломов А.М.** Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской механике. М.: Наука, 1971. 370 с.
3. **Белов В.В.** Квазиклассические уровни энергии двухатомной молекулы в магнитном поле // Изв. вузов. Математика. 1976. № 6. С. 13–18.
4. **Белов В.В., Баранов В.А.** Квазиклассические квазиэнергетические состояния для одномерного уравнения Шредингера // Изв. вузов. Физика. 1999. № 10. С. 30–36.
5. **Белов В.В., Маслов В.П.** Квазиклассические траекторно-когерентные состояния в квантовой механике с калибровочными полями // Докл. АН СССР. 1990. Т. 311, № 4. С. 849–853.
6. **Белов В.В., Маслов В.П.** Квазиклассические траекторно-когерентные состояния для уравнения Дирака с аномальным взаимодействием Паули // Докл. АН СССР. 1989. Т. 305, № 3. С. 764–780.
7. **Белов В.В., Рогова А.М., Трифонов А.Ю.** Квазиэнергетические состояния и равномерные по времени асимптотики // Изв. вузов. Физика. 1999. № 7. С. 24–30.
8. **Березин, Ф.А., Шубин, М.А.** Уравнение Шредингера. М.: Изд-во МГУ, 1983. 392 с.
9. **Буслаев В.С.** Квазиклассическое приближение для уравнений с периодическими коэффициентами // Успехи мат. наук. 1987. Т. 42, № 6. С. 77–98.
10. **Буслаев В.С.** Адиабатическое возмущение периодического потенциала // Теорет. и мат. физика. 1984. Т. 58, № 2. С. 233–243.
11. **Воробьев Е.М., Маслов В.П.** Об одномодовых открытых резонаторах // Докл. АН СССР. 1968. Т. 179, № 10. С. 558–561.
12. **Доброхотов С.Ю.** Приложение теории Маслова к двум уравнениям с операторнозначным символом // Успехи мат. наук. 1984. Т. 39, № 4. С. 125.
13. **Доброхотов С.Ю.** Резонансы в асимптотике решения задачи Коши для уравнения Шредингера с быстроосциллирующим конечнозонным потенциалом // Мат. заметки. 1988. Т. 44, № 3. С. 319–340.
14. **Зельдович Я.Б.** Квазиэнергия квантовой системы, подвергающаяся периодическому воздействию // Журн. эксперимент. и теорет. физики. 1966. Т. 51, вып. 5. С. 1492–1495.
15. Интегральная оптика / Под ред. Т. Тамира. М.: Мир. 1978. 344 с.
16. **Корн Г., Корн Т.** Справочник по математике. М.: Наука, 1968. 720 с.
17. **Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.** Квантовая механика. М.: Наука, 1998.
18. **Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П.** Статистическая физика. Часть 2. М.: Наука, 1978. 448 с.
19. **Маслов В.П.** Теория возмущений и асимптотические методы. М.: МГУ, 1965. 549 с.
20. **Маслов В.П., Федорюк М.В.** Квазиклассическое приближение для уравнений квантовой механики. М.: Наука, 1976. 296 с.
21. **Полянин А.Д.** Справочник по линейным уравнениям математической физики. М.: Физ.-мат. лит. 2001. 576 с.
22. **Berry M.V.** Quantum phase factors accompanying adiabatic changes // Proc. Roy. Soc. London. 1984. Vol. A392, № 1802. P. 45–48.
23. **Brüning J., Dobrokhotov S.Yu., Pankrashkin K.V.** The spectral asymptotics of the strong magnetic field. I // Russ. J. Math. Phys. 2002. Vol. 9, № 1. P. 14–49.
24. **Duclos P., Exner P.** Curvature-induced bound states in quantum waveguides in two and three dimensions // Rev. Math. Phys. 1995. Vol. 7. P. 73–102.
25. **Duclos P., Exner P., Krejčiřík D.** Bound states in curved quantum layers // Commun. Math. Phys. 2001. Vol. 223. P. 13–28.
26. **Duclos P., Exner P., Krejčiřík D.** Locally curved quantum layers // Ukrainian J. Phys. 2000. Vol. 45. P. 595–601.
27. **Exner P.** A quantum pipette // J. Math. Phys. 1995. Vol. A28. P. 5323–5330.
28. **Entin M.V., Magarill L.I.** Electrons in a twisted quantum wire // Phys. Rev. B. 2002. Vol. 66. 205308.
29. **Helffer, B.** Semi-classical analysis for the Schrödinger operator and applications // Lect. Notes Math. 1988. Vol. 1336. 107 p.
30. **Maslov V.P.** Mathematical aspects of integral optics. M.: MIEM, 1983. 130 p.

31. **Maslov V.P.** Mathematical aspects of integral optics // Russ. J. Math. Phys. 2001. Vol. 8, № 2. P. 180–238.

32. **Prinz V.Ya., Golod S.V., Mashanov V.I., Gutakovsky A.K.** // Inst. Phys. Conf. Ser. 2000. Vol. 166. P. 203–206..

33. **Prinz V.Ya., Grutzmacher D., Beyer A., David C., Ketterer B., Deckardt E.** // Nanotechnology. 2001. 12. P. 399–402.