Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Ю. П. Чубурин, Об аппроксимации “пленочного” оператора Шредингера “кристаллическим”, *Матем. заметки*, 1997, том 62, выпуск 5, 773–781

DOI: <https://doi.org/10.4213/mzm1663>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.157.27.8

26 апреля 2023 г., 08:24:27

УДК 517.984.56

ОБ АППРОКСИМАЦИИ “ПЛЕНОЧНОГО” ОПЕРАТОРА ШРЁДИНГЕРА “КРИСТАЛЛИЧЕСКИМ”

Ю. П. Чубурин

Пусть $V(x)$ – периодический по переменным x_1, x_2 и экспоненциально убывающий при $|x_3| \rightarrow \infty$ потенциал, $V_N(x)$ – сумма сдвигов $V(x - (0, 0, Nn_3))$ по всем целым n_3 . Показано, что спектр и собственные функции (не только в классе L^2) оператора Шрёдингера с потенциалом V_N , рассматриваемого в ячейке, аппроксимируют при $N \rightarrow \infty$ спектр и собственные функции оператора с потенциалом V , причем для отрицательной части спектра – с экспоненциальной по N скоростью.

Библиография: 10 названий.

Пусть $V(x)$, $x = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$ – вещественная измеримая периодическая по переменным x_1, x_2 с периодом 1 функция (потенциал), удовлетворяющая оценке

$$|V(x)| \leq Ce^{-a|x_3|}, \quad a > 0, \quad x \in \mathbb{R}^3.$$

Положим

$$V_N(x) = \sum_{n_3=-\infty}^{\infty} V(x - (0, 0, Nn_3)), \quad N = 1, 2, \dots;$$

данная функция является периодической также и по переменной x_3 с периодом N . Назовем функцию, определенную на числовой оси, *блоховской*, если для некоторого $T > 0$ выполнено равенство

$$\varphi(t + nT) = e^{iknT} \varphi(t), \quad t \in \mathbb{R}, \quad n \in \mathbb{Z},$$

где k – некоторое вещественное число (квазиимпульс), можно считать, что $k \in [-\pi/T, \pi/T]$. Сужения таких функций на промежутки $[0, T)$ также будем называть блоховскими функциями. Введем в рассмотрение операторы Шрёдингера вида

$$H_0(k_{\parallel}) = -\Delta, \quad H(k_{\parallel}) = -\Delta + V(x), \quad H_N(k_{\parallel}) = -\Delta + V_N(x),$$

определяемые на (достаточно гладких) блоховских по переменным x_1, x_2 функциях из $L^2(\Omega)$, где $\Omega = [0, 1]^2 \times \mathbb{R}$, $k_{\parallel} = (k_1, k_2) \in [-\pi, \pi)^2$. О такого рода операторах см. в [1]–[3]. (Операторы $H_0(k_{\parallel})$, $H_N(k_{\parallel})$, $H(k_{\parallel})$ являются операторами энергии электрона соответственно в пустом пространстве и в ситуациях бесконечного кристалла и кристаллической пленки.)

Цель работы – показать, что при $N \rightarrow \infty$ спектр и собственные функции (не только в классе $L^2(\Omega)$) оператора $H_N(k_{\parallel})$ неограниченно приближаются к спектру и собственным функциям оператора $H(k_{\parallel})$. (Это, в принципе, может служить основанием использования при “пленочных” расчетах вместо пленки более простого объекта – бесконечного кристалла. Заметим, что в одномерном случае рассмотрение в схожей ситуации отрицательных участков спектра [4] позволяет обосновать метод “сильной связи”).

Через $\sigma(A)$ будем обозначать спектр оператора A . Заметим, что существенный спектр оператора $H(k_{\parallel})$ совпадает с $\sigma(H_0(k_{\parallel})) = [k_{\parallel}^2, \infty)$ [5], а число его собственных значений в промежутке $(-\infty, k_{\parallel}^2)$ конечно [6]. Символ $\rho(x, X)$ означает в работе расстояние от точки x до множества X , а символ $\chi_X(x)$ – характеристическую функцию множества X .

Согласно [1], [2] для любого $E_N \in \sigma(H_N(k_{\parallel}))$ существует блоховское по всем переменным ненулевое решение уравнения Шрёдингера

$$(-\Delta + V_N(x))\psi_N = E_N\psi_N. \quad (1)$$

Положим $\omega_N = [0, 1)^2 \times [-N/2 - 2\delta, N/2 + 2\delta]$, где $\delta > 0$ выбрано произвольно. Будем предполагать, что

$$\|\psi_N\|_{L^2(\omega_N)} = 1. \quad (2)$$

ТЕОРЕМА 1. *Множество собственных значений оператора $H(k_{\parallel})$ состоит из пределов всевозможных сходящихся последовательностей чисел $E_N \in \sigma(H_N(k_{\parallel}))$ и только из них. Для данного $k_{\parallel}$ существуют $C, a > 0$ такие, что в случае*

$$\lim_{N \rightarrow \infty} E_N < k_{\parallel}^2$$

начиная с некоторого N справедливо неравенство

$$\rho(E_N, \sigma(H(k_{\parallel})) \cap (-\infty, k_{\parallel}^2)) \leq C e^{-aN}. \quad (3)$$

При этом с точностью до перехода к последовательности

$$\|\chi_{[-N/2, N/2]}(x_3)\psi_N(x) - \psi(x)\|_{L^2(\Omega)} \rightarrow 0, \quad N \rightarrow \infty, \quad (4)$$

где ψ – ненулевое решение уравнения

$$(-\Delta + V(x))\psi = E\psi. \quad (5)$$

Имеет место оценка

$$|\chi_{[-N/2, N/2]}(x_3)\psi_N(x)| \leq C_1 e^{-a_1|x_3|}, \quad x \in \Omega, \quad (6)$$

где константы $C_1, a_1 > 0$ не зависят от N .

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Легко видеть, что имеет место сильная резольвентная сходимость $H_N(k_{\parallel}) \rightarrow H(k_{\parallel})$, $N \rightarrow \infty$ [7], так что если $E \in \sigma(H(k_{\parallel}))$, то существуют $E_N \in \sigma(H_N(k_{\parallel}))$ такие, что

$$\lim_{N \rightarrow \infty} E_N = E$$

(см. [7]). Обратное утверждение о принадлежности $\lim_{N \rightarrow \infty} E_N$ множеству $\sigma(H(k_{\parallel}))$ нетривиально лишь для $E < k_{\parallel}^2$; оно будет следовать из неравенства (3).

Обозначим через $\Gamma(x - y, k_{\parallel}, E)$, где $E < k_{\parallel}^2$, ядро резольвенты оператора $H_0(k_{\parallel})$; функция

$$\Gamma(x, k_{\parallel}, E) = - \sum_{n_{\parallel} \in \mathbb{Z}^2} \frac{\exp(i(k_{\parallel} + 2\pi n_{\parallel}, \sqrt{E - (k_{\parallel} + 2\pi n_{\parallel})^2}, (x_{\parallel}, |x_3|))}{2i\sqrt{E - (k_{\parallel} + 2\pi n_{\parallel})^2}}, \quad (7)$$

где $\text{Im} \sqrt{E - (k_{\parallel} + 2\pi n_{\parallel})^2} > 0$, принадлежит $L^2(\Omega)$ и аналитически зависит от E как $L^2(\Omega)$ -значная функция (см. [5], [8]). Пусть $\eta_N \in C^\infty(\mathbb{R})$, $N = 1, 2, \dots$, — последовательность функций таких, что

$$\eta_N(x_3) = \begin{cases} 1 & \text{для } |x_3| \leq N/2 + \delta/3, \\ 0 & \text{для } |x_3| \geq N/2 + 2\delta/3, \end{cases}$$

и, кроме того, значения функций $\eta_N(x_3 + N)$, $\eta_N(x_3 - N)$ в промежутках соответственно $[0, \delta]$, $[-\delta, 0]$ не зависят от N (здесь δ то же, что и в определении множества ω_N). Имеем (ср. с рассуждением в [9])

$$(-\Delta - E_N)(\eta_N(x_3)\psi_N(x)) = -2\eta'_N(x_3)\frac{\partial\psi_N(x)}{\partial x_3} - \eta''_N(x_3)\psi_N(x) - V_N(x)\eta_N(x_3)\psi(x),$$

откуда

$$\begin{aligned} \eta_N(x_3)\psi_N(x) = & - \int_{\Omega} \Gamma(x - y, k_{\parallel}, E_N) \\ & \times \left(-2\eta'_N(y_3)\frac{\partial\psi_N(y)}{\partial y_3} - \eta''_N(y)\psi_N(y) - V_N(y)\eta_N(y_3)\psi_N(y) \right) dy. \end{aligned} \quad (8)$$

Можно считать, пользуясь равномерной по N ограниченностью в $L^2(\Omega)$ функций, находящихся под знаком интеграла, и переходя, вообще говоря, к подпоследовательности, что имеет место слабая сходимость

$$\begin{aligned} \eta_N(x_3)\psi_N(x) & \rightarrow \psi(x) \in L^2(\Omega), & V_N(x)\eta_N(x_3)\psi_N(x) & \rightarrow V(x)\psi(x), \\ \eta''_N(x_3)\psi_N(x) & \rightarrow 0, & \eta'_N(x_3)\frac{\partial\psi_N(x)}{\partial x_3} & \rightarrow 0, \end{aligned} \quad N \rightarrow \infty \quad (9)$$

(по поводу равномерной ограниченности норм $\|\partial\psi_N(x)/\partial x_3\|_{L^2(\{N/2 \leq |x_3| \leq N/2 + \delta\})}$ см. [10, гл. 2]). В силу указанных выше свойств функции $\Gamma(x, k_{\parallel}, E)$ выражение в правой

части (8), представляющее собой скалярное произведение в $L^2(\Omega)$, имеет поточечный предел. Переходя в (8) к пределу с использованием (9), получаем равенство

$$\psi(x) = - \int_{\Omega} \Gamma(x-y, k_{\parallel}, E) V(y) \psi(y) dy.$$

Имеем соотношение, аналогичное (8):

$$\begin{aligned} \eta_N(x_3) \psi_N(x - (0, 0, N/2)) = & - \int_{\Omega} \Gamma(x-y, k_{\parallel}, E_N) \left(-2\eta'_N(y_3) \frac{\partial \psi_N(y - (0, 0, N/2))}{\partial y_3} \right. \\ & \left. - \eta''_N(y_3) \psi_N(y - (0, 0, N/2)) - V_N(y - (0, 0, N/2)) \eta_N(y_3) \psi_N(y - (0, 0, N/2)) \right) dy. \end{aligned} \quad (10)$$

В силу (2) и блоховости функции ψ_N по переменной x_3 , нормы

$$\|\psi_N(x - (0, 0, N/2))\|_{L^2(\omega_N)},$$

а значит, и

$$\left\| \frac{\partial \psi_N(x - (0, 0, N/2))}{\partial x_3} \right\|_{L^2(\{N/2 \leq |x_3| \leq N/2 + \delta\})}$$

равномерно по N ограничены. Вследствие оценок [10, гл. 2] равномерно ограничены также нормы

$$\|\psi_N(x - (0, 0, N/2))\|_{L^\infty(\omega_N)};$$

так что модуль последнего слагаемого в сумме, находящейся под знаком интеграла в правой части (10), оценивается сверху выражением вида

$$A(\exp(a(x_3 - N/2)) + \exp(-a(x_3 + N/2))),$$

где $A, a > 0$, $|x_3| \leq N/2 + \delta$. Очевидно, что такого рода оценке удовлетворяют два других слагаемых в указанной сумме, являющиеся финитными функциями по переменной x_3 . Используя оценки из [5], а также периодичность функции $|\psi_N|$ по переменной x_3 , получим для $|x_3| \leq N/2$ неравенство

$$\begin{aligned} |\psi_N(x - (0, 0, N/2))| &= |\psi_N(x + (0, 0, N/2))| \\ &\leq C(\exp(a_1(x_3 - N/2)) + \exp(-a_1(x_3 + N/2))), \end{aligned}$$

где константы $C, a_1 > 0$ не зависят от N и $E \leq k_{\parallel}^2 - \varepsilon$ для произвольного $\varepsilon > 0$. Отсюда вытекает оценка (6) с $C_1 = 2C$.

Вследствие (6), доказанной ранее поточечной сходимости

$$\chi_{[-N/2, N/2]}(x_3) \psi_N(x) \rightarrow \psi(x), \quad N \rightarrow \infty,$$

и теоремы Лебега имеет место соотношение (4). При этом из условия нормировки (2) следует, что $\psi \neq 0$.

Осталось доказать (3). Пусть $E_N \in \sigma(H_N(k_{\parallel})) \cap (-\infty, k_{\parallel}^2)$. Выберем функцию φ_N с единичной нормой из области определения оператора $H_N(k_{\parallel})$. Положим $R(k_{\parallel}, E) =$

$(H(k_{\parallel}) - E)^{-1}$. Будем предполагать, что $E_N \notin \sigma(H(k_{\parallel}))$, иначе доказывать нечего. Имеем

$$\begin{aligned} 1 &= \|\varphi_N\|_{L^2(\Omega)} = \|R(k_{\parallel}, E_N)(H(k_{\parallel}) - E_N)\varphi_N\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq \|R(k_{\parallel}, E_N)\| \cdot \|(H(k_{\parallel}) - E_N)\varphi_N\|_{L^2(\Omega)}. \end{aligned}$$

Отсюда

$$\rho(E_N, \sigma(H(k_{\parallel}))) = \frac{1}{\|R(k_{\parallel}, E_N)\|} \leq \|(H(k_{\parallel}) - E_N)\varphi_N\|_{L^2(\Omega)}. \quad (11)$$

Пусть ψ_N – решение уравнения Шрёдингера (1), удовлетворяющее (2). Положим

$$\varphi_N(x) = C_N \eta_N(x_3) \psi_N(x),$$

где C_N – нормировочная константа. Очевидно, что модули C_N равномерно ограничены. Имеем

$$\begin{aligned} &(H(k_{\parallel}) - E_N)\varphi_N \\ &= C_N \left(\eta_N(x_3)(V(x) - V_N(x))\psi_N(x) - 2\eta'_N(x_3)\frac{\partial\psi_N(x)}{\partial x_3} - \eta''_N(x_3)\psi_N(x) \right). \end{aligned} \quad (12)$$

Из оценки (6) в силу периодичности функций $|\psi_N|$ по x_3 следует, что в δ -окрестностях точек $\pm N/2$ функции $\psi_N(x)$, а согласно [10] также и функции $\partial\psi_N(x)/\partial x_3$ равномерно по x и $E \leq k_{\parallel}^2 - \varepsilon$ ограничены по модулю величиной вида $B \exp(-bN)$, где константы $B, b > 0$ не зависят от N . Отсюда вследствие (12), равномерной ограниченности функций ψ_N и экспоненциального по N убывания функций $V(x) - V_N(x)$ равномерно по $x_3 \in [-N/2 - \delta, N/2 + \delta]$ вытекает неравенство

$$\|(H(k_{\parallel}) - E_N)\varphi_N\|_{L^2(\Omega)} \leq C e^{-aN},$$

где константы $C, a > 0$ от N не зависят. В сочетании с (11) это доказывает (3). Теорема 1 доказана.

ЗАМЕЧАНИЕ 1. Из приведенных в доказательстве теоремы 1 оценок следует, что для любого $\varepsilon > 0$ существуют константы $C, a > 0$ такие, что для любого N множество $\sigma(H_N(k_{\parallel}) \cap (-\infty, k_{\parallel}^2 - \varepsilon))$ содержится в ε_N -окрестности (конечного) множества $\sigma(H(k_{\parallel}) \cap (-\infty, k_{\parallel}^2))$, где $\varepsilon_N = C \exp(-aN)$.

ЗАМЕЧАНИЕ 2. Из теоремы 1 вытекает, что если $E < k_{\parallel}^2$ – собственное значение оператора $H(k_{\parallel})$ кратности 1, то соответствующая собственная функция $\psi(x, k_{\parallel})$ является пределом в $L^2(\Omega)$ функций $\chi_{[-N/2, N/2]}(x_3)\psi_N(x, k_{\parallel})$, где $\psi_N(x, k_{\parallel})$ – некоторые собственные функции операторов $H_N(k_{\parallel})$, отвечающие собственным значениям $E_N \rightarrow E$, $N \rightarrow \infty$. Пусть теперь $E < k_{\parallel}^2$ – собственное значение кратности $m > 1$, $\psi_{\alpha}(x, k_{\parallel})$, $\alpha = 1, \dots, m$, – отвечающие ему собственные функции. Из результатов теории возмущений [1] вытекает, что для $\tilde{k}_1$ из некоторой окрестности точки k_1 собственные значения оператора $H(\tilde{k}_1, k_2)$, находящиеся в достаточно малой окрестности точки E , описываются функциями $E_{\alpha}(\tilde{k}_1, k_2)$, $\alpha = 1, \dots, m$, аналитически зависящими от $\tilde{k}_1$, причем соответствующие собственные функции $\psi_{\alpha}(x, (\tilde{k}_1, k_2))$ также можно считать аналитически зависящими от $\tilde{k}_1$ (как $L^2(\Omega)$ -значные функции). Предположим, что функции

$E_\alpha(\tilde{k}_1, k_2)$ попарно не совпадают. Тогда, как легко видеть, для произвольной последовательности $\{k_1^{(n)}\} \subseteq (-\pi, \pi)$ такой, что $\lim_{n \rightarrow \infty} k_1^{(n)} = k_1$, а числа $E_\alpha(k_1^{(n)}, k_2)$ попарно не равны, существуют собственные функции $\psi_{N_n}^{(\alpha)}(x, (k_1^{(n)}, k_2))$ операторов $H_{N_n}(k_1^{(n)}, k_2)$, отвечающие некоторым их собственным значениям $E_{N_n}^{(\alpha)} \rightarrow E$ ($n \rightarrow \infty$), такие, что

$$\chi_{[-N_n/2, N_n/2]}(x_3) \psi_{N_n}^{(\alpha)}(x, (k_1^{(n)}, k_2)) \rightarrow \psi_\alpha(x, k_\parallel)$$

в $L^2(\Omega)$ при $n \rightarrow \infty$ для всех $\alpha = 1, \dots, m$.

Рассмотрим теперь случай $E > k_\parallel^2$. Вследствие теоремы 1 найдется последовательность $E_N \in \sigma(H_N(k_\parallel))$ такая, что $E_N \rightarrow E$ при $N \rightarrow \infty$. Пусть $\psi_N \neq 0$, $N = 1, 2, \dots$, – решения уравнения Шрёдингера (1). Определим нормировку функций ψ_N , для чего потребуются некоторые предварительные рассуждения. В дальнейшем предполагается, что рассматриваемые значения E, E_N не совпадают с $(k_\parallel + 2\pi n_\parallel)^2$, $n_\parallel \in \mathbb{Z}^2$. Для таких E рассмотрение функций $\Gamma(x, k_\parallel, E)$ согласно (7) имеет смысл, причем в равенстве

$$\Gamma(x, k_\parallel, E) = - \sum_{\substack{n_\parallel \in \mathbb{Z}^2: \\ E - (k_\parallel + 2\pi n_\parallel)^2 > 0}} - \sum_{\substack{n_\parallel \in \mathbb{Z}^2: \\ E - (k_\parallel + 2\pi n_\parallel)^2 < 0}} = \Gamma^{(1)}(x, k_\parallel, E) + \Gamma^{(2)}(x, k_\parallel, E) \quad (13)$$

имеем $\Gamma^{(1)} \in L^\infty(\Omega)$, $\Gamma^{(2)} \in L^2(\Omega)$ (см. подробнее [8]). Имеет место равенство

$$\eta_N(x_3) \psi_N(x) = \psi_0^{(N)}(x) - \int_\Omega \Gamma(x - y, k_\parallel, E_N) \left(-2\eta'_N(y_3) \frac{\partial \psi_N(y)}{\partial y_3} - \eta''_N(y_3) \psi_N(y) + V_N(y) \eta_N(y_3) \psi_N(y) \right) dy, \quad (14)$$

где

$$\begin{aligned} \psi_0^{(N)}(x) = & \sum_{\substack{n_\parallel \in \mathbb{Z}^2: \\ E - (k_\parallel + 2\pi n_\parallel)^2 > 0}} \left(A_{N, n_\parallel} \exp(i(k_\parallel + 2\pi n_\parallel, \sqrt{E_N - (k_\parallel + 2\pi n_\parallel)^2}), x) \right. \\ & \left. + B_{N, n_\parallel} \exp(i(k_\parallel + 2\pi n_\parallel, -\sqrt{E_N - (k_\parallel + 2\pi n_\parallel)^2}), x) \right) \end{aligned}$$

– общий вид блоховского по переменным x_1, x_2 ограниченного решения уравнения Шрёдингера в Ω с нулевым потенциалом. (Для доказательства достаточно подействовать на выражение

$$\eta_N(x_3) \psi_N(x) + \int_\Omega \Gamma(x - y, k_\parallel, E_N) \dots$$

оператором $-\Delta - E_N$.) Но интеграл в правой части (14) с точностью до экспоненциально убывающего при $|x_3| \rightarrow \infty$ слагаемого представляет собой при $x_3 \rightarrow \pm\infty$ линейные комбинации функций

$$\exp\left(i((k_\parallel + 2\pi n_\parallel, \sqrt{E_N - (k_\parallel + 2\pi n_\parallel)^2}), (x_\parallel, |x_3|))\right)$$

(см. [5], [8]). В силу равенства (14) и финитности функций $\eta_N(x_3)\psi_N(x)$ по x_3 получаем отсюда, что $A_{N,n_{\parallel}} = B_{N,n_{\parallel}} = 0$ для всех $N, n_{\parallel}$, т.е. $\psi_0^{(N)} = 0$. С учетом этого факта, а также асимптотики интеграла, находящегося в правой части (см. [5], [8], а также доказательство теоремы 1), заменяя в формуле (14) $\psi(x)$, $V_N(x)$, как и в (10), на $\psi(x - (0, 0, N/2))$, $V_N(x - (0, 0, N/2))$, получаем следующее представление функции $\psi_N(x)$ для $x_3 \in [0, N]$:

$$\begin{aligned} \psi_N(x) = & \sum_{\substack{n_{\parallel} \in \mathbb{Z}^2: \\ E - (k_{\parallel} + 2\pi n_{\parallel})^2 > 0}} \left(A_{N,n_{\parallel}}^{\pm} \exp\left(i((k_{\parallel} + 2\pi n_{\parallel}), \sqrt{E_N - (k_{\parallel} + 2\pi n_{\parallel})^2}), x\right) \right. \\ & \left. + B_{N,n_{\parallel}}^{\pm} \exp\left(i((k_{\parallel} + 2\pi n_{\parallel}), -\sqrt{E_N - (k_{\parallel} + 2\pi n_{\parallel})^2}), x\right) \right) + \theta_N(x), \end{aligned} \quad (15)$$

где знак у коэффициентов $A_{N,n_{\parallel}}^{\pm}$, $B_{N,n_{\parallel}}^{\pm}$ соответствует знаку x_3 ; при этом для функции $\theta_N(x)$ справедлива оценка

$$|\theta_N(x + (0, 0, N/2))| \leq C(e^{ax_3} + e^{-ax_3}), \quad (16)$$

где $C, a = \text{const} > 0$, $|x_3| \leq N/2$, причем величина C пропорциональна $\|\psi_N\|_{L^{\infty}(\Omega)}$. Здесь сумма в правой части (15) порождена по определению функцией $\Gamma^{(1)}$, входящей согласно (13) в состав интеграла в (14) (см. [5], [8]).

Введем теперь нормировку функции ψ_N , полагая

$$\max_{\substack{n_{\parallel} \in \mathbb{Z}^2: \\ E - (k_{\parallel} + 2\pi n_{\parallel})^2 > 0}} \{ \|\theta_N(x)\|_{L^2(\{x_3 \in [0, N]\})}, |A_{N,n_{\parallel}}^{\pm}|, |B_{N,n_{\parallel}}^{\pm}| \} = 1. \quad (17)$$

Заметим, что, пользуясь блоховостью функции ψ_N и экспонент, входящих в состав правой части (15), по переменной x_3 , равенство вида (15) можно записать на любом промежутке $nN \leq x_3 \leq (n+1)N$, $n \in \mathbb{Z}$. В силу неравенств из [10] и условия (17) функции ψ_N равномерно по N ограничены в Ω . Далее, полагая, что $\theta_N(x)$ определена для $x \in \Omega$ (с помощью продолжения по блоховости), получаем, что соотношение (17) остается справедливым при замене промежутка $[0, N]$ на $[-N/2, N/2]$.

ТЕОРЕМА 2. *Имеет место с точностью до перехода к подпоследовательности поточечная сходимость $\psi_N \rightarrow \psi$ при $N \rightarrow \infty$, где $\psi \neq 0$ – решение уравнения (5).*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Заметим, что поточечный предел $\psi_N(x)$ совпадает с поточечным пределом $\eta_N(x_3)\psi_N(x)$. Рассмотрим вначале слагаемое в правой части (14), отвечающее $\Gamma^{(2)}$. В силу (15) и оценок из [10] имеет место равномерная по N ограниченность всех слагаемых в выражении

$$\varphi_N(y) = -2\eta'_N(y_3) \frac{\partial \psi_N(y)}{\partial y_3} - \eta''_N(y_3) \psi_N(y) + V_N(y) \eta_N(y_3) \psi_N(y) \quad (18)$$

в $L^2(\Omega)$. Переходя к слабо сходящейся подпоследовательности, получаем поточечную сходимость данного слагаемого.

Далее, рассмотрение слагаемого, порождаемого функцией $\Gamma^{(1)}$, сводится согласно (7), (13) к рассмотрению интегралов вида

$$\int_{\Omega} \exp\left(i\left((k_{\parallel} + 2\pi n_{\parallel}), \sqrt{E_N - (k_{\parallel} + 2\pi n_{\parallel})^2}, (x_{\parallel} - y_{\parallel}, |x_3 - y_3|)\right)\right) \varphi_N(y) dy,$$

где $E_N - (k_{\parallel} + 2\pi n_{\parallel})^2 > 0$. У первых двух слагаемых в выражении (18) носители уходят на бесконечность, и поточечная с точностью до перехода к подпоследовательности сходимости при $N \rightarrow \infty$ соответствующих интегралов очевидна. Преобразуем теперь интеграл, отвечающий последнему слагаемому:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \exp\left(i\left((k_{\parallel} + 2\pi n_{\parallel}), \sqrt{E_N - (k_{\parallel} + 2\pi n_{\parallel})^2}, (x_{\parallel} - y_{\parallel}, |x_3 - y_3|)\right)\right) \\ & \times V_N(y) \eta_N(y_3) \psi_N(y) dy \\ & = \int_{\Omega} \exp\left(i\left((k_{\parallel} + 2\pi n_{\parallel}), \sqrt{E_N - (k_{\parallel} + 2\pi n_{\parallel})^2}, (x_{\parallel} - y_{\parallel}, |x_3 - y_3|)\right)\right) \\ & \times V_N(y) \eta_N(y_3) (1 - \eta_N(y_3)) \psi_N(y) dy \\ & + \int_{\Omega} \exp\left(i\left((k_{\parallel} + 2\pi n_{\parallel}), \sqrt{E_N - (k_{\parallel} + 2\pi n_{\parallel})^2}, (x_{\parallel} - y_{\parallel}, |x_3 - y_3|)\right)\right) \\ & \times \sqrt{|V_N(y)|} \eta_N(y_3) (\pm \eta_N(y_3)) \sqrt{|V_N(y)|} \psi_N(y) dy, \end{aligned} \quad (19)$$

где ‘ $\pm$ ’ есть $\text{sign } V(y)$. Сходимость первого из полученных интегралов имеет место по той же причине, что и предыдущих. Обозначим через $\psi(y)$ предел функций $\psi_N(y)$ (после перехода к подпоследовательности) в смысле слабой сходимости в каждом пространстве вида

$$L^2(\Omega \cap \{|y_3| \leq M\}), \quad M = 1, 2, \dots$$

(Нужно последовательно для $M = 1, 2, \dots$ переходить к сходящейся подпоследовательности, после чего выделить “диагональную” последовательность.) Для любого фиксированного $x \in \Omega$ имеет место сходимость в $L^2(\Omega)$ следующей последовательности:

$$\begin{aligned} & \exp\left(i\left((k_{\parallel} + 2\pi n_{\parallel}), \sqrt{E_N - (k_{\parallel} + 2\pi n_{\parallel})^2}, (x_{\parallel} - y_{\parallel}, |x_3 - y_3|)\right)\right) \sqrt{|V_N(y)|} \eta_N(y_3) \\ & \rightarrow \exp\left(i\left((k_{\parallel} + 2\pi n_{\parallel}), \sqrt{E - (k_{\parallel} + 2\pi n_{\parallel})^2}, (x_{\parallel} - y_{\parallel}, |x_3 - y_3|)\right)\right) \sqrt{|V(y)|}, \quad N \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (20)$$

Далее, в силу сказанного выше следующая последовательность слабо сходится в $L^2(\Omega)$:

$$\pm \eta_N(y_3) \sqrt{|V_N(y)|} \psi_N(y) \rightarrow \pm \sqrt{|V(y)|} \psi(y), \quad N \rightarrow \infty. \quad (21)$$

Соотношения (20), (21) доказывают сходимость для любого $x \in \Omega$ второго интеграла в правой части (19), поскольку он представляет собой скалярное произведение последовательностей в (20), (21).

Переходя в равенстве (14) к пределу при $N \rightarrow \infty$, получим, что функция ψ представляет собой решение уравнения (5). Докажем, что $\psi \neq 0$. Очевидно, в силу неравенства (16), что если последовательность чисел

$$a_N = \max_{\substack{n_{\parallel} \in \mathbb{Z}^2: \\ E - (k_{\parallel} + 2\pi n_{\parallel})^2 > 0}} \{|A_{N, n_{\parallel}}^{\pm}|, |B_{N, n_{\parallel}}^{\pm}|\}, \quad N = 1, 2, \dots,$$

не стремится к 0, то $\psi \neq 0$. Если же

$$\lim_{N \rightarrow \infty} a_N = 0,$$

то обоснование нетривиальности решения сводится к доказательству того, что

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \theta_N \neq 0.$$

Это без труда выводится из (16) с учетом того, что в рассматриваемом случае

$$\|\theta_N(x)\|_{L^2(\{|x_3| \leq N/2\})} = 1$$

(см. рассуждение перед формулировкой теоремы 2) для всех достаточно больших N , а также в силу сходимости ψ_N в L^2 на компактах из Ω , имеющей место вследствие теоремы Лебега. Теорема 2 доказана.

СПИСОК ЦИТИРОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Рид М., Саймон Б. Методы современной математической физики. Т. 4. М.: Мир, 1982.
- [2] Скриганов М. М. Геометрические и арифметические методы в спектральной теории многомерных периодических операторов // Тр. МИАН. 1985. Т. 171. С. 1–122.
- [3] Davies E. B. Scattering from infinite sheets // Math. Proc. Cambridge Philos. Soc. 1977. V. 82. P. 327–334.
- [4] Миронов А. Л., Олейник В. Л. О границах применимости метода приближения сильной связи // ТМФ. 1994. Т. 99. № 1. С. 103–120.
- [5] Чубурин Ю. П. О рассеянии на кристаллической пленке (спектр и асимптотика волновых функций уравнения Шрёдингера). Препринт. Свердловск: ФТИ УНЦ АН СССР, 1985.
- [6] Вольф Г. В., Чубурин Ю. П., Рубцова Л. А. Особенности электронного строения кристаллических пленок и их проявление в поверхностном рассеянии электронов низких энергий // Поверхность. 1991. Т. 10. С. 81–88.
- [7] Рид М., Саймон Б. Методы современной математической физики. Т. 1. М.: Мир, 1977.
- [8] Чубурин Ю. П. О рассеянии для оператора Шрёдингера в случае кристаллической пленки // ТМФ. 1987. Т. 72. № 1. С. 120–131.
- [9] Чубурин Ю. П. О решениях уравнения Шрёдингера в случае полуограниченного кристалла // ТМФ. 1994. Т. 98. № 1. С. 38–47.
- [10] Цикон Х., Фрёзе Р., Кирш В., Саймон Б. Операторы Шрёдингера с приложениями к квантовой механике и глобальной геометрии. М.: Мир, 1990.