Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. В. Грушин, Применение многопараметрической теории возмущений фредгольмовых операторов к блоховским функциям, *Матем. заметки*, 2009, том 86, выпуск 6, 819–828

DOI: <https://doi.org/10.4213/mzm6575>

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: 52.87.193.239

26 апреля 2023 г., 12:53:01

Применение многопараметрической теории возмущений фредгольмовых операторов к блоховским функциям

В. В. Грушин

В статье рассматривается семейство линейных фредгольмовых операторов, зависящих от нескольких параметров. Реализуется общий подход, позволяющий свести задачу о нахождении множества Λ значений параметров $t = (t_1, \dots, t_n)$, для которых уравнение $A(t)u = 0$ имеет отличное от нуля решение, к конечномерному случаю. Это позволяет с помощью обычных теорем о неявной функции получить формулы теории возмущений простых и конических точек множества Λ . Эти формулы применяются к вопросу о существовании конических точек множества собственных значений $E(k)$ в пространстве блоховских функций двумерного оператора Шрёдингера с периодическим потенциалом относительно гексогональной решетки.

Библиография: 8 названий.

1. Введение. Во многих задачах встречается следующая ситуация. Пусть имеется фредгольмов линейный оператор $A(t)$ из банахова пространства B_1 в банахово пространство B , зависящий от параметров $t = (t_1, \dots, t_n)$. Будем считать, что $A(t)$ – аналитическая функция своих параметров, меняющихся в некоторой связной области Ω n -мерного комплексного пространства $\mathbb{C}^n$. Требуется найти те значения параметров, при которых $\dim \text{Ker } A(t) \neq 0$, т.е. уравнение $A(t)u = 0$ имеет отличное от нуля решение $u \in B_1$. Множество таких параметров t будем обозначать через Λ . Если пространство B_1 вложено в B , то к такой постановке приводит задача на собственные значения: найти значения λ , при которых уравнение $A(t')u = \lambda u$ имеет решение $u \neq 0$, где $A(t')$ – оператор, зависящий от параметров $t' = (t_1, \dots, t_{n-1})$. Положив $t = (t_1, \dots, t_{n-1}, \lambda)$, мы приходим к сформулированной выше задаче.

Вернемся к общей ситуации оператора $A(t)$. Напомним, что линейный непрерывный оператор A называется *фредгольмовым*, если его ядро $\text{Ker } A$ и коядро $\text{Coker } A$, которое определяется как фактор-пространство $B/\text{Im } A$, имеют конечные размерности, их разность называется *индексом* оператора A : $\text{ind } A = \dim \text{Ker } A - \dim \text{Coker } A$. Известно, что образ $\text{Im } A$ фредгольмова оператора A замкнут в B , а его индекс не зависит от t . Изложение этих и других фактов теории фредгольмовых операторов см. [1], [2]. В этой статье мы будем предполагать, что $\text{ind } A = 0$.

В данной статье реализуется общий подход, позволяющий локально свести поставленную выше задачу к конечномерной ситуации, т.е. в некоторой окрестности

заданной точки t^0 найти такой конечномерный оператор $\hat{g}(t): \mathbb{C}^m \rightarrow \mathbb{C}^m$, аналитически зависящий от параметров t , что для t , достаточно близких к t^0 ,

$$\dim \operatorname{Ker} A(t) = \dim \operatorname{Ker} \hat{g}(t).$$

Таким образом, задача о решении уравнения $A(t)u = 0$ сводится к задаче об исследовании конечномерной системы линейных уравнений $\hat{g}(t)d = 0$, $d \in \mathbb{C}^m$, зависящей от параметров t . В результате мы можем получать информацию о структуре множества Λ тех t , для которых $\dim \operatorname{Ker} A(t) \neq 0$, исследуя множество, определяемое уравнением $G(t) = 0$, где $G(t)$ – определитель матрицы, отвечающей оператору $\hat{g}(t)$. Отметим, что в частных случаях такой подход использовался автором в [3], [4]. В такой общей ситуации эти вопросы изучаются в пп. 2, 3 статьи. В п. 4 изложенный подход применяется к вопросу о конических точках собственных значений $E(k)$ двумерного оператора Шрёдингера $-\Delta + V(x)$ в пространстве бловских функций, отвечающих гексогональной решетке.

2. Сведение общей задачи к конечномерному случаю. Зафиксируем некоторое значение $t^0 \in \Lambda$ параметров t ; без ограничения общности можно считать, что $t^0 = 0$. Обозначим через m число $m = \dim \operatorname{Ker} A(0) = \dim \operatorname{Coker} A(0)$. Пусть $\Phi = (\Phi_1, \dots, \Phi_m)$ – набор таких векторов пространства B , что

$$B = \operatorname{Im} A(0) + [\Phi_1, \dots, \Phi_m],$$

где $[\Phi_1, \dots, \Phi_m]$ – линейное подпространство, натянутое на векторы $\Phi_1, \dots, \Phi_m$. Кроме того, рассмотрим m таких линейных функционалов ϕ_j , $j = 1, \dots, m$, из B_1^* , что $\bigcap_{j=1}^m \operatorname{Ker} \phi_j$ не пересекается с $\operatorname{Ker} A(0)$, т.е. отображение $\phi u = (\phi_1 u, \dots, \phi_m u)$ на $\operatorname{Ker} A(0)$ является изоморфизмом. В таком случае отображение пары $(u, g) \in B_1 \times \mathbb{C}^m$, где $g = (g_1, \dots, g_m)$, в пару $(f, d) \in B \times \mathbb{C}^m$, где $d = (d_1, \dots, d_m)$, заданное как

$$\mathcal{A}(t): (u, g) \rightarrow (A(t)u - g \cdot \Phi, \phi u)$$

при $t = 0$ по теореме Банаха будет изоморфизмом. Другими словами, если рассмотреть задачу: по заданным f и d найти такие u и g , что

$$A(t)u - g_1 \Phi_1 - \dots - g_m \Phi_m = f, \quad \phi_1 u = d_1, \quad \dots, \quad \phi_m u = d_m, \quad (1)$$

то эта задача при $t = 0$ однозначно разрешима, а соответствующий обратный оператор непрерывен.

Наиболее важным для приложений является случай, когда B – гильбертово пространство со скалярным произведением $(\cdot, \cdot)$ и нормой $\|\cdot\|$, B_1 – линейное подпространство в B , так что $\|u\| \leq C\|u\|_1$ для всех $u \in B_1$, а оператор $A(t)$ при вещественных t определяет самосопряженный оператор в гильбертовом пространстве B с областью определения B_1 . В этом случае за Φ можно взять ортонормированный базис в $B \ominus \operatorname{Im} A(0)$, т.е. в ортогональном дополнении к образу оператора $A(0)$, или любые другие векторы пространства B , проекции которых на $\operatorname{Im} A(0)^\perp$ образуют базис в $\operatorname{Im} A(0)^\perp$, а за ϕ_j взять скалярные произведения $\phi u = (u, \Phi_j)$.

Как известно, в случае, когда $\mathcal{A}(t)$ при $t = 0$ является изоморфизмом, при достаточно близких к 0 значениях t оператор $\mathcal{A}(t)$ также будет определять изоморфизм,

а обратный оператор, который задается рядом Неймана

$$\mathcal{A}^{-1}(t) = \mathcal{A}^{-1}(0) + \mathcal{A}^{-1}(0) \sum_{n=1}^{\infty} (-(\mathcal{A}(t) - \mathcal{A}(0))\mathcal{A}^{-1}(0))^n,$$

будет аналитической операторной функцией. В результате мы получим $u(t, f, d)$ и $g(t, f, d)$ как аналитические функции от параметров t в указанных выше пространствах. Особенно важную роль в дальнейшем будет играть $g(t, 0, d) = \hat{g}(t)d$, элементы $\hat{g}_{ij}(t)$ матрицы $\hat{g}(t)$ определяются равенством

$$g_i(t, 0, d) = g_{i1}(t)d_1 + \dots + g_{im}(t)d_m, \quad i = 1, \dots, m.$$

Определитель матрицы $\hat{g}(t)$ будем обозначать как $G(t)$.

ТЕОРЕМА 1. Для некоторого $\varepsilon > 0$ при $|t| < \varepsilon$ выполняется равенство

$$\dim \operatorname{Ker} A(t) = \dim \operatorname{Ker} \hat{g}(t),$$

более того, отображение $\tilde{\phi}: u \rightarrow \phi u$, переводящее $\operatorname{Ker} A(t)$ в $\operatorname{Ker} \hat{g}(t)$, является изоморфизмом.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Ядро оператора $A(t)$ состоит из таких векторов u , что пара (u, d) с $d = \phi u$ является решением системы

$$Au = 0, \quad \phi u = d, \quad (2)$$

а эта система совпадает с системой (1) при $f = 0$, $g = 0$, следовательно, $u = u(t, 0, d)$ и $g(t, 0, d) = 0$. Тем самым, $d \in \operatorname{Ker} \hat{g}(t)$, и отображение $\tilde{\phi}$ переводит $\operatorname{Ker} A(t)$ в $\operatorname{Ker} \hat{g}(t)$.

Обратно, пусть пара (u, g) есть решение системы (1) с правыми частями $(0, d)$ и $d \in \operatorname{Ker} \hat{g}(t)$. В таком случае $u = u(t, 0, d)$, $g = g(t, 0, d) = 0$, следовательно, u удовлетворяет системе (2) и $u \in \operatorname{Ker} A(t)$, а $d = \phi u$. Таким образом, отображение $d \rightarrow u(t, 0, d)$ переводит $\operatorname{Ker} \hat{g}$ в $\operatorname{Ker} A(t)$, и мы построили обратное отображение к отображению $\phi: \operatorname{Ker} A(t) \rightarrow \operatorname{Ker} \hat{g}(t)$, что и доказывает утверждение теоремы.

СЛЕДСТВИЕ 1. При значении параметров t из достаточно малой окрестности $t^0 = 0$ уравнение $A(t)u = 0$ тогда и только тогда имеет решение $u \neq 0$, когда

$$G(t) = 0. \quad (3)$$

СЛЕДСТВИЕ 2. Множество Λ тех значений параметров t , при которых уравнение $A(t)u = 0$ имеет решение $u \neq 0$, является локально аналитическим множеством.

К решению уравнения $G(t) = 0$ мы можем применить обычные соображения, связанные с теоремой о неявной функции.

СЛЕДСТВИЕ 3. Если $(\partial/\partial t_n)G(0) \neq 0$, то в достаточно малой окрестности $t^0 = 0$ уравнение $A(t)u = 0$ имеет решение $u \neq 0$ только при тех t , для которых $t_n = t_n(t_1, \dots, t_{n-1})$ — аналитическая функция остальных переменных, $t_n(0) = 0$.

Так как по предположению $\dim \text{Ker } A(0) = m$, то и $\dim \text{Ker } \hat{g}(0) = m$, а это означает, что все элементы g_{ij} матрицы $\hat{g}(0)$ равны нулю (напомним, что $\hat{g}(t)$ – это матрица размера $m \times m$). Поэтому $G(t)$ при $t = 0$ обращается в нуль вместе со всеми производными до порядка $m - 1$, так что следствие 3 можно применять только для $m = 1$. В случае $m > 1$ можно использовать стандартные преобразования для разрешения особенностей аналитических множеств (см., например, [5]). Мы ограничимся более простым преобразованием, рассматривая только вещественные t и считая многочлен $G(t)$ вещественным.

Заменим функции g_{ij} их линейными частями

$$t_1 \frac{\partial}{\partial t_1} g_{ij}(0) + \dots + t_n \frac{\partial}{\partial t_n} g_{ij}(0)$$

и составим определитель $G_m(t)$ получившейся матрицы. Получим однородный многочлен от t степени m такой, что $G(t) - G_m(t) = \mathcal{O}(|t|^{m+1})$. Будем рассматривать только вещественные t . Пусть уравнение

$$G_m(t_1, \dots, t_n) = 0 \quad (4)$$

относительно переменной t_n при любых $t' = (t_1, \dots, t_{n-1}) \neq 0$ имеет m различных вещественных корней. Обычно в теории возмущений (4) называется *секулярным* или *вековым* уравнением. В таком случае можно утверждать, что решение уравнения (3) в окрестности точки $t^0 = 0$ представляется в виде

$$t_n = r z_k(r, \omega_1, \dots, \omega_{n-1}), \quad k = 1, \dots, m,$$

где (r, ω) – сферические координаты (т.е. $r = |t'|$, $\omega = (\omega_1, \dots, \omega_{n-1})$ – точка единичной $(n - 1)$ -мерной сферы), а $z_k(r, \omega)$ – m различных аналитических функций ($z_k(0, \omega)$, $k = 1, \dots, m$, различны, так как они как раз и являются корнями уравнения (4) при $t' = \omega$). В таком случае будем говорить, что множество решений уравнения (3) имеет *коническую точку*.

Доказательство этих утверждений легко сводится к обычной теореме о неявной функции с помощью подстановки $t_n = rz(r, \omega)$, $t' = r\omega$. Найденные m значений t_n при достаточно малых $r \neq 0$ исчерпывают все корни уравнения $G(t', t_n) = 0$ в окрестности точки $t = 0$, поскольку в силу известного принципа аргумента для аналитических функций число корней (с учетом их кратности) в круге $|t_n| < \rho$ с достаточно малым ρ не меняется для малых t' .

3. Многопараметрическая теория возмущений. Как видно из предыдущих построений, для исследования множества Λ решений уравнения (3) нужно уметь находить частные производные $(\partial/\partial t_k)g_{ij}(0)$. Для этого продифференцируем систему (1) по параметру t_k при $t = 0$, после чего найдем

$$A(0)v_k^0 + \frac{\partial A}{\partial t_k}(0)u^0 - \frac{\partial \hat{g}(0)}{\partial t_k} d \cdot \Phi = 0, \quad \phi v_k^0 = 0, \quad (5)$$

где $u^0 = u(0, 0, d)$, $v_k^0 = (\partial/\partial t_k)u(0, 0, d)$. Для простоты ограничимся случаем, когда $A(t)$ – самосопряженный оператор в гильбертовом пространстве B , как это указывалось во введении, а $\Phi_1, \dots, \Phi_m$ – ортонормированный базис в $\text{Ker } A(0)$, $\phi u = ((u, \Phi_1), \dots, (u, \Phi_m))$, где $(\cdot, \cdot)$ – скалярное произведение в B .

Матрица $\hat{g}$ будет эрмитовой. Доказательство этого факта полностью повторяет доказательство соответствующего утверждения из [4]. Действительно, пусть $u(t, 0, d)$ – решение системы (1), где $\phi_k u = (u, \Phi_k)$. Рассмотрим квадратичную форму

$$(A(t)u, u) = (\hat{g}d \cdot \Phi, u) = (\hat{g}d, \bar{d}).$$

Так как $A(t)$ – самосопряженный оператор, то эта квадратичная форма принимает только вещественные значения, следовательно, матрица $\hat{g}$ эрмитова. Отсюда следует, что многочлен $G(t)$ будет вещественным.

Условием разрешимости системы (5) служит соотношение

$$\left(\frac{\partial A}{\partial t_k}(0)u^0, \Phi_i \right) - \left(\frac{\partial \hat{g}(0)}{\partial t_k} d \cdot \Phi, \Phi_i \right) = 0, \quad u^0 = d_1 \Phi_1 + \dots + d_m \Phi_m,$$

и мы приходим к обычным формулам теории возмущений

$$\frac{\partial g_{ij}}{\partial t_k}(0) = \left(\frac{\partial A}{\partial t_k}(0)\Phi_j, \Phi_i \right). \quad (6)$$

Итак, вековое уравнение имеет вид

$$\det \left(\left(t \cdot \frac{\partial A}{\partial t}(0)\Phi_j, \Phi_i \right) \right) = 0.$$

Применим теперь эти формулы к задаче на собственные значения, т.е. к решениям уравнения $(A(t') - \lambda)u = 0$ с $u \neq 0$, где $A(t')$ – самосопряженный оператор в гильбертовом пространстве B с областью определения B_1 , как это было описано во введении и в п. 1, $t' = (t_1, \dots, t_{n-1})$. Пусть λ_0 при $t' = 0$ является собственным значением оператора $A(0)$, тогда, взяв $t_n = \lambda - \lambda_0$, мы можем применить следствия 1–3 к оператору $A(t') - \lambda_0 - t_n$.

В случае невырожденного собственного значения λ_0 число m равно единице, и по формуле (6)

$$G_1(t) = \left(t' \cdot \frac{\partial A}{\partial t'}(0)\Phi_1, \Phi_1 \right) - t_n.$$

Так как $(\partial/\partial t_n)G_1(0) \neq 0$, то в силу теоремы 1 и следствия 3 в окрестности точки $(t', \lambda) = (0, \lambda_0)$ имеется единственное значение $\lambda = \lambda(t')$, которое в силу теоремы 1 также будет невырожденным, а собственная функция $u = u(t', 0, 1)$ будет аналитически зависеть от t' . Из формулы

$$\frac{\partial t_n}{\partial t_k}(0) = - \frac{\partial G_1}{\partial t_k}(0) / \frac{\partial G_1}{\partial t_n}(0), \quad k = 1, \dots, n-1,$$

получаем, что

$$\lambda(t') = \lambda_0 + t' \cdot \left(\frac{\partial A}{\partial t'}(0)\Phi_1, \Phi_1 \right) + \mathcal{O}(|t'|^2).$$

Тем самым, мы получаем стандартные утверждения теории возмущений в невырожденном случае (см., например, [6]).

В случае $m > 1$ (вырожденный случай) получаем следующее утверждение.

ТЕОРЕМА 2. *Если вековое уравнение*

$$\det \left(\left(t' \cdot \frac{\partial A}{\partial t'}(0) \Phi_j, \Phi_i \right) - t_n \delta_{ij} \right) = 0$$

имеет при $t' \neq 0$ m различных корней, то $(0, \lambda_0)$ будет конической точкой. При этом в круге $|\lambda - \lambda_0| \leq \rho$ достаточно малого радиуса при $t' \neq 0$, близких к 0, все собственные значения невырождены.

После всего, сказанного выше, доказательства требует только невырожденность собственных значений, для чего в силу теоремы 1 достаточно установить, что ранг матрицы $\hat{g}(t', \lambda_k(t') - \lambda_0)$, $k = 1, \dots, m$, при $t' \neq 0$, близких к 0, равен $m - 1$. Но при $t' = r\omega$ и $r \rightarrow 0$ эта матрица, деленная на r , стремится к матрице

$$\left(\left(\omega \cdot \frac{\partial A}{\partial t'}(0) \Phi_j, \Phi_i \right) - z_k(0, \omega) \delta_{ij} \right),$$

ранг которой равен $m - 1$, поскольку эрмитова матрица

$$\left(\left(\omega \cdot \frac{\partial A}{\partial t'}(0) \Phi_j, \Phi_i \right) \right)$$

по условию теоремы имеет различные собственные значения $z_k(0, \omega)$.

4. Приложение к теории блоховских функций в случае двумерной гексогональной решетки. В качестве примера рассмотрим собственные функции двумерного оператора Шрёдингера $H(k) = -\Delta + V(x)$ с периодическим потенциалом $V(x)$ относительно решетки Γ на плоскости с базисными векторами $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ в пространстве блоховских функций, т.е. функций, удовлетворяющих условию $\psi(x + \mathbf{a}) = e^{ik \cdot \mathbf{a}} \psi(x)$ для $\mathbf{a} \in \Gamma$ (здесь $k = (k_1, k_2)$ – фиксированная точка двойственной плоскости). Как обычно, переходя от $\psi(x)$ к функции $u(x)$ по формуле $\psi(x) = e^{ik \cdot x} u(x)$, запишем уравнение для определения собственных значений в виде

$$H_{\text{per}}(k)u = E(k)u, \quad H_{\text{per}}(k) = -\left(\frac{\partial}{\partial x} + ik \right)^2 + V(x),$$

а функция $u(x)$ будет периодической относительно решетки Γ . Будем считать, что потенциал V локально принадлежит L_2 .

Первоначально оператор $H(k)$ определяется на гладких блоховских функциях, которые образуют предгильбертово пространство, если скалярное произведение ввести как

$$(u, v) = \int_Q u(x) \bar{v}(x) dx,$$

где Q – элементарная ячейка решетки Γ ; например, за Q можно взять параллелограмм, построенный на базисных векторах (как известно, это не единственный способ выбора элементарной ячейки). Пополняя пространство гладких блоховских функций по норме, отвечающей данному скалярному произведению, получаем гильбертово пространство $\mathcal{H}(k)$, а замыкая оператор $H(k)$, получаем самосопряженный

оператор с областью определения $\mathcal{H}^2(k)$, состоящей из блоховских функций, локально принадлежащих L_2 вместе с производными до второго порядка (производные понимаются в смысле обобщенных функций). Этот самосопряженный оператор и будем далее обозначать как $H(k)$, однако, его можно также рассматривать как фредгольмов оператор из $\mathcal{H}^2(k)$ в L_2 . Аналогично определяется самосопряженный оператор $H_{\text{per}}(k)$ в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}_{\text{per}}$ с областью определения $\mathcal{H}_{\text{per}}^2$, который можно рассматривать как фредгольмов оператор из $\mathcal{H}_{\text{per}}^2$ в L_2 . Утверждения о самосопряженности и фредгольмовости соответствующих операторов для гладких V вытекают из общих теорем об эллиптических операторах на гладких компактных многообразиях (см., например, [2]) и распространяется на потенциалы, локально принадлежащие L_2 , с помощью теорем вложения соболевских пространств и теоремы Като–Реллиха (см. [7; теорема 10.12]).

Мы рассмотрим частный случай гексогональной решетки Γ с базисными векторами

$$\mathbf{a}_1 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2} \right), \quad \mathbf{a}_2 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right).$$

За базисные векторы обратной (сопряженной) решетки Γ^* , т.е. векторы, удовлетворяющие соотношениям $\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$, возьмем

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, 1 \right), \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, -1 \right).$$

Гексогональная решетка обладает рядом дополнительных симметрий, так она инвариантна относительно поворотов плоскости на угол 60° . В связи с этим мы будем предполагать, что потенциал $V(x)$ не только периодичен относительно решетки Γ , но и инвариантен относительно таких поворотов, в частности, относительно инверсий (отражений от начала координат).

Физический смысл собственных значений $E(k)$ обсуждается в книгах, посвященных теории твердого тела, в частности, нужные нам факты, относящиеся к гексогональной решетке, изложены в [8] в связи с квантовой теорией двумерного графита (графена).

Нас особенно будет интересовать поведение собственных значений $E(k)$ в окрестности точки

$$k^0 = 2\pi \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{3} \right)$$

(это одна из вершин так называемой зоны Бриллюэна). Обозначив через U преобразование, отвечающее повороту на 120° (против часовой стрелки), т.е.

$$U(x_1, x_2) = (x_1 \cos \phi - x_2 \sin \phi, x_1 \sin \phi + x_2 \cos \phi), \quad \phi = \frac{2\pi}{3},$$

получим соотношения

$$k^1 = U^{-1}k^0 = k^0 - \mathbf{b}_1, \quad k^2 = U^{-1}k^1 = k^0 - \mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2, \quad k^0 = U^{-1}k^2, \quad (7)$$

что ясно видно, если нарисовать векторы k^0 , $\mathbf{b}_1$, $\mathbf{b}_2$ на плоскости. Отсюда следует, что пространство $\mathcal{H}(k^0)$ инвариантно не только относительно сдвигов на векторы

решетки Γ , но оно также инвариантно относительно циклической группы C_3 поворотов на углы, кратные 120° . Поэтому пространство $\mathcal{H}(k^0)$ разлагается в прямую сумму блоховских пространств

$$\mathcal{H}(k^0) = \mathcal{H}_0(k^0) \oplus \mathcal{H}_1(k^0) \oplus \mathcal{H}_2(k^0),$$

состоящих из функций, удовлетворяющих соотношениям

$$\psi(Ux) = \psi(x), \quad \psi(Ux) = e^{2\pi i/3}\psi(x), \quad \psi(Ux) = e^{4\pi i/3}\psi(x)$$

соответственно. Так как оператор $H(k^0)$ инвариантен относительно преобразования U , то можно выбрать такой ортонормированный базис из собственных функций оператора $H(k^0)$, что собственные функции этого базиса разбиваются на три группы $\{\Psi_n^j\}_{n=1}^\infty$, где Ψ_n^j – собственные функции в $\mathcal{H}_j(k^0)$, $j = 0, 1, 2$. Соответственно этому на три группы $\{E_n^j\}_{n=1}^\infty$ разбиваются и собственные значения (внутри каждой группы они упорядочены в порядке возрастания с учетом их кратности).

Отметим, что вторая и третья группы собственных значений (с $j = 1$ и $j = 2$) совпадают, так как для любой собственной функции $\Psi_n^1(x)$ функция $\bar{\Psi}_n^1(-x)$ также является собственной, но будет принадлежать третьей группе. Сами же собственные функции различны, поскольку собственные функции из разных групп взаимно ортогональны. Таким образом, собственные функции из второй группы (с $j = 1$) всегда имеют вырождение.

Наша цель состоит в том, чтобы установить следующее

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 1. Пусть выполнены следующие условия:

- (1) некоторое собственное значение E_n^1 второй группы имеет двукратное вырождение;
- (2) вековое уравнение

$$\det\left(-2i(k - k^0)\left(\frac{\partial}{\partial x}\Psi_n^j, \Psi_n^m\right) - E'\delta_{jm}\right) = 0, \quad j, m = 1, 2, \quad (8)$$

относительно E' при $k \neq k^0$ имеет различные корни.

Тогда k^0 является конической точкой.

Доказательство следует из формул теории возмущений, развитой в п. 3, примененных к оператору $H_{\text{рег}}(k)$ в окрестности точки k^0 . Отметим, что применение теории возмущений к исследованию собственных значений $E(k)$ является стандартным в теории твердого тела и называется $(k \cdot p)$ -методом.

Дальнейшая часть статьи посвящена тому, чтобы показать, что существуют потенциалы $V(x)$, для которых условия предложения 1 действительно реализуются. Для этого мы рассмотрим “малое возмущение” оператора Лапласа $-\Delta$, т.е. рассмотрим в пространстве блоховских функций $\mathcal{H}(k)$ оператор $H(k, \varepsilon) = -\Delta + \varepsilon V(x)$ с достаточно малым ε при прежних ограничениях на $V(x)$ (аналог модели почти свободных электронов в теории твердого тела). При $\varepsilon = 0$ и $k = k^0$ собственными функциями являются $|Q|^{-1/2} \exp(i(k^0 - \mathbf{b}) \cdot x)$, где $\mathbf{b}$ – векторы обратной решетки, а собственными значениями будут $|k^0 - \mathbf{b}|^2$. Из геометрии обратной решетки ясно, что наименьшее собственное значение $|k^0|^2$ трехкратно вырождено, поскольку

$$|k^0|^2 = |k^0 - \mathbf{b}_1|^2 = |k^0 - \mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2|^2,$$

а соответствующими собственными функциями будут

$$\psi_0 = |Q|^{-1/2} e^{ik^0 \cdot x}, \quad \psi_1 = |Q|^{-1/2} e^{i(k^0 - b_1) \cdot x}, \quad \psi_2 = |Q|^{-1/2} e^{i(k^0 - b_1 - b_2) \cdot x}, \quad (9)$$

где $|Q|$ – площадь ячейки Q , равная $\sqrt{3}/2$. Из соотношений (7) следует, что

$$\psi_1(x) = \psi_0(Ux), \quad \psi_2(x) = \psi_0(U^2x).$$

Переходя к линейным комбинациям, легко составляются функции

$$\Psi_1^j(k^0, 0) = \frac{1}{\sqrt{3}} (\psi_0 + e^{-2\pi i j/3} \psi_1 + e^{-4\pi i j/3} \psi_2), \quad j = 0, 1, 2, \quad (10)$$

принадлежащие $\mathcal{H}_j(k^0)$. Каждая собственная функция Ψ_1^j в своем пространстве $\mathcal{H}_j(k^0)$ будет иметь невырожденное собственное значение; поэтому мы можем применить невырожденный вариант теории возмущений (следствие 1) и получим, что трехкратно вырожденное собственное значение

$$E_1^0(k^0) = E_1^1(k^0) = E_1^2(k^0) = |k^0|^2$$

расщепляется на

$$\begin{aligned} E_1^0(k^0, \varepsilon) &= E_1^0(k^0) + \varepsilon(V\Psi_1^0(k^0, 0), \Psi_1^0(k^0, 0)) + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \\ E_1^1(k^0, \varepsilon) &= E_1^2(k^0, \varepsilon) = E_1^1(k^0) + \varepsilon(V\Psi_1^1(k^0, 0), \Psi_1^1(k^0, 0)) + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \end{aligned}$$

Таким образом, для выполнения условия (1) при достаточно малых $\varepsilon \neq 0$ для собственного значения $E_1^1(k^0, \varepsilon)$ достаточно выбрать потенциал $V(x)$ так, чтобы

$$(V\Psi_1^0(k^0, 0), \Psi_1^0(k^0, 0)) \neq (V\Psi_1^1(k^0, 0), \Psi_1^1(k^0, 0)),$$

где $\Psi_1^0(k^0, 0)$ и $\Psi_1^1(k^0, 0)$ задаются формулами (10). Например, таким потенциалом является

$$V(x) = \cos(\mathbf{b}_1 \cdot x) + \cos(\mathbf{b}_2 \cdot x) + \cos((\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2) \cdot x),$$

что проверяется непосредственными вычислениями.

Перейдем теперь к проверке условия (2) предложения 1 при достаточно малых $\varepsilon \neq 0$, а в качестве собственного значения возьмем $E_1^1(k^0, \varepsilon)$. Ясно, что условие (2) не зависит от выбора ортонормированного базиса в пространстве собственных функций с собственным значением $E_1^1(k^0, \varepsilon)$, поэтому возьмем в качестве такого базиса $\Psi_1^1(k^0, \varepsilon)$, $\Psi_1^2(k^0, \varepsilon)$, причем в силу невырожденной теории возмущений эти функции можно выбрать аналитически зависящими от ε (см. следствие 1). Так как условие (2) имеет устойчивый характер, то достаточно будет проверить, что условие (2) выполняется для функций $\Psi_1^1(k^0, 0)$ и $\Psi_1^2(k^0, 0)$, заданных формулами (10); а это опять проверяется непосредственными вычислениями. В результате получается, что в этом случае вековое уравнение (8) имеет вид

$$(E')^2 = |(k - k^0) \cdot \alpha|^2 + |(k - k^0) \cdot \beta|^2, \quad (11)$$

где α и β – линейно независимые векторы

$$\alpha = \frac{2}{3}(2\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2) \cos \frac{2\pi}{3}, \quad \beta = \frac{2}{3}\mathbf{b}_2 \sin \frac{2\pi}{3}.$$

Действительно, ψ_0, ψ_1, ψ_2 , заданные формулами (9), образуют ортонормированную систему, и скалярное произведение любых двух их линейных комбинаций вычисляется как

$$(c_{10}\psi_0 + c_{11}\psi_1 + c_{12}\psi_2, c_{20}\psi_0 + c_{21}\psi_1 + c_{22}\psi_2) = c_{10}\bar{c}_{20} + c_{11}\bar{c}_{21} + c_{12}\bar{c}_{22}.$$

Учитывая формулы (9), (10) и то, что

$$\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_1^1(k^0, 0) = \frac{1}{\sqrt{3}} (k^0 \psi_0 + (k^0 - \mathbf{b}_1) e^{-2\pi i/3} \psi_1 + (k^0 - \mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2) e^{-4\pi i/3} \psi_2),$$

отсюда получаем

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_1^1(k^0, 0), \Psi_1^1(k^0, 0) \right) &= \frac{1}{3} (k^0 + k^0 - \mathbf{b}_1 + k^0 - \mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2) = 0, \\ \left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_1^1(k^0, 0), \Psi_1^2(k^0, 0) \right) &= -\frac{1}{3} \left((2\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2) \cos \frac{2\pi}{3} - i\mathbf{b}_2 \sin \frac{2\pi}{3} \right). \end{aligned}$$

В результате из формулы (8) после замены Ψ_n^j, Ψ_n^m на $\Psi_1^1(k^0, 0), \Psi_1^2(k^0, 0)$ получаем вековое уравнение (11).

СПИСОК ЦИТИРОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] И. Ц. Гохберг, М. Г. Крейн, “Основные положения о дефектных числах, корневых числах и индексах линейных операторов”, *УМН*, **12**:2 (1957), 43–118.
- [2] М. А. Шубин, *Псевдодифференциальные операторы и спектральная теория*, Наука, М., 1978.
- [3] В. В. Грушин, “Об одном классе эллиптических псевдодифференциальных операторов, вырождающихся на подмногообразии”, *Матем. сб.*, **84**:2 (1971), 163–195.
- [4] В. В. Грушин, “Асимптотическое поведение собственных значений оператора Шрёдингера в тонких замкнутых трубках”, *Матем. заметки*, **83**:4 (2008), 503–519.
- [5] В. И. Арнольд, *Дополнительные главы теории обыкновенных дифференциальных уравнений*, Наука, М., 1978.
- [6] M. Reed, B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics. V. 4. Analysis of Operators*, Academic Press, New York–London, 1978; рус. пер.: М. Рид, Б. Саймон, *Методы современной математической физики. Т. 4. Анализ операторов*, Мир, М., 1982.
- [7] M. Reed, B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics. V. 2. Fourier Analysis, Self-Adjointness*, Academic Press, New York–London, 1975; рус. пер.: М. Рид, Б. Саймон, *Методы современной математической физики. Т. 2. Гармонический анализ. Самосопряженность*, Мир, М., 1978.
- [8] R. Saito, G. Dresselhaus, M. S. Dresselhaus, *Physical Properties of Carbon Nanotubes*, Imperial College Press, London, 1998.

В. В. Грушин

Московский государственный институт электроники и математики

E-mail: pm@miem.edu.ru

Поступило

11.11.2008