Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. Л. Миронов, В. Л. Олейник, О границах применимости метода приближения сильной связи для комплекснозначного потенциала, *ТМФ*, 1997, том 112, номер 3, 448–466

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf1055>

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: 35.174.16.151

26 апреля 2023 г., 16:15:26

А. Л. Миронов*, В. Л. Олейник†

О ГРАНИЦАХ ПРИМЕНИМОСТИ МЕТОДА ПРИБЛИЖЕНИЯ СИЛЬНОЙ СВЯЗИ ДЛЯ КОМПЛЕКСНОЗНАЧНОГО ПОТЕНЦИАЛА

Рассматривается одномерный оператор Шредингера с периодическим потенциалом, который строится как сумма сдвигов заданного комплекснозначного потенциала q , убывающего на бесконечности. Приведено математическое обоснование метода приближения сильной связи. Пусть λ_0 – изолированное собственное значение оператора Шредингера с потенциалом q . Тогда для соответствующего оператора с периодическим потенциалом существует непрерывный спектр, лежащий вблизи λ_0 . Изучается асимптотическое поведение этой части спектра при неограниченном возрастании периода для случаев одномерного и двумерного инвариантных подпространств, отвечающих собственному значению λ_0 .

1. ВВЕДЕНИЕ

Данная работа является продолжением исследований, начатых авторами в [1, 2]. Рассматривается одномерный оператор Шредингера с периодическим потенциалом, который строится как сумма сдвигов заданного комплекснозначного одноатомного потенциала q при условии $q \in L^1(\mathbf{R})$. Тогда одноатомная задача может иметь дискретный спектр вне непрерывного [3, 4]. Как известно, спектр периодической цепочки идентичных атомов обладает зонной структурой, т.е. состоит из отрезков вещественной оси для вещественных потенциалов [5, 6] и аналитических дуг комплексной плоскости для комплекснозначного потенциала [7, 8, 9].

Целью наших исследований является получение асимптотических формул для спектральных компонент, ассоциированных с дискретным спектром одноатомной задачи, когда период цепочки неограниченно возрастает. В данном случае часто используется метод приближения сильной связи (tight binding approximation method, tb-метод) [10, 11, 12]. В целях краткости изложения для соответствующих tb-методу явлений и объектов мы будем использовать tb-терминологию (tb-зона, tb-асимптотика и т.п.).

*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия. E-mail: mironov@alm.usg.ru

†Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия. E-mail: oleinik@niif.spb.su

Специфика одномерной задачи заключается в том, что рассматриваемый одноатомный оператор не может иметь кратных собственных значений. Тем не менее в случае комплекснозначного потенциала у резольвенты могут существовать кратные полюсы. Рассмотрение комплексного случая в окрестности простого полюса отличается от вещественного незначительно. Известно также, что кратность полюса резольвенты совпадает с размерностью инвариантного подпространства (ИП). Тогда следуя схеме, предложенной в [13], мы получаем, что для периодической задачи вблизи полюса резольвенты одноатомной задачи возникает столько спектральных tb -компонент, какова кратность этого полюса. В настоящей статье мы предлагаем метод исследования асимптотического поведения спектральных компонент, отвечающих соответствующему собственному значению λ_0 одноатомной задачи для ИП размерности 1 и 2.

Полученные результаты показывают, что поведение спектральных компонент может быть весьма разнообразным. Наиболее простая ситуация возникает, когда у нас имеется одномерное ИП. В этом случае асимптотически спектр в окрестности соответствующего собственного значения λ_0 состоит из отрезка и при увеличении периода этот отрезок, вращаясь вокруг своего центра, экспоненциально сжимается в точку λ_0 . Далее в статье рассмотрен случай ИП размерности 2, т.е. собственному значению λ_0 , помимо собственной функции, отвечает одна присоединенная. Здесь выявляются два качественно различных варианта спектральной картины вблизи λ_0 . В первом варианте, когда потенциал убывает медленно, мы наблюдаем две спектральные компоненты, асимптотически представляющие собой два симметричных относительно λ_0 отрезка, каждый из которых ведет себя аналогично предыдущему случаю. Однако если потенциал убывает достаточно быстро или вообще финитен, то спектральная картина может вырождаться в “крест”, что не противоречит общей теории спектральных свойств уравнения Хилла [9, 14, 15]. При этом точка смыкания tb -зон, образующих “крест”, возможна лишь при одинаковом для каждой из зон значении квазиимпульса, поскольку эта точка не может быть устойчивой [16].

В разделе 1 рассматривается одноатомная задача и выписываются асимптотические решения этой задачи. Соответствующая периодическая задача рассматривается в разделе 2 и там же приводятся уравнения, описывающие зонную структуру спектра в терминах решений периодической задачи. Эти решения строятся в разделе 3 из решений одноатомной задачи методом вариации произвольных постоянных. После этого в разделе 4 получается основное уравнение (4.2), которое в удобных для нас терминах описывает зону, соответствующую фиксированному собственному значению одноатомной задачи λ_0 (tb -зону). В дальнейшем мы занимаемся решением уравнения (4.2). В том же разделе выводятся условия одномерности и двумерности ИП, отвечающего λ_0 . Далее, в разделах 5 и 6 рассматривается случай одномерного ИП и как главный результат приводится теорема 2. Случай же двумерного ИП рассмотрен в разделах 7 и 8, а основной результат выражается теоремой 4. В последнем разделе даны конкретные примеры, которые допускают как непосредственное вычисление tb -асимптотик, так и их расчет с использованием теорем 2 и 4.

1. ОДИН АТОМ

Рассмотрим в $L^2(\mathbf{R})$ уравнение Шредингера с комплекснозначным абсолютно суммируемым потенциалом $q(x)$:

$$-y''(x) + q(x)y(x) = \lambda y(x), \quad x \in \mathbf{R}, \quad (1.1)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |q(x)| dx < \infty. \quad (1.2)$$

Спектр такой задачи $\sigma \subset \mathbf{C}$ состоит из вещественной полуоси $[0, +\infty)$ и некоторого не более чем счетного числа собственных значений, лежащих в комплексной плоскости вне этой полуоси [17].

Для одного из таких собственных значений $\lambda_0 \notin [0, +\infty)$ выбираем два решения $\theta(x)$ и $\varphi(x)$ уравнения (1.1) при $\lambda = \lambda_0$, первое из которых есть нормированная в $L^2(\mathbf{R})$ собственная функция, а второе выбирается так, чтобы определитель Вронского этих решений $W[\theta, \varphi]$ равнялся 1. Положим $\rho := \sqrt{\lambda_0}$, $\eta := \operatorname{Im} \rho > 0$.

Для выбранных решений существуют положительные постоянные C_θ и C_φ такие, что

$$|\theta(x)| \leq C_\theta e^{-\eta|x|}, \quad |\varphi(x)| \leq C_\varphi e^{\eta|x|}, \quad -\infty < x < +\infty. \quad (1.3)$$

При дальнейших оценках нам удобно использовать следующую функцию:

$$p(T) := \int_{|x| \geq T} |q(x)| dx + e^{-2\eta T}, \quad T > 0. \quad (1.4)$$

Функция $p(T)$ монотонно стремится к нулю при $T \rightarrow \infty$, и аналогично лемме 1 из [2] имеем:

ЛЕММА 1. *Существуют постоянные $C_\pm \neq 0$ такие, что при $x \rightarrow \pm\infty$*

$$\begin{aligned} \theta(x) &= C_\pm e^{i\rho|x|} (1 + O(p(|x|))), & \varphi(x) &= \mp (2i\rho C_\pm)^{-1} e^{-i\rho|x|} (1 + O(p(|x|/2))), \\ \theta'(x) &= \pm i\rho C_\pm e^{i\rho|x|} (1 + O(p(|x|))), & \varphi'(x) &= (2C_\pm)^{-1} e^{-i\rho|x|} (1 + O(p(|x|/2))). \end{aligned}$$

Положим $[f, g](x) := f(x)g'(-x) - f'(-x)g(x)$. Тогда для выбранных решений $\theta(x)$ и $\varphi(x)$ уравнения (1.1) как следствие леммы 1 при $x \rightarrow \pm\infty$ получаем следующие асимптотические формулы:

$$a(x) := [\varphi, \varphi](x) = \mp (2i\rho C_+ C_-)^{-1} e^{-2i\rho|x|} (1 + O(p(|x|/2))), \quad (1.5)$$

$$b(x) := [\theta, \varphi](x) = O(p(|x|/2)), \quad (1.6)$$

$$c(x) := [\theta, \theta](x) = \mp 2i\rho C_+ C_- e^{2i\rho|x|} (1 + O(p(|x|))). \quad (1.7)$$

2. ПЕРИОДИЧЕСКАЯ ЦЕПОЧКА ИДЕНТИЧНЫХ АТОМОВ

Для некоторого фиксированного $T > 0$, используя потенциал $q(x)$, построим периодический потенциал $Q(x; T)$ (кратко $Q(x)$ или Q) с периодом $2T$:

$$Q(x; T) := \sum_{n=-\infty}^{+\infty} q(x + 2Tn). \quad (2.1)$$

В этом определении сходимость ряда в L^1 по любому конечному промежутку гарантируется условием (1.2).

Рассмотрим теперь уравнение Шредингера

$$-y''(x) + Q(x; T)y(x) = \lambda y(x), \quad x \in \mathbf{R}. \quad (2.2)$$

Спектр $\sigma(Q)$ этой цепочки состоит не более чем из счетного числа криволинейных отрезков (спектральных компонент), гомеоморфных единичному отрезку $[0, 1]$ и расположенных в комплексной плоскости [7–9]. Эти криволинейные отрезки могут быть описаны следующим образом [6]:

$$\sigma(Q) = \{\lambda \in \mathbf{C} : F(\lambda, T) \in [-2, 2]\}, \quad (2.3)$$

где $F(\lambda, T)$ – дискриминант уравнения (2.2). В действительности это означает выполнение следующих двух вещественных условий:

$$\begin{cases} |\operatorname{Re} F(\lambda, T)| \leq 2, \\ \operatorname{Im} F(\lambda, T) = 0. \end{cases}$$

В этой системе второе условие определяет семейство кривых на комплексной плоскости, а первое условие выделяет на этих кривых искомые спектральные компоненты. При этом границы спектральных компонент определяются формулой

$$F(\lambda, T) = \pm 2.$$

Пусть θ_T и φ_T – два линейно независимых решения уравнения (2.2) с $W[\theta_T, \varphi_T] \equiv 1$, тогда (ср. [18])

$$F(\lambda, T) = [\theta_T, \varphi_T](T) + [\theta_T, \varphi_T](-T). \quad (2.4)$$

Выразив функции $\varphi_T(x)$ и $\theta_T(x)$ в удобных для нас терминах и подставив эти выражения в (2.4), мы придем к основному уравнению.

3. ПОСТРОЕНИЕ ФУНКЦИЙ $\varphi_T(x)$ И $\theta_T(x)$

Построение функций $\varphi_T(x)$ и $\theta_T(x)$ идентично построению соответствующих функций, проведенному в разделе 3 работы [2]. Тем не менее для удобства читателей мы кратко повторяем его.

Исходя из выбранных в разделе 2 функций φ и θ методом вариации произвольных постоянных построим решения $\varphi_T(x)$ и $\theta_T(x)$. Если положить

$$\kappa = \lambda - \lambda_0, \quad v(x, T) = Q(x, T) - q(x), \quad w(x, \kappa, T) = v(x, T) - \kappa, \quad (3.1)$$

то уравнение Шредингера (2.2) запишется в виде

$$-y''(x) + (q(x) - \lambda_0)y(x) = -w(x, \kappa, T)y(x). \quad (3.2)$$

При этом заметим, что функции $\varphi(x)$ и $\theta(x)$ являются решениями уравнения (3.2) с правой частью, равной нулю. Пусть

$$\varphi_T(x) = \alpha(x)(\varphi(x) + \gamma(x)\theta(x)), \quad (3.3)$$

где $\alpha(x)$ и $\gamma(x)$ удовлетворяют условиям

$$\alpha(0) = 1, \quad \gamma(0) = 0, \quad \alpha'(x)\varphi(x) + (\alpha(x)\gamma(x))'\theta(x) = 0. \quad (3.4)$$

Из (3.3) и (3.4) следует, что $\varphi_T(0) = \varphi(0)$, $\varphi'_T(0) = \varphi'(0)$. Тогда функция $\varphi_T(x)$ будет решением уравнения (3.2), если функции $\alpha(x)$ и $\gamma(x)$ являются решениями следующей системы нелинейных интегральных уравнений Вольтерра:

$$\alpha(x) = \exp \int_0^x w\theta(\varphi + \gamma\theta) d\xi, \quad (3.5)$$

$$\gamma(x) = - \int_0^x w(\varphi + \gamma\theta)^2 d\xi. \quad (3.6)$$

При выводе (3.5), (3.6) мы воспользовались соотношениями (3.4) и условием $W[\theta, \varphi] = 1$. Как будет показано ниже, система (3.5), (3.6) однозначно разрешима в подходящем пространстве.

Далее, построим решение $\theta_T(x)$ уравнения (3.2) так, чтобы $W[\theta_T, \varphi_T] \equiv 1$. Для этого положим

$$\theta_T(x) = \alpha^{-1}(x)\theta(x) + \beta(x)\varphi_T(x), \quad (3.7)$$

где функция $\beta(x)$ такая, что $\beta(0) = 0$ и

$$(\alpha^{-1}(x))'\theta(x) + \beta'(x)\varphi_T(x) = 0. \quad (3.8)$$

Из (3.7) и (3.8) мы имеем $\theta'_T = \alpha^{-1}\theta' + \beta\varphi'_T$ и, т.к. $\theta(x)\varphi'_T(x) - \theta'(x)\varphi_T(x) = \alpha(x)$, то вронскиан функций θ_T и φ_T равен 1. Кроме того, $\theta_T(0) = \theta(0)$, $\theta'_T(0) = \theta'(0)$ и функция $\theta_T(x)$ является решением уравнения (3.2) при

$$\beta(x) = \int_0^x w\theta^2\alpha^{-2} d\xi. \quad (3.9)$$

Заметим, что функции α , γ и β зависят от x , κ , T и $\lambda_0 = \rho^2$.

4. ОСНОВНОЕ УРАВНЕНИЕ

Подставляя выражения (3.3) для $\varphi_T(x)$ и (3.7) для $\theta_T(x)$ в выражение (2.4) и используя обозначения (1.5)–(1.7), мы приходим к равенству

$$\begin{aligned} F(\kappa + \lambda_0, T) = & [\beta(T) - \beta(-T)]\alpha(T)\alpha(-T)\{a(T) + \gamma(T)b(T) - \\ & - \gamma(-T)b(-T) + \gamma(T)\gamma(-T)c(T)\} + \\ & + \{ (b(T) + c(T)\gamma(-T))\alpha(-T)/\alpha(T) + \\ & + (b(-T) + c(-T)\gamma(T))\alpha(T)/\alpha(-T) \}. \end{aligned} \quad (4.1)$$

Используя сокращенные обозначения

$G := \alpha_- \alpha_+ (a + \gamma_+ b_+ + \gamma_- b_- + \gamma_- \gamma_+ c)$, $H := (b_+ + \gamma_- c)\alpha_- / \alpha_+ - (b_- + \gamma_+ c)\alpha_+ / \alpha_-$,
где $\alpha_{\pm} := \alpha(\pm T)$; $\gamma_{\pm} := \gamma(\pm T)$; $a := a(T)$; $b_{\pm} := \pm b(\pm T)$ и $c := c(T) = -c(-T)$, с учетом (3.9), равенство (4.1) можно переписать в виде

$$F(\kappa + \lambda_0; T) = G \int_{-T}^T (v - \kappa) \theta^2 \alpha^{-2} d\xi + H.$$

Заметим, что функции G и H зависят от κ , T и ρ . Согласно (2.3) для каждого $d \in [-2, 2]$ уравнение $F(\lambda, T) = d$ определяет точку спектра $\lambda(d; T) \in \sigma(Q)$. Запишем это уравнение следующим образом:

$$\kappa \left(\int_{-T}^T \theta^2 \alpha^{-2} dx \right) = \int_{-T}^T v \theta^2 \alpha^{-2} dx + (H - d)G^{-1}. \quad (4.2)$$

В дальнейшем мы изучим асимптотическое поведение того решения $\kappa(d; T) = \lambda(d; T) - \lambda_0$ уравнения (4.2), которое стремится к нулю при $T \rightarrow +\infty$. Здесь необходимо отметить, что интеграл в левой части равенства (4.2) может стремиться к нулю. В этом формально проявляется специфика несамо сопряженности задачи, рассматриваемой для комплекснозначного потенциала. Как будет показано ниже, характер асимптотического поведения вышеуказанного интеграла непосредственно связан с размерностью ИП, отвечающего собственному значению λ_0 одноатомной задачи. В силу нормировки собственной функции θ этот интеграл стремится к 1 для вещественного потенциала [2]. Ниже мы рассмотрим случаи одномерного и двумерного ИП. Для этого выразим в терминах функций θ и φ условия, при которых размерность ИП, отвечающего собственному значению λ_0 , равна 1 либо 2.

ЛЕММА 2. Пусть

$$\mathcal{I}_1 := \int_{-\infty}^{+\infty} \theta^2(x) dx, \quad \mathcal{I}_2 := 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \theta^2(x) \left(\int_0^x \theta(x_1) \varphi(x_1) dx_1 \right) dx. \quad (4.3)$$

Тогда:

- а) для того чтобы ИП, отвечающее собственному значению λ_0 , было одномерным, необходимо и достаточно, чтобы $\mathcal{I}_1 \neq 0$;
- б) для того чтобы ИП, отвечающее собственному значению λ_0 , было двумерным, необходимо и достаточно, чтобы $\mathcal{I}_1 = 0$ и $\mathcal{I}_2 \neq 0$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО: а) некоторая функция $y(x)$ есть первая присоединенная функция, отвечающая собственному значению λ_0 , если она удовлетворяет уравнению

$$-y''(x) + q(x)y(x) - \lambda_0 y(x) = \theta(x). \quad (4.4)$$

Условием разрешимости этого уравнения в $L^2(\mathbf{R})$ является ортогональность правой части к решению сопряженного однородного уравнения (4.4), т.е.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \theta^2(x) dx = 0,$$

если же это условие нарушается, то ИП одномерно;

б) допустим, что ИП двумерно, тогда присоединенный вектор θ_1 , отвечающий λ_0 , запишется в виде

$$\theta_1(x) = \theta(x) \int_0^x \theta(x_1) \varphi(x_1) dx_1 - \varphi(x) \int_{-\infty}^x \theta^2(x_1) dx_1.$$

Следовательно, существование еще одного корневого вектора равносильно разрешимости уравнения (4.4) с функцией θ_1 в правой части, что, в свою очередь, равносильно ортогональности функций θ_1 и $\bar{\theta}$. Нарушение условия ортогональности приводит к условиям $\mathcal{I}_1 = 0$ и $\mathcal{I}_2 \neq 0$. Лемма доказана.

5. ВСПОМОГАТЕЛЬНЫЕ ОЦЕНКИ В СЛУЧАЕ ОДНОМЕРНОГО ИНВАРИАНТНОГО ПОДПРОСТРАНСТВА

Так же как в [2], наряду с функцией $p(T)$, определяемой формулой (1.4), введем в рассмотрение еще одну оценочную функцию

$$r_1(T) := \sup_{t \geq T} \int_{-t}^t |v(x, t)| e^{-2\eta|x|} dx + e^{-2\eta T}, \quad T > 0. \quad (5.1)$$

Для $T > 0$ имеем $r_1(T) \leq p(T)$. Примеры поведения функций $p(T)$ и $r_1(T)$ для различных потенциалов $q(x)$ сходны с примерами, рассмотренными в [2].

Далее, для некоторого произвольного фиксированного положительного числа C_κ и $T > 0$, ограничивая область исследования спектра $\sigma(Q)$ на окрестность точки λ_0 , мы предполагаем, что

$$|\kappa| \leq C_\kappa r_1(T). \quad (5.2)$$

Предположение (5.2) выделяет на комплексной плоскости круг $B_1(T)$ радиуса $C_\kappa r_1(T)$ с центром в нуле, на котором рассматривается уравнение (4.2) и проводятся все вспомогательные оценки.

ЛЕММА 3. Для произвольного числа $C_\kappa > 0$ существует положительное число T_0 такое, что для любого $T \geq T_0$ и любого $\kappa \in B_1(T)$ уравнение (3.6) разрешимо в $C(\mathbf{R})$. Решение $\gamma(x) = \gamma(x, \kappa)$ единственно, и при $|x| \leq T$ справедливы оценки

$$\begin{aligned} |\gamma(x)| &\leq C_\gamma p(T) e^{2\eta|x|} & \text{и} & & |\partial_\kappa \gamma(x)| &\leq C'_\gamma e^{2\eta|x|}, \\ |\ln \alpha(x)| &\leq C_\alpha (|x| r_1(T) + p(T)) & \text{и} & & |\partial_\kappa \ln \alpha(x)| &\leq C'_\alpha |x|, \end{aligned}$$

где C_γ , C'_γ , C_α и C'_α — некоторые постоянные. Можно положить

$$\begin{aligned} C_\gamma &= (1 + C_\kappa/\eta)(C_\varphi + C_\theta)^2 & \text{и} & & C'_\gamma &= 2(C_\varphi + C_\theta)^2/\eta, \\ C_\alpha &= C_\varphi C_\theta (C_\kappa + 1) & \text{и} & & C'_\alpha &= C_\varphi C_\theta + 1. \end{aligned}$$

Лемма 3 является полным аналогом соответствующих лемм из [1, 2] и доказывается теми же средствами. Так же аналогично соответствующим леммам из [1, 2] доказываются следующие ниже леммы 4–6.

ЛЕММА 4. При $T \rightarrow +\infty$ имеют место равномерные относительно $\kappa \in B_1(T)$ и $x \in [-T, T]$ асимптотические формулы

$$\begin{aligned} \gamma(x) &= \int_0^x (\kappa - v(\xi, T)) \varphi^2(\xi) d\xi + e^{2\rho|x|} O(p^2(T)), \\ \partial_\kappa \gamma(x) &= \int_0^x \varphi^2(\xi) d\xi + e^{2\rho|x|} O(p(T)), \\ \ln \alpha(x) &= -\kappa \int_0^x \theta(\xi) \varphi(\xi) d\xi + O(p(T)(1 + |x|r_1(T))), \\ \partial_\kappa \ln \alpha(x) &= -\int_0^x \theta(\xi) \varphi(\xi) d\xi + |x| O(p(T)). \end{aligned}$$

ЛЕММА 5. Пусть C_κ , C_α , C'_α , C_g и C'_g — положительные числа. Причем C_α и C'_α такие же, как в лемме 3, а C_g и C'_g удовлетворяют условиям $C_g > 2|\rho C_+ C_-|$ и $C'_g > C'_\alpha |\rho C_+ C_-|^{-1}$, тогда:

а) существуют положительные числа T_1 , C_h и C'_h такие, что для любого $T \geq T_1$ и любого $\kappa \in B_1(T)$ справедливы неравенства

$$\begin{aligned} |G(\kappa, T)|^{-1} &\leq C_g \exp[-2\eta T + 2C_\alpha T r_1(T)], \\ |\partial_\kappa G(\kappa, T)| &\leq C'_g T \exp[2\eta T + 2C_\alpha T r_1(T)], \\ |H(\kappa, T)| &\leq C_h p(T/2) \exp[2C_\alpha T r_1(T)], \\ |\partial_\kappa H(\kappa, T)| &\leq C'_h (1 + T p(T/2)) \exp[2C_\alpha T r_1(T)]; \end{aligned}$$

б) равномерно относительно $\kappa \in B_1(T)$ при $T \rightarrow +\infty$ имеет место асимптотическая формула

$$\begin{aligned} G^{-1}(\kappa, T) &= -2i\rho C_+ C_- (1 + O(p(T/2))) \times \\ &\times \exp\left[2i\rho T + \kappa \left(\int_0^T - \int_{-T}^0\right) \theta(x) \varphi(x) dx + O(T p(T) r_1(T))\right]. \end{aligned}$$

ЛЕММА 6. При $T \rightarrow +\infty$

$$\begin{aligned} \int_{-T}^T \theta^2(x) \alpha^{-2}(x) dx &= \mathcal{I}_1 + O(p(T)), \\ \int_{-T}^T v(x) \theta^2(x) \alpha^{-2}(x) dx &= \int_{-T}^T v(x) \theta^2(x) dx + O(p(T) r_1(T)) \end{aligned}$$

равномерно относительно $\kappa \in B_1(T)$.

6. СУЩЕСТВОВАНИЕ И АСИМПТОТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНОЙ КОМПОНЕНТЫ В СЛУЧАЕ ОДНОМЕРНОГО ИНВАРИАНТНОГО ПОДПРОСТРАНСТВА

Верна следующая теорема.

ТЕОРЕМА 1. Пусть λ_0 – собственное значение одноатомной задачи (1.1) с одномерным ИП, т.е. $\mathcal{I}_1 \neq 0$. Пусть C_κ и d_0 – положительные числа, удовлетворяющие условиям $C_\kappa > |\mathcal{I}_1|^{-1} \max\{C_\theta^2, 2|\rho C_+ C_-| d_0\}$, если $Tr_1(T) \rightarrow 0$ при $T \rightarrow +\infty$, и $C_\kappa > |\mathcal{I}_1|^{-1} C_\theta^2$ в противном случае. Тогда существует положительное число t_0 такое, что для любого $T \geq t_0$ и любого $d \in [-d_0, d_0]$ уравнение (4.2) в круге $B_1(T)$ имеет одно и только одно решение $\kappa = \kappa(d; T)$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Воспользуемся теоремой Руше для круга $B_1(T)$. Запишем уравнение (4.2) в виде $\kappa = f(\kappa)$, где $f(\kappa)$ – аналитическая в круге функция, зависящая также от d , T и λ_0 :

$$f(\kappa) = \left[\int_{-T}^T v \theta^2 \alpha^{-2} dx + (H - d)G^{-1} \right] \left(\int_{-T}^T \theta^2 \alpha^{-2} dx \right)^{-1}.$$

Используя результаты предыдущего раздела, оценим модуль функции $f(\kappa)$ на границе круга $B_1(T)$ при $T \rightarrow +\infty$:

$$\begin{aligned} |f(\kappa)| &\leq \left[\int_{-T}^T |v| |\theta|^2 dx (1 + o(1)) + (d_0 + |H|)/|G| \right] (|\mathcal{I}_1|^{-1} + o(1)) \leq \\ &\leq |\mathcal{I}_1|^{-1} \int_{-T}^T |v| |\theta|^2 dx + o(r_1(T)) + (d_0 + C_h p(T/2) \exp[2C_\alpha Tr_1(T)]) \times \\ &\quad \times 2|\rho C_+ C_-| |\mathcal{I}_1|^{-1} (1 + o(1)) \exp[-2\eta T + 2C_\alpha Tr_1(T)]. \end{aligned}$$

В случае $Tr_1(T) \rightarrow 0$ при $T \rightarrow +\infty$ для больших T имеем

$$|f(\kappa)| \leq |\mathcal{I}_1|^{-1} \int_{-T}^T |v| |\theta|^2 dx + 2|\rho C_+ C_-| |\mathcal{I}_1|^{-1} d_0 e^{-2\eta T} + o(r_1(T)) < C_\kappa r_1(T).$$

Если $Tr_1(T)$ не стремится к нулю, то для всех достаточно больших T существует такое t_0 , что при $T \geq t_0$ выполняется неравенство $-2\eta + 4C_\alpha r_1(T) < -\eta$. А т.к. $e^{-\eta T} = o(r_1(T))$, то мы получаем

$$|f(\kappa)| \leq |\mathcal{I}_1|^{-1} \int_{-T}^T |v| |\theta|^2 dx + o(r_1(T)) \leq |\mathcal{I}_1|^{-1} C_\theta^2 r_1(T) (1 + o(1)) < C_\kappa r_1(T).$$

Следовательно, существует $t_0 > 0$ такое, что при $T \geq t_0$ на границе круга $B_1(T)$ верно неравенство $|f(\kappa)| < |\kappa|$. Тогда согласно теореме Руше функция $f(\kappa) - \kappa$ имеет внутри круга $B_1(T)$ столько же нулей, сколько функция κ , т.е. ровно один. Теорема доказана.

В соответствии с формулой (2.3) имеем следующее следствие теоремы 1.

СЛЕДСТВИЕ 1. Пусть $d_0 \geq 2$, $\mathcal{I}_1 \neq 0$, $C > |\mathcal{I}_1|^{-1} \max\{C_\theta^2, 2|\rho C_+ C_-|d_0\}$ и пусть $\kappa(d; T)$ при $|d| \leq d_0$ является таким решением уравнения (4.2), что $|\kappa(d; T)| \leq Cr_1(T)$ для больших T . Положим согласно (3.1) $\lambda(d; T) = \lambda_0 + \kappa(d; T)$. Тогда, для того чтобы $\lambda(d; T) \in \sigma(Q)$, необходимо и достаточно, чтобы $d \in [-2, 2]$. Следовательно, криволинейный отрезок $\{\lambda(d; T) : -2 \leq d \leq 2\}$ совпадает с изолированной для больших T спектральной компонентой, лежащей вблизи λ_0 .

Таким образом мы доказали существование спектральной компоненты вблизи λ_0 . Приведем теперь формулы, асимптотически описывающие эту компоненту.

ТЕОРЕМА 2. Пусть функция $q(x) \in L^1(\mathbf{R})$, число $T > 0$ и функция $Q(x; T)$ определена формулой (2.1). Пусть $\lambda_0 \notin [0, +\infty)$ – собственное значение и $\theta(x) \in L^2(\mathbf{R})$ – соответствующая собственная функция задачи (1.1) такая, что $\|\theta\|_{L^2(\mathbf{R})} = 1$ и $\mathcal{I}_1 := \int_{-\infty}^{+\infty} \theta^2(x) dx \neq 0$. Пусть функция $\varphi(x)$ – какое-либо решение уравнения (1.1) при $\lambda = \lambda_0$ такое, что $W[\theta, \varphi] \equiv 1$. Положим $V(T) := \int_{-T}^T (Q(x; T) - q(x))\theta^2(x) dx$, $U(T) := \left(\int_0^T - \int_{-T}^0\right) \theta(x)\varphi(x) dx$. Пусть, далее, $\rho = \sqrt{\lambda_0}$, $\text{Im } \rho > 0$, числа C_θ и $C_\pm$ такие же, как в (1.3) и лемме 1, а функции $p(T)$ и $r_1(T)$ определены формулами (1.4) и (5.1), соответственно. Тогда, если $C > |\mathcal{I}_1|^{-1} \max\{C_\theta^2, 4|\rho C_+ C_-|\}$ и $\kappa(d; T)$ – решение уравнения (4.2) при $d \in [-2, 2]$ такое, что $|\kappa(d; T)| \leq Cr_1(T)$ для больших T , то верны следующие утверждения:

- 1) $\lambda(d; T) = \lambda_0 + \kappa(d; T) \in \sigma(Q)$ при $d \in [-2, 2]$;
- 2) $\lambda(\pm 2; T)$ – края спектральной компоненты;
- 3) имеет место асимптотическая формула

$$\lambda(0; T) = \lambda_0 + [V(T)/\mathcal{I}_1] + \varepsilon_1(T),$$

где $\varepsilon_1(T) = o(r_1(T))$ при $T \rightarrow +\infty$;

4) справедлива формула для параметрического представления спектральной компоненты

$$\lambda(d; T) = \lambda(0; T) + \Delta(d; T)de^{2i\rho T},$$

причем для $\Delta(d; T)$ верны следующие асимптотические формулы:

а) в общем случае

$$\ln[\Delta(d; T)] = V(T)U(T) + \varepsilon_2(T),$$

где $\varepsilon_2(d; T) = O(1 + Tp(T)r_1(T))$ при $T \rightarrow +\infty$ равномерно по $d \in [-2, 2]$,

б) для такого потенциала $q(x)$, что $Tp(T)r_1(T) \rightarrow 0$ при $T \rightarrow +\infty$,

$$\Delta(d; T) = 2i\rho C_+ C_- \mathcal{I}_1^{-1} (1 + \varepsilon_3(d; T)) \exp[V(T)U(T)],$$

где $\varepsilon_3(d; T) = o(1)$ при $T \rightarrow +\infty$ равномерно по $d \in [-2, 2]$,

в) для такого потенциала $q(x)$, что $Tr_1(T)$ ограничена при любом T ,

$$\Delta(d; T) = 2i\rho C_+ C_- \mathcal{I}_1^{-1} (1 + \varepsilon_4(d; T)) \exp[(iT/\rho)V(T)],$$

где $\varepsilon_4(d; T) = o(1)$ при $T \rightarrow +\infty$ равномерно по $d \in [-2, 2]$,

г) для такого потенциала $q(x)$, что $r_1(T)T \rightarrow 0$ при $T \rightarrow +\infty$,

$$\Delta(d; T) = 2i\rho C_+ C_- \mathcal{I}_1^{-1} (1 + \varepsilon_5(d; T)),$$

где $\varepsilon_5(d; T) = o(1)$ при $T \rightarrow +\infty$ равномерно по $d \in [-2, 2]$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО теоремы 2 опирается на факты, установленные в разделе 5, и проводится так же, как доказательство теоремы 2 из [2].

7. ВСПОМОГАТЕЛЬНЫЕ ОЦЕНКИ В СЛУЧАЕ ДВУМЕРНОГО ИНВАРИАНТНОГО ПОДПРОСТРАНСТВА

Необходимо отметить, что когда собственному значению λ_0 одноатомной задачи отвечает ИП размерности l , то к этому собственному значению стремятся ровно l спектральных компонент периодической задачи (ср. [13]). Поэтому, ограничивая исследование спектра $\sigma(Q)$ некоторой окрестностью точки λ_0 , которой отвечает двумерное ИП, мы вынуждены следить за двумя спектральными компонентами. Для этого введем дополнительную оценочную функцию

$$r_2(T) := \sup_{t \geq T} \left(\int_{-T}^T |v(x, t)| e^{-2\eta|x|} dx \right)^{1/2} + e^{-\eta T}, \quad T > 0. \quad (7.1)$$

Заметим, что при таком определении $r_2(T) = O(p^{1/2}(T))$ при $T \rightarrow +\infty$.

Для произвольного фиксированного положительного числа C_κ выделяем на комплексной плоскости круг $B_2(T)$ радиуса $C_\kappa r_2(T)$ с центром в нуле, на котором в дальнейшем рассмотрим основное уравнение (4.2) и проведем вспомогательные оценки.

Леммы 3 и 5 в этом случае необходимо переформулировать в новых терминах.

ЛЕММА 7. *Для произвольного числа $C_\kappa > 0$ существует положительное число T_0 такое, что для любого $T \geq T_0$ и любого $\kappa \in B_2(T)$ уравнение (3.6) разрешимо в $C(\mathbf{R})$. Решение $\gamma(x) = \gamma(x, \kappa)$ единственно и при $|x| \leq T$ справедливы оценки*

$$\begin{aligned} |\gamma(x)| &\leq C_\gamma (r_2(T) + p(T)e^{2\eta|x|}) & \text{и} & & |\partial_\kappa \gamma(x)| &\leq C'_\gamma e^{2\eta|x|}, \\ |\ln \alpha(x)| &\leq C_\alpha (r_2(T)|x| + p(T)) & \text{и} & & |\partial_\kappa \ln \alpha(x)| &\leq C'_\alpha |x|, \end{aligned}$$

где C_γ , C'_γ , C_α и C'_α — некоторые постоянные. Можно положить

$$\begin{aligned} C_\gamma &= (1 + C_\kappa/\eta)(C_\varphi + C_\theta)^2 & \text{и} & & C'_\gamma &= 2(C_\varphi + C_\theta)^2/\eta, \\ C_\alpha &= C_\varphi C_\theta (C_\kappa + 1) & \text{и} & & C'_\alpha &= C_\varphi C_\theta + 1. \end{aligned}$$

ЛЕММА 8. *Пусть $C_\kappa, C_\alpha, C'_\alpha, C_g$ и C'_g — положительные числа, причем C_α и C'_α такие же, как в лемме 7, а C_g и C'_g удовлетворяют условиям $C_g > 2|\rho C_+ C_-|$ и $C'_g > C'_\alpha |\rho C_+ C_-|^{-1}$. Тогда:*

а) *существуют положительные числа T_1 , C_h и C'_h такие, что для любого $T \geq T_1$ и любого $\kappa \in B_2(T)$ справедливы неравенства*

$$\begin{aligned} |G(\kappa, T)|^{-1} &\leq C_g \exp[-2\eta T + 2C_\alpha T r_2(T)], \\ |\partial_\kappa G(\kappa, T)| &\leq C'_g T \exp[2\eta T + 2C_\alpha T r_2(T)], \\ |H(\kappa, T)| &\leq C_h p(T/2) \exp[2C_\alpha T r_2(T)], \\ |\partial_\kappa H(\kappa, T)| &\leq C'_h (1 + T p(T/2)) \exp[2C_\alpha T r_2(T)]; \end{aligned}$$

б) *равномерно относительно* $\kappa \in B_2(T)$ *при* $T \rightarrow +\infty$ *имеет место асимптотическая формула*

$$G^{-1}(\kappa, T) = -2i\rho C_+ C_- (1 + O(p(T/2))) \exp \left[2i\rho T + \right. \\ \left. + \kappa \left(\int_0^T - \int_{-T}^0 \right) \theta(x) \varphi(x) dx + O(Tp(T)r_2(T)) \right].$$

Как уже отмечалось, основная специфика рассматриваемой задачи связана с асимптотической малостью интеграла $\int_{-T}^T \theta^2(x) \alpha^{-2}(x) dx$. Поэтому мы должны рассмотреть асимптотическое поведение этого интеграла более подробно.

ЛЕММА 9. Пусть $\mathcal{I}_1 = 0$ и $\mathcal{I}_2 \neq 0$. Тогда при $T \rightarrow +\infty$

$$\int_{-T}^T \theta^2(x) \alpha^{-2}(x) dx = \mathcal{I}_2 \kappa + o(r_2(T))$$

равномерно относительно $\kappa \in B_2(T)$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Последовательное интегрирование по частям с учетом уравнения (3.5) приводит к следующему тождеству для произвольного t :

$$\begin{aligned} \int_0^t \theta^2(x) \alpha^{-2}(x) dx &= \int_0^t \theta^2(x) dx + 2\kappa \int_0^t \int_x^t \theta^2(x_1) \theta(x) \varphi(x) dx_1 dx + \\ &+ 2\kappa \int_0^t \int_x^t \theta^2(x_1) \gamma(x) \theta^2(x) dx_1 dx - \\ &- 2 \int_0^t \int_x^t \theta^2(x_1) v(x) \theta(x) (\varphi(x) + \gamma(x) \theta(x)) dx_1 dx + \\ &+ 4 \int_0^t \int_x^t \int_{x_1}^t \theta^2(x_2) w(x_1) \theta(x_1) (\varphi(x_1) + \gamma(x_1) \theta(x_1)) \times \\ &\times \alpha^{-2}(x) w(x) \theta(x) (\varphi(x) + \gamma(x) \theta(x)) dx_2 dx_1 dx. \end{aligned} \quad (7.2)$$

Из равенства (7.2), учитывая что $\mathcal{I}_1 = 0$ и

$$\int_0^t \int_x^t \theta^2(x_1) \theta(x) \varphi(x) dx_1 dx = \int_0^t \theta^2(x_1) \left(\int_0^{x_1} \theta(x) \varphi(x) dx \right) dx_1,$$

мы получаем оценку

$$\begin{aligned} \left| \int_{-T}^T \theta^2(x) \alpha^{-2}(x) dx - 2\kappa \int_{-T}^T \theta^2(x) \left(\int_0^x \theta(x_1) \varphi(x_1) dx_1 \right) dx \right| = \\ = O(r_2(T)p(T)) + O(r_2^2(T)) + o(r_2(T)) = o(r_2(T)). \end{aligned}$$

Отсюда, используя соотношение

$$\int_{-T}^T \theta^2(x) \left(\int_0^x \theta(x_1) \varphi(x_1) dx_1 \right) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \theta^2(x) \left(\int_0^x \theta(x_1) \varphi(x_1) dx_1 \right) dx + o(1),$$

мы приходим к требуемой формуле. Лемма доказана.

Совершенно аналогично доказательству леммы 7 из [2] доказывается следующая лемма.

ЛЕММА 10. При $T \rightarrow +\infty$

$$\int_{-T}^T v(x) \theta^2(x) \alpha^{-2}(x) dx = \int_{-T}^T v(x) \theta^2(x) dx + O(p(T)r_2(T))$$

равномерно относительно $\kappa \in B_2(T)$.

8. СУЩЕСТВОВАНИЕ И АСИМПТОТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ КОМПОНЕНТ В СЛУЧАЕ ДВУМЕРНОГО ИНВАРИАНТНОГО ПОДПРОСТРАНСТВА

Верна следующая теорема.

ТЕОРЕМА 3. Пусть λ_0 – собственное значение одноатомной задачи (1.1) с двумерным ИП, т.е. $\mathcal{I}_1 = 0$ и $\mathcal{I}_2 \neq 0$, где $\mathcal{I}_1$ и $\mathcal{I}_2$ определены уравнениями (4.3). И пусть C_κ и d_0 – положительные числа, удовлетворяющие условиям $C_\kappa^2 > |\mathcal{I}_2|^{-1} \max\{C_\theta^2, 2|\rho C_+ C_-|d_0\}$, если $Tr_2(T) \rightarrow 0$ при $T \rightarrow +\infty$ и $C_\kappa^2 > |\mathcal{I}_2|^{-1} C_\theta^2$ в противном случае. Тогда существует положительное число t_0 такое, что для любого $T \geq t_0$ и любого $d \in [-d_0, d_0]$ уравнение (4.2) в круге $B_2(T)$ имеет ровно два решения $\kappa = \kappa(d; T)$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Уравнение (4.2) удобно кратко записать теперь как $\kappa^2 = g(\kappa)$, где $g(\kappa)$ – аналитическая в круге $B_2(T)$ функция, зависящая также от d , T и λ_0 :

$$g(\kappa) = \frac{1}{\mathcal{I}_2} \left[\int_{-T}^T v \theta^2 \alpha^{-2} dx + (H - d)G^{-1} \right] + \frac{\kappa}{\mathcal{I}_2} \left(\mathcal{I}_2 \kappa - \int_{-T}^T \theta^2 \alpha^{-2} dx \right).$$

Далее, используя результаты предыдущего раздела, оценим по модулю функцию $g(\kappa)$ на границе круга:

$$\begin{aligned} |g(\kappa)| &\leq \left[\int_{-T}^T |v| |\theta|^2 dx (1 + o(1)) + (d_0 + |H|)/|G| \right] |\mathcal{I}_2|^{-1} + o(r_2^2(T)) \leq \\ &\leq |\mathcal{I}_2|^{-1} \int_{-T}^T |v| |\theta|^2 dx + o(r_2^2(T)) + (d_0 + C_h p(T/2) \exp[2C_\alpha T r_2(T)]) \times \\ &\quad \times 2|\rho C_+ C_-| |\mathcal{I}_2|^{-1} (1 + o(1)) \exp[-2\eta T + 2C_\alpha T r_2(T)]. \end{aligned}$$

Если $Tr_2(T) \rightarrow 0$ при $T \rightarrow +\infty$, то для больших T имеем

$$|g(\kappa)| \leq |\mathcal{I}_2|^{-1} \int_{-T}^T |v| |\theta|^2 dx + 2|\rho C_+ C_-| |\mathcal{I}_2|^{-1} d_0 e^{-2\eta T} + o(r_2^2(T)) < C_\kappa^2 r_2^2(T).$$

В противном случае, если $Tr_2(T)$ не стремится к нулю, для всех достаточно больших T существует такое t_0 , что при $T \geq t_0$ выполняется неравенство $-2\eta + 4C_\alpha r_2(T) < -\eta$. А т.к. $e^{-\eta T} T^2 \rightarrow 0$, то $e^{-\eta T} = o(r_2^2(T))$, и мы получаем

$$|g(\kappa)| \leq |\mathcal{I}_2|^{-1} \int_{-T}^T |v| |\theta|^2 dx + o(r_2^2(T)) \leq |\mathcal{I}_2|^{-1} C_\theta^2 r_2^2(T) (1 + o(1)) < C_\kappa^2 r_2^2(T).$$

Следовательно, существует $t_0 > 0$ такое, что при $T \geq t_0$ на границе круга $B_2(T)$ верно неравенство $|g(\kappa)| < |\kappa|^2$. Тогда согласно теореме Руше функция $g(\kappa) - \kappa^2$ имеет внутри круга $B_2(T)$ столько же нулей, сколько функция κ^2 , т.е. ровно два. Теорема доказана.

В соответствии с формулой (2.3) имеем следующее следствие теоремы 3.

СЛЕДСТВИЕ 2. Пусть $\mathcal{I}_1 = 0$, $\mathcal{I}_2 \neq 0$, $d_0 \geq 2$, C — положительное число такое, что выполняется неравенство $C^2 > |\mathcal{I}_2|^{-1} \max\{C_\theta^2, 2|\rho C_+ C_-|d_0\}$. И пусть $\kappa_{1,2}(d; T)$ при $|d| \leq d_0$ являются такими решениями уравнения (4.2), что $|\kappa_{1,2}(d; T)| \leq Cr_2(T)$ для больших T . Положим согласно (3.1) $\lambda_{1,2}(d; T) = \lambda_0 + \kappa_{1,2}(d; T)$. Тогда, для того чтобы $\lambda_{1,2}(d; T) \in \sigma(Q)$, необходимо и достаточно, чтобы $d \in [-2, 2]$. Следовательно, пара криволинейных отрезков $\{\lambda_{1,2}(d; T) : -2 \leq d \leq 2\}$ совпадает с двумя изолированными спектральными компонентами, лежащими вблизи λ_0 .

Таким образом, мы доказали существование пары спектральных компонент вблизи λ_0 . Приведем теперь формулы, асимптотически описывающие эти компоненты. Далее везде под выражением $z^{1/2}$ мы понимаем оба значения квадратного корня из комплексного числа z .

ТЕОРЕМА 4. Пусть функция $q(x) \in L^1(\mathbf{R})$, число $T > 0$ и функция $Q(x, T)$ определена формулой (2.1). Пусть λ_0 — собственное значение и $\theta(x) \in L^2(\mathbf{R})$ — собственная функция задачи (1.1) такая, что $\|\theta\|_{L^2(\mathbf{R})} = 1$, $\mathcal{I}_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \theta(x)^2 dx = 0$. Пусть функция $\varphi(x)$ — какое-либо решение уравнения (1.1) при $\lambda = \lambda_0$, удовлетворяющее условию $W[\theta, \varphi] \equiv 1$, причем $\mathcal{I}_2 := 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \theta^2(x) \left(\int_0^x \theta(t) \varphi(t) dt \right) dx \neq 0$. Положим $V(T) := \int_{-T}^T (Q(x; T) - q(x)) \theta^2(x) dx$, $U(T) := \left(\int_0^T - \int_{-T}^0 \right) \theta(x) \varphi(x) dx$. Пусть $\rho = \sqrt{\lambda_0}$, $\eta = \text{Im } \rho > 0$, числа C_θ и $C_\pm$ такие же, как в (1.3) и лемме 1, а функции $r(T)$ и $r_2(T)$ определены формулами (1.4) и (7.1), соответственно. Тогда, если $C^2 > |\mathcal{I}_2|^{-1} \max\{C_\theta^2, 4|\rho C_+ C_-|\}$ и $\kappa(d; T)$ — решение уравнения (4.2) при $d \in [-2, 2]$ такое, что $|\kappa(d; T)| \leq Cr_2(T)$ для больших T , то верны следующие утверждения:

- 1) $\lambda(d; T) = \lambda_0 + \kappa(d; T) \in \sigma(Q)$ при $d \in [-2, 2]$;
- 2) $\lambda(\pm 2; T)$ — края спектральных компонент;
- 3) имеет место асимптотическая формула для “центров” спектральных компонент

$$\lambda_{1,2}(0; T) = \lambda_0 + s_1^{1/2}(T), \quad (8.1)$$

где

$$s_1(T) = [V(T)/\mathcal{I}_2] + \varepsilon_1(T), \quad (8.2)$$

а $\varepsilon_1(T) = o(r_2^2(T))$ при $T \rightarrow +\infty$;

- 4) если при некотором положительном δ и всех достаточно больших T выполняется неравенство

$$|\lambda_1(0; T) - \lambda_2(0; T)| < \exp((-\eta - \delta)T),$$

то для описания спектра вблизи λ_0 имеет место асимптотическая формула

$$\lambda_{1,2}(d; T) = \lambda_0 + (2i\rho C_+ C_- d / \mathcal{I}_2)^{1/2} \exp[i\rho T] + \varepsilon_2(d; T), \quad (8.3)$$

где $\varepsilon_2(d; T) = o(e^{i\rho T})$ равномерно относительно $d \in [-2, 2]$ при $T \rightarrow +\infty$;

5) если при некотором положительном δ и всех достаточно больших T выполняется неравенство

$$|\lambda_1(0; T) - \lambda_2(0; T)| > \exp((-\eta + \delta)T),$$

то для описания спектра вблизи λ_0 имеет место асимптотическая формула

$$\lambda_{1,2}(d; T) = \lambda_{1,2}(0; T) + (d/2)s_1^{-1/2}(T)s_2(d; T)e^{2i\rho T}, \quad (8.4)$$

где для функции $s_2(d; T)$ имеют место следующие асимптотические выражения:

а) в общем случае

$$\ln s_2(d; T) = V(T)U(T) + \varepsilon_3(d; T),$$

где $\varepsilon_3(d; T) = O(1 + \text{Tr}(T)r_2(T))$ равномерно относительно $d \in [-2, 2]$ при $T \rightarrow +\infty$,

б) для такого потенциала $q(x)$, что $\text{Tr}(T)r_2(T) \rightarrow 0$ при $T \rightarrow +\infty$,

$$s_2(d; T) = 2i\rho C_+ C_- \mathcal{I}_2^{-1}(1 + \varepsilon_4(d; T)) \exp[V(T)U(T)],$$

где $\varepsilon_4(d; T) = o(1)$ равномерно относительно $d \in [-2, 2]$ при $T \rightarrow +\infty$,

в) для такого потенциала $q(x)$, что $\text{Tr} r_2(T)$ ограничена при любом T ,

$$s_2(d; T) = 2i\rho C_+ C_- \mathcal{I}_2^{-1} \exp[(iT/2\rho)V(T)](1 + \varepsilon_5(d; T)),$$

где $\varepsilon_5(d; T) = o(1)$ равномерно относительно $d \in [-2, 2]$ при $T \rightarrow +\infty$,

г) для такого потенциала $q(x)$, что $\text{Tr} r_2(T) \rightarrow 0$ при $T \rightarrow +\infty$,

$$s_2(d; T) = 2i\rho C_+ C_- \mathcal{I}_2^{-1}(1 + \varepsilon_6(d; T)),$$

где $\varepsilon_6(d; T) = o(1)$ равномерно относительно $d \in [-2, 2]$ при $T \rightarrow +\infty$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. В рассматриваемом случае уравнение (4.2) переписывается в виде

$$\lambda_{1,2}(d; T) = \lambda_0 + [s_1(T) + ds(d; T)]^{1/2}, \quad (8.5)$$

при этом $s_1(T) = \{1/\mathcal{I}_2\} \left[\int_{-T}^T v\theta^2 \alpha^{-2} dx + HG^{-1} \right] (1 + o(1))$, $s(d; T) = \{-G\mathcal{I}_2\}^{-1} \times (1 + o(1))$, когда $T \rightarrow +\infty$. Положив здесь $d = 0$, в силу лемм 8 и 10 мы получаем формулы (8.1) и (8.2). С другой стороны, чтобы разложить корень в правой части (8.5), мы должны учесть относительное асимптотическое поведение функций $s_1(T)$ и $s(d; T)$ при $T \rightarrow +\infty$. Если $s_1(T) = o(s(d; T))$, что гарантируется условием утверждения 4, то формула (8.5) принимает вид $\lambda_{1,2}(d; T) = \lambda_0 + (ds(d; T))^{1/2} + o(s(d; T))$. С учетом леммы 8 мы приходим к результату (8.3). Если же $s(d; T) = o(s_1(T))$ при $T \rightarrow +\infty$, что выполняется при условии утверждения 5, то (8.5) можно записать в виде (8.4), принимая $s(d; T) = s_2(d; T)e^{2i\rho T}$. В остальном доказательство теоремы 4 проводится аналогично доказательству теоремы 2 из работы [2].

В заключение отметим, что с помощью техники статьи [19] аналогичные результаты могут быть получены для разностного оператора.

9. ПРИМЕРЫ

Как видно из теорем 2 и 4, различные tb -формулы получаются при различных степенях убывания исходного потенциала одноатомной задачи. В свою очередь, степень убывания потенциала в предложенной схеме классифицируется порядком убывания функций $p(T)$, $r_1(T)$ и $r_2(T)$. В статье [2] приведены примеры вещественных потенциалов, иллюстрирующие различное асимптотическое поведение спектральных зон. Рассмотрение комплекснозначных потенциалов с таким же асимптотическим поведением на бесконечности, как в указанных примерах, приводит к различным степеням убывания оценочных функций $p(T)$ и $r_1(T)$, а следовательно, к различным tb -формулам в случае одномерного ИП.

Новым моментом, качественно отличающим случай комплекснозначного потенциала от вещественного, является возможность возникновения присоединенных функций. Именно это мы показываем в приведенных ниже примерах. Достаточно рассмотреть простейший потенциал, состоящий из двух дельта-функций.

Для потенциала с одной дельта-функцией $q(x) = q_0\delta(x)$, $q_0 \in \mathbb{C}$, при условии $\operatorname{Re} q_0 < 0$ существует лишь одно собственное значение $\lambda_0 = -q_0^2/4$ с одномерным ИП. Если рассмотреть потенциал, представляющий собой сумму двух дельта-функций, т.е. $q(x) = q_0(\delta(x-a) + \delta(x+a))$, $a > 0$, $q_0 \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$, то для определенных значений q_0 мы получим пример существования собственного значения с двумерным ИП. Однако трехмерного ИП ни при каких q_0 не возникает. Простейший пример потенциала с трехмерным ИП может быть построен в виде суммы двух дельта-функций с разными весами: $q(x) = q_1\delta(x-a) + q_2\delta(x+a)$, $a > 0$, $q_1, q_2 \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$. Отметим, что потенциал, состоящий из суммы двух дельта-функций, традиционно рассматривается как модель водородоподобных атомов и двухатомных молекул [20, 21]. Уравнение, описывающее связанные состояния в этой модели, сохраняет свой вид как для вещественных, так и для комплексных параметров q_1 и q_2 :

$$q_1 q_2 e^{4i\rho a} = (q_1 - 2i\rho)(q_2 - 2i\rho). \quad (9.1)$$

Решение этого трансцендентного уравнения в алгебраической форме затруднительно. Тем не менее, как отмечено в [21], в случае одинаковых весов корни уравнения, а следовательно, и собственные значения, явно выражаются через функцию Ламберта $W(z)$ (по определению $W(z) \exp(W(z)) \equiv z$) [22].

Рассмотрим теперь соответствующие периодические задачи. Поскольку все эти задачи явно решаемы, то tb -формулы в данном случае могут быть получены двумя способами: из теорем 2 или 4 и прямым асимптотическим исследованием при $T \rightarrow \infty$ конкретной функции Ляпунова. Приведем результаты вычислений, проведенных с помощью компьютерной алгебраической системы Maple V [23].

Рассмотрим потенциал типа $q(x) = q_1 \delta(x - a) + q_2 \delta(x + a)$. Фиксируем произвольное число $\lambda_0 \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}_+$ и положим $\lambda_0 = \rho^2$, $\eta := \operatorname{Im} \rho > 0$. Подставляя λ_0 в уравнение (9.1), находим связь между q_1 и q_2 . Далее, для любого $q_1 \neq 2i\rho$ однозначно определяется q_2 и для этой пары весов выбранное число λ_0 будет являться собственным значением уравнения (1.1). Если числу λ_0 соответствует одномерное ИП, то по теореме 2 мы получаем следующую tb-формулу:

$$\lambda(d; T) = \rho^2 - \frac{4id\rho^3}{2aAB + A + B} e^{2iT\rho} + o(e^{-2T\eta}), \quad -2 \leq d \leq 2. \quad (9.2)$$

Здесь и далее $A = q_1 - 2i\rho$, $B = q_2 - 2i\rho$. Если исследовать асимптотическое поведение функции Ляпунова для данного λ_0 , то естественным образом возникает знаменатель формулы (9.2). Вследствие теоремы 2 обращение в нуль знаменателя формулы (9.2) дает условие существования по крайней мере одной присоединенной функции, отвечающей выбранному собственному значению λ_0 . Таким образом, в соответствии с теоремой 4, если ρ является простым корнем знаменателя (9.2), а следовательно, кратным корнем уравнения (9.1), имеет место следующая tb-асимптотическая формула:

$$\lambda_{1,2}(d; T) = \rho^2 + 2i\rho^2 \left(\frac{2dAB}{A^2 + B^2} \right)^{1/2} e^{iT\rho} + o(e^{-T\eta}), \quad -2 \leq d \leq 2. \quad (9.3)$$

Эта же формула получается прямым вычислением. Аналогично нули знаменателя формулы (9.3), т.е. нули кратности три уравнения (9.1), соответствуют собственному значению с ИП размерности три (например, при $a = 1$ можно взять $\rho = 0.67715 + i0.17858$, $q_1 = 2i\rho + (i - 1)/2$, $q_2 = 2i\rho - (i + 1)/2$).

Далее проанализируем геометрию спектральных компонент, определяемую главными членами tb-асимптотических формул (9.2), (9.3). Прежде всего отметим симметрию возникающих картин относительно $\lambda_0 = \rho^2$. Эти картины при каждом T строятся из отрезков, количество которых равно размерности соответствующего ИП. Единственной точкой пересечения этих отрезков является λ_0 , а все углы между ними равны. Каждая из картин вращается вокруг λ_0 , и угол поворота линейен по T . Однако скорости вращения различны. Длины отрезков убывают экспоненциально. Возникновение всякой новой присоединенной функции степенным образом увеличивает диаметр tb-спектра.

При $q_1 = q_2 = q_0$ уравнение (9.1), определяющее собственные значения, распадается на два независимых уравнения, отвечающих четной и нечетной собственным функциям, а именно

$$ue^u = \pm q_0 a e^{q_0 a},$$

где $u = (q_0 - 2i\rho)a$. Решения этих уравнений записываются через функцию Ламберта W следующим образом:

$$u = W(\pm q_0 a e^{q_0 a}). \quad (9.4)$$

Заметим, что соотношение (9.4) для любого q_0 определяет бесконечное число решений в силу многолистности функции W . Однако интересующие нас решения определяются

дополнительным условием $\text{Im } \rho > 0$, что накладывает ограничения на q_0 для существования собственного значения. Например, при вещественных $q_0 > 0$ собственных значений нет. Подробный анализ показывает, что для любого q_0 число собственных значений всегда конечно, хотя и может быть сколь угодно большим при правильном выборе q_0 . Аналогичным образом разрешаются условия двумерности ИП:

$$\rho = \frac{-i}{2a} \left(1 + W \left(\mp \frac{1}{e} \right) \right), \quad \text{Im } \rho > 0.$$

Далее надо обеспечить выполнение условия (9.1) подбором соответствующего значения $q_0 = q_1 = q_2$.

И, наконец, для “гребенки Дирака” ($a = 0$, $q_1 + q_2 = q_0$, $\rho = -iq_0/2$) приведем уточненную tb-формулу:

$$\lambda(d; T) = \rho^2 + 2d\rho^2 e^{2iT\rho} + 4id^2 T \rho^3 e^{-4T\rho} + O(e^{4iT\rho}), \quad -2 \leq d \leq 2. \quad (9.5)$$

Третье слагаемое в этой формуле содержит предэкспоненциальный множитель T . Ранее мы наблюдали появление предэкспоненты во втором слагаемом для медленно убывающих потенциалов. Формула (9.5) показывает, что подобный множитель появляется в третьем слагаемом даже для потенциалов нулевого радиуса.

Авторы выражают искреннюю благодарность Б. С. Павлову и М. М. Фаддееву за полезные обсуждения излагаемых вопросов, а также рецензенту за содержательные замечания. На различных этапах работы над данной статьей исследования были поддержаны Фондом помощи американского математического общества странам бывшего Советского Союза, Международной Соросовской программой образования в области точных наук и грантом INTAS-93-1813.

Список литературы

- [1] V. L. Oleinik. J. Stat. Phys. 1990. V. 59. № 3/4. P. 665–678.
- [2] А. Л. Миронов, В. Л. Олейник. ТМФ. 1994. Т. 99. № 1. С. 103–120.
- [3] И. М. Глазман. Прямые методы качественного спектрального анализа сингулярных дифференциальных операторов. М.: Физматгиз, 1963.
- [4] М. А. Наймарк. Линейные дифференциальные операторы. М.: Наука, 1969.
- [5] Э. Ч. Титчмарш. Разложения по собственным функциям, связанные с дифференциальными уравнениями второго порядка. Т. 2. М.: ИИЛ, 1961.
- [6] М. Рид, Б. Саймон. Методы современной математической физики. Анализ операторов. Т. 4. М.: Мир, 1982.
- [7] М. И. Серов. ДАН СССР. 1960. Т. 131. № 1. С. 27–29.
- [8] Ф. С. Рофе-Бекетов. ДАН СССР. 1963. Т. 152. № 6. С. 1312–1315.
- [9] В. А. Ткаченко. ДАН СССР. 1964. Т. 155. № 2. С. 289–291.
- [10] А. И. Ансельм. Введение в теорию полупроводников. М.: Наука, 1978.
- [11] Ф. Бассани, Дж. Пастори Парравичини. Электронные состояния и оптические переходы в твердых телах. М.: Наука, 1982.

- [12] Дж. Каллуэй. Теория энергетической зонной структуры. М.: Мир, 1969.
- [13] G. V. Galloponov, V. L. Oleinik, B. S. Pavlov. J. Math. Phys. 1993. V. 34. № 3. P. 936.
- [14] Л. А. Пастур, В. А. Ткаченко. Мат. заметки. 1991. Т. 50. № 4. С. 88–95.
- [15] V. A. Tkachenko. Ann. Math. 1996. V. 143. P. 181.
- [16] V. A. Tkachenko. Adv. Sov. Math. 1994. V. 19. P. 41.
- [17] В. Э. Лянце. Несамосопряженный дифференциальный оператор второго порядка на полуоси. Добавление к кн. М. А. Наймарк. Линейные дифференциальные операторы. М.: Наука, 1969.
- [18] З. Флюгге. Задачи по квантовой механике. Т. 1. М.: Мир, 1974.
- [19] A. L. Mironov, V. L. Oleinik. J. Stat. Phys. 1994. V. 75. № 1/2. P. 317.
- [20] A. A. Frost. J. Chem. Phys. 1956. V. 25. № 6. P. 1150.
- [21] T. C. Scott, J. F. Babb, A. Dalgarno, J. D. Morgan III. J. Chem. Phys. 1993. V. 99. № 4. P. 2841.
- [22] R. M. Corless, G. H. Gonnet, D. E. G. Hare, D. J. Jeffrey, D. E. Knuth. Adv. Comput. Math. (in press).
- [23] B. W. Char, K. O. Geddes, G. H. Gonnet, B. L. Leong, M. B. Monagan, S. M. Watt. Maple V Language Reference Manual. New York: Springer, 1991.

Поступила в редакцию 26.II.1997 г.

A. L. Mironov, V. L. Oleinik
LIMITS OF APPLICABILITY
OF THE TIGHT BINDING APPROXIMATION
FOR COMPLEX-VALUED POTENTIAL FUNCTION

We consider a one-dimensional Schrödinger operator with periodic potential that is constructed as a sum of shifts of a given complex-valued potential $q \in L^1(\mathbf{R})$. A mathematical basis of the tight binding approximation in this case is given. Let λ_0 be an isolated eigenvalue of Schrödinger operator with potential q . Then for the operator with periodic potential there exists a continuous spectrum that lies near λ_0 . An asymptotic behavior of this part of the spectrum for the cases of one- and two-dimensional invariant subspace corresponding to λ_0 when the period tends to infinity is studied.