Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

И. Ю. Попов, Асимптотика спектра оператора Шредингера для слоев, связанных малыми отверстиями, *ТМФ*, 2002, том 131, номер 3, 407–418

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf337>

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: 54.162.127.20

26 апреля 2023 г., 04:23:31

© 2002 г.

И. Ю. Попов*

АСИМПТОТИКА СПЕКТРА ОПЕРАТОРА ШРЕДИНГЕРА ДЛЯ СЛОЕВ, СВЯЗАННЫХ МАЛЫМИ ОТВЕРСТИЯМИ

Построены асимптотики собственных значений и зон для оператора Лапласа задачи Дирихле в двух трехмерных слоях, связанных через малые отверстия. Используется метод согласования асимптотических разложений решений краевых задач.

1. ВВЕДЕНИЕ

Новейшие исследования в области нанoeлектроники позволяют создавать различные мезоскопические структуры. Характерные свойства этих полупроводниковых микро-структур таковы (см., например, [1], [2]): а) малый размер (от десятков до сотен нанометров), б) высокая чистота (длина свободного пробега электрона может составлять несколько микрон), в) кристаллическая структура, г) волновая функция обычно обращается в нуль на границах между различными полупроводниковыми материалами. Поведение электрона описывается уравнением Шредингера. Упомянутые свойства дают возможность сделать несколько упрощающих предположений. Из “а” и “б” следует, что длина свободного пробега может быть на два или три порядка больше, чем размер структуры. Следовательно, движение электрона можно рассматривать как не возмущенное рассеянием на неоднородностях (так называемый баллистический режим). Свойство “в” позволяет предполагать, что частица (подобно частице в кристаллической решетке) движется свободно с некоторой эффективной массой m^* , которая может существенно отличаться от истинной массы электрона m_e , (например, $m^* = 0.067m_e$ для GaAs). Комбинируя эти предположения со свойством “г”, мы видим, что движение электрона в микроструктуре может моделироваться с помощью свободной (бесспиновой) частицы, находящейся в соответствующей пространственной области с условиями Дирихле на ее границах. Члены, отвечающие за взаимодействие, следует добавлять, только если вся структура находится во внешнем поле.

---

* Ленинградский институт точной механики и оптики, Санкт-Петербург, Россия.
E-mail: popov@mail.ifmo.ru

Баллистический электронный транспорт в системах волноводов и слоев изучался многими авторами (см., например, [2]–[5]). Проблема связанных состояний для соединенных волноводов недавно вызвала новую волну интереса. Система двух волноводов Ω_+ , Ω_- шириной d_+ , d_- , связанных через малое окно шириной $2a$, рассмотрена в работе [6]. Доказано, что лапласиан с условием Дирихле для этой системы имеет собственное значение λ_a , близкое к границе непрерывного спектра. Данное значение оценивается как

$$c_1 a^4 \leq \frac{\pi^2}{d_+^2} - \lambda_a \leq c_2 a^4 \quad (1)$$

для достаточно малых a (порядок величины отклонения собственного значения от границы непрерывного спектра был найден в [7] на физическом уровне строгости). Здесь c_1 , c_2 – некоторые константы, $d_+ > d_-$. Авторы [6] использовали вариационную технику и получили только оценки, а не асимптотики. Аналогичные оценки получены для собственного значения в случае n отверстий связи [8]. Асимптотика такого собственного значения была найдена в работах [9], [10]. Использовался метод согласования асимптотических по a разложений соответствующих решений. Данная схема согласования модифицировала схему, предложенную в работах [11], [12]. Можно заметить определенное соответствие полученных результатов с известными асимптотиками для слабо связанных операторов Шредингера [13]. Случай связанных искривленных волноводов изучен в [14]. Асимптотика резонанса, близкого к границе второй ветви непрерывного спектра, получена в [15].

В данной статье рассматривается система из двух слоев Ω_+ , Ω_- шириной d_+ , d_- , соответственно,

$$\Omega_{\pm} = \{(x_1, x_2, x_3) \in R^2 \times [0, \pm d_{\pm}]\},$$

связанных через малые окна. Задача в случае одного отверстия связи ω^a диаметром $2a$, $\omega^a = a\omega$, была рассмотрена в [8]. Введем обозначение, которое понадобится в дальнейшем. Пусть ω – отверстие диаметром 2, полученное из ω^a преобразованием подобия с центром в центре отверстия. Было доказано, что лапласиан Дирихле для этой системы имеет собственное значение λ_a , близкое к границе непрерывного спектра, и существуют положительные константы c_1 , c_2 такие, что

$$e^{-c_1 a^{-3}} \leq \frac{\pi^2}{d_+^2} - \lambda_a \leq e^{-c_2 a^{-3}} \quad (2)$$

для достаточно малых a , и $d_+ > d_-$. Авторы использовали вариационную технику.

Ниже рассматриваются случаи конечной и бесконечной (периодической) систем отверстий связи. Получены асимптотики основного состояния (для случая N окон) и зон (для периодических систем окон). Используется метод согласования асимптотических по a разложений соответствующих решений. Схема согласования, описанная выше, модифицируется. Ключевая идея этой модификации состоит в поиске асимптотического разложения не для рассматриваемого собственного значения, а для некоторой функции от него. Выбор этой функции связан с поведением функции Грина (как функции

спектрального параметра) около границы непрерывного спектра. Эта функция меняется при переходе к случаю периодической системы окон. Рассмотрен также случай $d_+ = d_-$. Интересно, что в этой ситуации асимптотика не является простым пределом при $d_+ \rightarrow d_-$ (появляется дополнительный множитель). Похожая ситуация возникала и в случае волноводов [14]. Результат для $N = 1$ сопоставлен с оценками из [8]. Рассмотрен случай периодической системы отверстий связи. При этом процедура согласования приобретает новые черты: необходимо рассматривать каждый слой (каждое значение квазиимпульса) отдельно и искать асимптотическое разложение для соответствующего собственного значения. Получена асимптотика границ зоны при $a \rightarrow 0$.

2. СВЯЗАННЫЕ СЛОИ. КОНЕЧНОЕ ЧИСЛО ОКОН

В статье [8] для одного окна связи доказано, что существует собственное значение, которое стремится к границе непрерывного спектра при $a \rightarrow 0$. Рассмотрим случай, когда имеется n отверстий связи ω_q^a с центрами в точках $x^q, x^q \in \{(x_1, x_2, 0), x_i \in R\}$, $q = 1, \dots, n$. Пусть ω_q – отверстие, полученное из ω_q^a преобразованием подобия с коэффициентом $1/a$ и центром в центре отверстия. Мы предполагаем, что расстояние между отверстиями имеет порядок $|\omega_q|^{1/2}$, т.е. a^0 . Пусть $d_+ > d_-$. Для n окон есть, вообще говоря, n собственных значений, о которых идет речь. Построим асимптотический ряд для основного состояния (минимального собственного значения). Будем следовать схеме, описанной выше (для связанных волноводов), с тем отличием, что выбирается иная форма асимптотического ряда. Пусть $\lambda_a = k_a^2$ – рассматриваемое собственное значение. Асимптотический ряд более удобно искать не для самого собственного значения λ_a , а для некоторой функции от него (причина этого будет ясна из дальнейшего),

$$(\ln((\pi^2 - k_a^2 d_+^2)^{1/2}))^{-1} = \sum_{j=3}^{\infty} k_j a^j. \quad (3)$$

В данной работе мы будем рассматривать только первый член ряда (этого достаточно, чтобы описать основное состояние). Для соответствующей собственной функции $\psi_a(x)$ асимптотический ряд имеет вид

$$\psi_a(x) = \pm (\ln((\pi^2 - k_a^2 d_+^2)^{1/2}))^{-1} \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{q=1}^n a^j (P_{j+1}^q(D_y) G^{\pm}(x, y, k_a)) \Big|_{y=(x_q, 0, 0)}, \quad (4)$$

$$x \in \Omega^{\pm} \setminus \bigcup_q S_{a^{1/2}}^q,$$

$$\psi_a(x) = \sum_{j=1}^{\infty} v_j^q \frac{x}{a} a^j, \quad x \in S_{2a^{1/2}}^q. \quad (5)$$

Здесь S_t^q – сфера радиуса t с центром в точке x^q ,

$$v_j^q \in W_{2, \text{loc}}^1(\Omega^+ \cup \Omega^-), \quad P_1^q(D_y) = \alpha_q \frac{\partial}{\partial n_y},$$

$P_m^q(D_y)$ — многочлен степени не выше m по производной от y

$$P_m^q(D_y) = \sum_{p=1}^{m-1} a_{pq}^{(m)} D_y^{m-p+1}, \quad m \geq 2, \quad (6)$$

$G^\pm$ — функции Грина для слоев $\Omega^\pm$. Чтобы найти главный член асимптотики собственного числа, нам нужна асимптотика производной функции Грина около точки (0) границы для значений спектрального параметра, близких к π^2/d_+^2 ,

$$\frac{\partial G^+}{\partial n_y}(x, 0, k) = \frac{1}{d_+^2} \sin \frac{\pi x_3}{d_+} \ln(\pi^2 - k_a^2 d_+^2)^{1/2} - \frac{x_3}{2\pi r^3} + g^+(x, k), \quad (7)$$

$$\frac{\partial G^-}{\partial n_y}(x, 0, k) = \frac{x_3}{2\pi r^3} + g^-(x, k), \quad r = |x|. \quad (8)$$

Функции $g^\pm(x, k)$ в (7), (8) удовлетворяют граничным условиям Дирихле и аналитичны по k в окрестности $\pi^2(d_+)^{-2}$. Первый член в правой части формулы (7) получается из хорошо известного ряда для функции Грина задачи Дирихле для слоя,

$$G^\pm(x, y, k) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{d_\pm^2} \sin \frac{\pi n x_3}{d_\pm} \sin \frac{\pi n y_3}{d_\pm} \frac{1}{2\pi} K_0((\pi^2 n^2 d_\pm^{-2} - k^2)^{1/2} \rho(x, y)),$$

$$\rho(x, y) = ((x_1 - y_1)^2 + (x_2 - y_2)^2)^{1/2},$$

K_0 — функция Макдональда.

Коэффициенты v_j^q рядов (5) есть решения краевых задач. Эти решения получают в процессе согласования в окрестности q -го окна следующим образом. Подставляем ряды (5), (3) и соответствующий ряд для k_a в уравнение Гельмгольца (при $k = k_a$) с краевыми условиями Дирихле. Затем делаем замену переменных $\xi = x/a$ (в $S_{2a^{1/2}}^q$). Коэффициенты в членах с одинаковыми степенями a должны быть равны. Таким образом, получаем следующую краевую задачу:

$$\begin{cases} \Delta_\xi v_j^q = -\sum_{p=0}^{j-2} \Lambda_p v_{j-p-2}^q, & \xi \in R^3 \setminus \gamma, \\ v_j^q = 0, & \xi \in \gamma, \end{cases} \quad (9)$$

где

$$\gamma = \{\xi : \xi_3 = 0, (\xi_1, \xi_2, 0) \in \omega_q\},$$

Λ_p — коэффициенты ряда

$$k_a^2 = \sum_p \Lambda_p a^p.$$

Введем некоторые обозначения. Пусть $\psi_a^\pm(x, k)$ — ряд (4), $P_m^{q,(N)}(D_y)$ — суммы типа (6) (для q -го окна), в которых предел суммирования $m-1$ заменен на $\min(m-1, N)$, $\Psi_{a,N}^\pm$ — ряд $\psi_a^\pm(x, k)$, в котором P_j^q заменено на $P_j^{q,(N)}$, $\hat{\psi}_a^\pm(x, k)$, $\hat{k}_N(a)$, $\hat{v}_N(\xi, a)$ —

частичные суммы соответствующих рядов. Заметим, что N -е частичные суммы рядов $\psi_a^\pm(x, k)$ и $\Psi_{a,N}^\pm(x, k)$ совпадают из-за определения сумм $P_j^{q,(N)}$. Введем оператор M_p^q для сумм $U(x, a)$ типа (4) (для $k = k_a$) следующим образом: разложим коэффициенты $U(x, a)$ в асимптотические ряды при $r \rightarrow 0$, заменим переменные $\xi = x/a$, обозначим $\rho = |\xi|$. Пусть $M_p^q(U)$ – сумма всех членов вида $a^p \phi(\xi)$. Нам понадобится только M_1^q , поскольку мы имеем дело лишь с главным членом асимптотики.

Таким образом, для выполнения согласования необходимо показать, что существуют числа k_j , полиномы P_j^q и функции v_j^q , являющиеся решениями задачи (9) такими, что асимптотики v_j^q , $\rho \rightarrow \infty$, при $\xi_3 > 0$ и $\xi_3 < 0$ совпадают с соответствующими суммами, полученными из $\psi_a^+(x, k)$ и $\psi_a^-(x, k)$. Ограничим рассмотрение лишь первым членом k_3 .

Учитывая асимптотику функции Грина (7) в окрестности p -го окна, получаем

$$\begin{aligned} \lim_{k \rightarrow \pi/d_+} (\ln(\pi^2 - k^2 d_+^2)^{1/2})^{-1} P_1^q G^+(x, x^q, k) &= \frac{\alpha_q}{d_+^2} \sin \frac{\pi x_3}{d_+}, \\ \lim_{k \rightarrow \pi/d_+} (\ln(\pi^2 - k^2 d_+^2)^{1/2})^{-1} P_1^q G^-(x, x^q, k) &= 0. \end{aligned}$$

Принимая во внимание (3), имеем (обозначим $M_1 = M_1^p$)

$$\begin{aligned} a^{-1} M_1 \left((\ln(\pi^2 - k_a^2 d_+^2)^{1/2})^{-1} \sum_{q=1}^n P_1^q G^+(x, x^q, k_a) \right) &= \\ = -\frac{1}{2\pi} \alpha_p k_3 \xi_3 \rho_p^{-3} + \sum_{q=1}^n \frac{\pi}{d_+^3} \alpha_q \xi_3, \end{aligned} \quad (10)$$

$$a^{-1} M_1 \left((\ln(\pi^2 - k_a^2 d_+^2)^{1/2})^{-1} \sum_{q=1}^n P_1^q G^-(x, x^q, k_a) \right) = \frac{1}{2\pi} \alpha_p k_3 \xi_3 \rho_p^{-3}, \quad (11)$$

где ρ_p – расстояние от центра p -го окна.

Краевые задачи для v_1^p , v_2^p однородны. Для согласования растущих членов в (10) необходимо выбрать в качестве v_1^p гармоническую функцию с соответствующими асимптотиками. Известно [16]–[18], что существует гармоническая функция $Y_1^p(\xi)$, удовлетворяющая граничным условиям и имеющая следующую асимптотику при $\rho_p \rightarrow \infty$:

$$Y_1^p(\xi) = \begin{cases} \xi_3 + \frac{3}{2} b_{\omega_p} \xi_3 \rho_p^{-3}, & \xi_3 > 0, \\ -\frac{3}{2} b_{\omega_p} \xi_3 \rho_p^{-3}, & \xi_3 < 0. \end{cases} \quad (12)$$

Здесь b_{ω_p} – средняя виртуальная масса ω_p . Выбираем v_1^p в виде

$$v_1^p(\xi) = \frac{\pi}{d_+^3} \sum_{q=1}^n \alpha_q Y_1^p(\xi).$$

Согласуя члены порядка $\rho_p^{-3}\xi_3$ в окрестности каждого отверстия, получим следующую систему уравнений для определения α_q :

$$\frac{3\pi}{2d_+^3} \sum_{q=1}^n \alpha_q b_{\omega_p} = -\frac{k_3}{2\pi} \alpha_p, \quad p = 1, 2, \dots, n. \quad (13)$$

Условие нетривиальной разрешимости (13) имеет вид

$$\det \begin{pmatrix} b_{\omega_1} + \beta & b_{\omega_1} & \dots & b_{\omega_1} \\ b_{\omega_2} & b_{\omega_2} + \beta & \dots & b_{\omega_2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ b_{\omega_n} & b_{\omega_n} & \dots & b_{\omega_n} + \beta \end{pmatrix} = 0, \quad (14)$$

где

$$\beta = \frac{d_+^3}{3\pi^2} k_3.$$

Просуммировав все строки в (14), вынеся общий множитель и вычитая последовательно столбцы, получаем значение определителя в (14)

$$(-\beta)^{n-1} \left(\sum_{i=1}^n b_{\omega_i} + \beta \right).$$

Таким образом, уравнение (14) дает

$$-\sum_{i=1}^n b_{\omega_i} = \frac{d_+^3}{3\pi^2} k_3,$$

откуда получаем

$$k_3 = -\frac{3\pi^2}{d_+^3} \sum_{i=1}^n b_{\omega_i}. \quad (15)$$

Другие $n - 1$ корней ($\beta = 0$) уравнения (14) приводят к решению $k_3 = 0$. Это означает, что данные значения не дают членов рассматриваемого порядка в асимптотическом ряду. Ясно, что если одно окно связи дает одно собственное значение, то n окон дают, вообще говоря, n связанных состояний. Полученное значение есть главный член асимптотики по a основного состояния. В работе [6] показано, что в случае связанных волноводов при достаточно малом a есть только одно связанное состояние.

В случае двух одинаковых слоев ($d_+ = d_- = d$) надо внести некоторые изменения в найденные решения. Асимптотика (8) для G^- теперь подобна асимптотике для G^+ (7). В результате вместо формул (10), (11) получаем

$$a^{-1} M_1^p \left((\ln(\pi^2 - k_a^2 d_+^2))^{-1} \sum_{q=1}^n P_1^q G^\pm(x, x^q, k_a) \right) = \mp \frac{1}{2\pi} \alpha_p k_3 \xi_3 \rho_p^{-3} \pm \sum_{q=1}^n \frac{\pi}{d_+^3} \alpha_q \xi_3. \quad (16)$$

Отсюда следует, что нам необходимо построить гармоническую функцию $\tilde{Y}_1^p(\xi)$ с другой асимптотикой по ρ_p , $\rho_p \rightarrow \infty$, чем у функции $Y_1^p(\xi)$, а именно

$$\tilde{Y}_1^p(\xi) = \begin{cases} \xi_3 + 3b_\omega \xi_3 \rho_p^{-3}, & \xi_3 > 0, \\ -\xi_3 - 3b_\omega \xi_3 \rho_p^{-3}, & \xi_3 < 0. \end{cases} \quad (17)$$

Такая функция существует. Она связана с функцией Y_1^p простым соотношением (в терминах комплексной переменной)

$$\tilde{Y}_1^p(z) = Y_1^p(z) + Y_1^p(-z).$$

Проводя согласование, как и ранее, получаем

$$k_3 = -\frac{6\pi^2}{d^3} \sum_{i=1}^n b_{\omega_i}. \quad (18)$$

ЗАМЕЧАНИЕ. Результат (18) не является формальным пределом выражения для двух различных слоев (как и в случае волноводов [14]). С физической точки зрения это связано с тем, что в случае различных слоев при энергии, слегка превышающей границу непрерывного спектра, есть только один путь ухода на бесконечность. Для одинаковых же слоев появляется сразу два пути.

Окончательно, объединяя (15) и (18), получаем следующий результат.

ТЕОРЕМА 1. *Главный член асимптотики минимального собственного значения λ_a , которое стремится к нижней границе непрерывного спектра, в случае n окон связи имеет вид*

$$\lambda_a = \begin{cases} \frac{\pi^2}{d_+^2} - \frac{1}{d_+^2} \exp\left[-\frac{2d_+^3}{3\pi^2} \left(\sum_{i=1}^n b_{\omega_i}\right)^{-1} a^{-3} (1 + o(1))\right], & d_+ > d_-, \\ \frac{\pi^2}{d^2} - \frac{1}{d^2} \exp\left[-\frac{d^3}{3\pi^2} \left(\sum_{i=1}^n b_{\omega_i}\right)^{-1} a^{-3} (1 + o(1))\right], & d_+ = d_- = d. \end{cases} \quad (19)$$

Для случая круглого отверстия ω радиуса a значение средней виртуальной массы дается выражением [19]

$$b_\omega = \frac{4}{9\pi} a^3.$$

СЛЕДСТВИЕ 1. *Главный член асимптотики минимального собственного значения λ_a , которое стремится к нижней границе непрерывного спектра, в случае n круглых отверстий связи имеет вид*

$$\lambda_a = \begin{cases} \frac{\pi^2}{d_+^2} - \frac{1}{d_+^2} \exp\left[-\frac{3d_+^3}{2\pi^2} \left(\sum_{i=1}^n a_i^3\right)^{-1} (1 + o(1))\right], & d_+ > d_-, \\ \frac{\pi^2}{d^2} - \frac{1}{d^2} \exp\left[-\frac{3d^3}{4\pi^2} \left(\sum_{i=1}^n a_i^3\right)^{-1} (1 + o(1))\right], & d_+ = d_- = d, \end{cases}$$

где a_i – радиус круга ω_i^a .

СЛЕДСТВИЕ 2. *Главный член асимптотики собственного значения λ_a , которое стремится к нижней границе непрерывного спектра, в случае одного отверстия связи имеет вид*

$$\lambda_a = \begin{cases} \frac{\pi^2}{d_+^2} - \frac{1}{d_+^2} \exp\left[-\frac{2d_+^3}{3\pi^2} a^{-3} b_\omega^{-1} (1 + o(1))\right], & d_+ > d_-, \\ \frac{\pi^2}{d^2} - \frac{1}{d^2} \exp\left[-\frac{d^3}{3\pi^2} a^{-3} b_\omega^{-1} (1 + o(1))\right], & d_+ = d_- = d. \end{cases} \quad (20)$$

ЗАМЕЧАНИЕ. Можно сравнить (20) с оценкой (2) в работе [8].

3. СЛОИ, СВЯЗАННЫЕ ЧЕРЕЗ ПЕРИОДИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ ОТВЕРСТИЙ

3.1. Однократно периодическая система отверстий. Рассмотрим случай, когда имеются одинаковые окна с центрами в точках решетки Λ_1 , $\Lambda_1 = \{x, x = (qL, 0, 0), q \in Z\}$. Здесь мы имеем зону вместо собственного значения для одного окна. Из-за периодичности соответствующее решение ψ_a удовлетворяет условию Блоха

$$\psi_a(x + L) = e^{i\theta L} \psi_a(x),$$

где θ — квазиимпульс, $-\pi L^{-1} \leq \theta \leq \pi L^{-1}$. Для фиксированного значения квазиимпульса имеем собственное значение соответствующего оператора в слое. Будем строить асимптотическое разложение собственного значения λ_a^θ в каждом слое отдельно, а затем, меняя θ , получим параметры зоны. Будем искать асимптотическое разложение для следующей функции f_{Λ_1} от $\lambda_a^\theta = k_{a,\theta}^2$:

$$f_{\Lambda_1}(k_{a,\theta}) = L \sqrt{\pi^2 - k_{a,\theta}^2 d_+^2 + \theta^2 d_+^2} = k_3^\theta a^3 + o(a^3). \quad (21)$$

Асимптотическое разложение соответствующей собственной функции имеет вид

$$\begin{aligned} \psi_a(x) &= \pm f_{\Lambda_1}(k_{a,\theta}) \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{q=-\infty}^{\infty} a^j (P_{j+1}^q(D_y) G^\pm(x, y, k_{a,\theta})) \Big|_{y=(Lq, 0, 0)}, \\ &\quad x \in \Omega^\pm \setminus \bigcup_q S_{a^{1/2}}^q, \end{aligned} \quad (22)$$

$$\psi_a(x) = \sum_{j=1}^{\infty} v_j^q \frac{x}{a} a^j, \quad x \in S_{2a^{1/2}}^q, \quad (23)$$

где $P_1^q(D_y) = \alpha_q \frac{\partial}{\partial n_y}$ (условие Блоха приводит к соотношению $\alpha_q = e^{i\theta L q} \alpha_0$). Следуя описанной выше процедуре согласования (см. предыдущий раздел), получаем для окна $\omega_0(\rho = \rho_0)$

$$a^{-1} M_1 \left(f_{\Lambda_1}(k_{a,\theta}) \sum_{q=-\infty}^{\infty} a^j (P_1^q(D_y) G^-(x, y, k_{a,\theta})) \Big|_{y=(Lq, 0, 0)} \right) = \frac{1}{2\pi} \alpha_0 k_3^\theta \xi_3 \rho^{-3}, \quad (24)$$

$$\begin{aligned} &a^{-1} M_1 \left(f_{\Lambda_1}(k_{a,\theta}) \sum_{q=-\infty}^{\infty} a^j (P_1^q(D_y) G^+(x, y, k_{a,\theta})) \Big|_{y=(Lq, 0, 0)} \right) = \\ &= -\frac{1}{2\pi} \alpha_0 k_3^\theta \xi_3 \rho^{-3} + \frac{2\pi^2}{d_+^3} \alpha_0 a^{-1} M_1 \left[f_{\Lambda_1}(k_{a,\theta}) \left(-\frac{1}{2\pi} \ln \sqrt{\frac{\pi^2}{d_+^2} - k_{a,\theta}^2} + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \sum_{q=1}^{\infty} \cos(q\theta L) \frac{i}{4} H_0^{(1)} \left(iqL \sqrt{\frac{\pi^2}{d_+^2} - k_{a,\theta}^2} \right) \right) \right]. \end{aligned} \quad (25)$$

Используя формулу [20]

$$\begin{aligned} \sum_{q=1}^{\infty} \cos(nb) K_0(nx) &= \frac{\pi}{2\sqrt{x^2+b^2}} + \frac{1}{2} \left(C + \ln \frac{x}{4\pi} \right) + \\ &+ \frac{\pi}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{\sqrt{(2n\pi-b)^2+x^2}} - \frac{1}{2n\pi} \right) + \frac{\pi}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{\sqrt{(2n\pi+b)^2+x^2}} - \frac{1}{2n\pi} \right), \\ K_0(z) &= \frac{\pi i}{2} H_0^{(1)}(iz), \quad x > 0, \quad \text{Im } b = 0, \end{aligned}$$

преобразуем (25) к виду

$$\begin{aligned} a^{-1} M_1 \left(f_{\Lambda_1}(k_{a,\theta}) \sum_{q=-\infty}^{\infty} a^j (P_1^q(D_y) G^+(x, y, k_{a,\theta})) \Big|_{y=(Lq,0,0)} \right) = \\ = -\frac{1}{2\pi} \alpha_0 k_3^\theta \xi_3 \rho^{-3} + \frac{\pi^2}{d_+^2} \alpha_0 \xi_3. \end{aligned} \quad (26)$$

Для согласования растущих членов в выражениях (24), (26) выбираем

$$v_1^0(\xi) = \frac{\pi^2}{d_+^2} \alpha_0 Y_1(\xi). \quad (27)$$

Согласуя члены порядка $\xi_3 \rho^{-3}$, получаем

$$\frac{k_3^\theta}{2\pi} \alpha_0 = \frac{\pi^2}{d_+^2} \alpha_0 b_\omega.$$

Следовательно,

$$k_3^\theta = \frac{2\pi^3}{d_+^2} b_\omega.$$

Для собственного значения в слое имеем дисперсионное соотношение

$$\lambda_a^\theta = k_{a,\theta}^2 = \frac{\pi^2}{d_+^2} + \theta^2 - \frac{4b_\omega^2 \pi^6}{d_+^6 L^2} a^6 + o(a^6). \quad (28)$$

Чтобы получить параметры зоны, надо менять θ от $-\pi/L$ до π/L . Из-за малости a приходим к выводу об отсутствии лакуны ($16b_\omega^2 \pi^4 d_+^{-6} a^6 < 1$), но окно вызывает сдвиг нижней границы непрерывного спектра,

$$\lambda_{\min,a} = \frac{\pi^2}{d_+^2} - \frac{4b_\omega^2 \pi^6}{d_+^6 L^2} a^6 + o(a^6). \quad (29)$$

Для случая двух одинаковых слоев ($d_- = d_+ = d$) необходимо изменить схему тем же образом, что и для случая n окон связи (см. выше). Формально это означает, что в формуле (27) функцию Y_1 следует заменить на $\widetilde{Y}_1$, а в формулах (28), (29) — b_ω на $2b_\omega$. Таким образом, можно сформулировать следующую теорему.

ТЕОРЕМА 2. *Нижняя граница непрерывного спектра оператора Лапласа с условием Дирихле для слоев, связанных через однократно периодическую систему окон, дается выражением*

$$\lambda_{\min, a} = \begin{cases} \frac{\pi^2}{d_+^2} - \frac{4b_+^2 \pi^6}{d_+^6 L^2} a^6 + o(a^6), & d_+ > d_-, \\ \frac{\pi^2}{d^2} - \frac{16b_+^2 \pi^6}{d^6 L^2} a^6 + o(a^6), & d_+ = d_- = d. \end{cases}$$

СЛЕДСТВИЕ 3. *Нижняя граница непрерывного спектра оператора Лапласа с условием Дирихле для слоев, связанных через однократно периодическую систему круглых окон, имеет вид*

$$\lambda_{\min, a} = \begin{cases} \frac{\pi^2}{d_+^2} - \frac{64\pi^4}{81d_+^6 L^2} a^6 + o(a^6), & d_+ > d_-, \\ \frac{\pi^2}{d^2} - \frac{256\pi^4}{81d^6 L^2} a^6 + o(a^6), & d_+ = d_- = d. \end{cases}$$

3.2. Дважды периодическая система окон. Рассмотрим случай дважды периодической системы окон. Будем считать, что центры окон образуют двумерную решетку Λ_2 . Схема построения основного члена асимптотики собственного значения в фиксированном слое (для фиксированного значения квазиимпульса) та же, что и в случае однократно периодической решетки Λ_1 . Поэтому мы не будем описывать детально всю процедуру, а подчеркнем только различия.

Прежде всего, надо изменить функцию $f_{\Lambda_1}(k_{a,\theta})$, для которой ищется асимптотическое разложение (21). Вид этой функции связан с поведением суммы в правой части (25) для значений $k_{a,\theta}$, близких к нижней границе непрерывного спектра оператора в слое $(\pi^2/d_+^2 + \theta^2)$. В случае решетки Λ_1 эта сумма равна

$$\frac{d_+}{2L\sqrt{\pi^2 - k_{a,\theta}^2 d_+^2 + \theta^2 d_+^2}}.$$

Вот почему мы выбрали $f_{\Lambda_1}(k_{a,\theta})$ в виде (21). Для двумерной решетки мы имеем двойной ряд по Λ_2 в правой части (25). Сумма такого типа встречается в теории двумерных кристаллов. Ее можно преобразовать [21] к виду

$$\sum_{\gamma \in \Gamma_2} \frac{|\hat{\Lambda}_2|}{4\pi^2(|\gamma + \theta|^2 + \pi^2 d_+^{-2} - k_{a,\theta}^2)},$$

где $|\hat{\Lambda}_2|$ — площадь зоны Бриллюэна $\hat{\Lambda}_2$ для решетки Λ_2 , $\theta \in \hat{\Lambda}_2$, Γ_2 — обратная решетка. Следовательно, функцию $f_{\Lambda_2}(k_{a,\theta})$ надо взять в виде

$$\begin{aligned} f_{\Lambda_2}(k_{a,\theta}) &= |\hat{\Lambda}_2|^{-1} 4\pi^2 (|\gamma_\theta + \theta|^2 + \pi^2 d_+^{-2} - k_{a,\theta}^2), \\ |\gamma_\theta + \theta|^2 &= \min_{\gamma \in \Gamma_2} |\gamma + \theta|^2. \end{aligned} \tag{30}$$

Асимптотическое разложение для $f_{\Lambda_2}(k_{a,\theta})$ ищем в виде

$$f_{\Lambda_2}(k_{a,\theta}) = k_{3,\theta}^{\Lambda_2} a^3 + o(a^3). \quad (31)$$

После этого в формуле (22) функция $f_{\Lambda_1}(k_{a,\theta})$ заменяется на $f_{\Lambda_2}(k_{a,\theta})$. Затем, следуя той же процедуре, что и для однократно периодической решетки, приходим к выражению

$$k_{3,\theta}^{\Lambda_2} = \frac{4\pi^3}{d_+^3} b_\omega.$$

Следовательно, в соответствии с (30), (31) получаем

$$k_{a,\theta}^2 = |\gamma_\theta + \theta|^2 + \pi^2 d_+^{-2} - |\hat{\Lambda}_2| \frac{\pi b_\omega}{d_+^3} a^3 + o(a^3). \quad (32)$$

Изменяя квазиимпульс θ , $\theta \in \hat{\Lambda}_2$, получаем всю зону. Можно видеть, что из-за малости параметра a лакуны не возникает. Таким образом, приходим к следующей теореме (результат для двух одинаковых слоев получается тем же путем, что и ранее).

ТЕОРЕМА 3. *Нижняя граница непрерывного спектра оператора Лапласа с условием Дирихле для слоев, связанных через дважды периодическую систему окон, имеет вид*

$$\lambda_{\min,a} = \begin{cases} \frac{\pi^2}{d_+^2} - |\hat{\Lambda}_2| \frac{\pi b_\omega}{d_+^3} a^3 + o(a^3), & d_+ > d_-, \\ \frac{\pi^2}{d^2} - |\hat{\Lambda}_2| \frac{2\pi b_\omega}{d^3} a^3 + o(a^3), & d_+ = d_- = d. \end{cases}$$

СЛЕДСТВИЕ 4. *Нижняя граница непрерывного спектра оператора Лапласа с условием Дирихле для слоев, связанных через дважды периодическую систему круглых окон, имеет вид*

$$\lambda_{\min,a} = \begin{cases} \frac{\pi^2}{d_+^2} - |\hat{\Lambda}_2| \frac{4}{9d_+^3} a^3 + o(a^3), & d_+ > d_-, \\ \frac{\pi^2}{d^2} - |\hat{\Lambda}_2| \frac{8}{9d^3} a^3 + o(a^3), & d_+ = d_- = d. \end{cases}$$

Благодарности. Автор благодарит Центр теоретической физики (Марсель) и университет Тулона, где работа была начата, и выражает особую признательность проф. П. Дюкло. Автор благодарен Институту ядерной физики в Ржеже (Чехия) за гостеприимство, проф. П. Экснеру и проф. Я. Диттриху за обсуждения. Работа была частично поддержана Министерством образования Чехии (грант № ME 170), РФФИ (грант № 01-01-00253), Министерством образования России и Международным научным фондом.

Список литературы

- [1] *C. W. J. Beenakker, H. van Houten.* Quantum transport in semiconductor nanostructures. In: Solid State Physics. Advances in Research and Applications. V. 44. Eds. H. Ehrenreich, D. Turnbull. New York: Academic Press, 1991. P. 1–228.
- [2] *P. Duclos, P. Exner.* Rev. Math. Phys. 1995. V. 7. P. 73–102.
- [3] *W. Bulla, F. Gesztesy, W. Renger, B. Simon.* Proc. Am. Math. Soc. 1997. V. 125. P. 1487–1495.
- [4] *Y. Takagaki, K. Ploog.* Phys. Rev. B. 1994. V. 49. № 3. P. 1782–1788.
- [5] *I. Yu. Popov, S. L. Popova.* Europhys. Lett. 1993. V. 24. № 5. P. 373–377.
- [6] *P. Exner, S. Vugalter.* Ann. Inst. Henri Poincaré. 1996. V. 65. № 1. P. 109–123.
- [7] *Ch. Kunze.* Phys. Rev. B. 1993. V. 48. P. 14338–14346.
- [8] *P. Exner, S. Vugalter.* J. Phys. A: Math. Gen. 1997. V. 30. P. 7863–7878.
- [9] *И. Ю. Попов.* Письма в ЖТФ. 1999. Т. 25. Вып. 3. С. 57–59.
- [10] *I. Yu. Popov.* Rep. Math. Phys. 1999. V. 43. № 3. P. 427–437.
- [11] *А. М. Ильин.* Согласование асимптотических разложений решений краевых задач. М.: Наука, 1989.
- [12] *Р. Р. Гадильшин.* Алгебра и анализ. 1992. Т. 4. № 2. С. 88–115.
- [13] *B. Simon.* Ann. Phys. 1976. V. 97. P. 279–288.
- [14] *I. Yu. Popov.* Phys. Lett. A. 2000. V. 269. № 2–3. P. 148–153.
- [15] *S. V. Frolov, I. Yu. Popov.* J. Math. Phys. 2000. V. 41. № 7. P. 4391–4405.
- [16] *N. S. Landkof.* Foundation of Modern Potential Theory. Berlin: Springer-Verlag, 1972.
- [17] *G. Polya, G. Szego.* Isoperimetric Inequalities in Mathematical Physics. Princeton: Princeton University Press, 1951.
- [18] *Г. И. Эскин.* Краевые задачи для эллиптических псевдодифференциальных уравнений. М.: Наука, 1973.
- [19] *M. Schiffer, G. Szego.* Trans. Amer. Math. Soc. 1949. V. 67. № 1. P. 130–205.
- [20] *А. П. Прудников, Ю. А. Брычков, О. М. Маричев.* Интегралы и ряды. Специальные функции. М.: Наука, 1983.
- [21] *С. Альбеверио, Ф. Гестези, Р. Хеэг-Крон, Х. Хольден.* Решаемые модели в квантовой механике. М.: Мир, 1991.

Поступила в редакцию 30.III.2000 г.,
после доработки 19.XII.2001 г.