Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Ю. П. Чубурин, О попадании собственного значения (резонанса) оператора Шредингера на границу зоны, *ТМФ*, 2001, том 126, номер 2, 196–205

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf424>

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: 18.234.197.8

26 апреля 2023 г., 07:10:55

© 2001 г.

Ю. П. Чубурин*

О ПОПАДАНИИ СОБСТВЕННОГО ЗНАЧЕНИЯ (РЕЗОНАНСА) ОПЕРАТОРА ШРЕДИНГЕРА НА ГРАНИЦУ ЗОНЫ

Для оператора Шредингера с периодическим потенциалом, возмущенным функцией, периодической по двум переменным и стремящейся к нулю по третьей, получены условия попадания уровня (собственного значения или резонанса) на границу зоны. Обсуждается переход уровня через эту границу при изменении величины возмущения.

1. ВВЕДЕНИЕ

Пусть $V(x)$, где $x = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$, — вещественная функция из $L^\infty(\mathbb{R}^3)$, периодическая по всем переменным с периодом единица; $W(x) \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$ — вещественная функция, периодическая по переменным x_1, x_2 с периодом единица и удовлетворяющая неравенству $|W(x)| \leq C \exp(-a|x_3|)$, где $a > 0$, $x \in \mathbb{R}^3$. Самосопряженные операторы Шредингера $H_0 = -\Delta + V(x)$ и $H = H_0 + W(x)$, действующие в $L^2(\mathbb{R}^3)$, будучи разложены в прямом интеграле пространств $L^2(\Omega)$, где $\Omega = [0, 1]^2 \times \mathbb{R}$ (см. [1], [2]), порождают семейства операторов $H_0(k_\parallel) = -\Delta + V(x)$ и $H(k_\parallel) = H_0(k_\parallel) + W(x)$, действующих в $L^2(\Omega)$ и определенных на (достаточно гладких) блоховских по переменным x_1, x_2 функциях. Вектор $k_\parallel = (k_1, k_2) \in \Omega^* = (-\pi, \pi]^2$ называется квазиимпульсом и определяется условием блоховости. Под блоховскими по переменным x_1, x_2 функциями $\phi(x)$, $x \in \mathbb{R}^3$, понимаются функции, удовлетворяющие условию

$$\phi(x + (n_\parallel, 0)) = e^{i(k_\parallel, n_\parallel)} \phi(x), \quad n_\parallel = (n_1, n_2) \in \mathbb{Z}^2,$$

а также сужения таких функций на Ω . Заметим, что оператор $H(k_\parallel)$ является оператором энергии электрона в ситуациях: 1) плоской кристаллической пленки (в случае, если $V = 0$); 2) слоистой структуры; 3) поверхности кристалла (в случае, когда функция $V(x) + W(x)$ близка к нулю для $|x_3| \leq d$, где d достаточно велико; поверхность при этом “удвоенная”).

* Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, Россия

Обозначим через $H_0(k) = -\Delta + V(x)$ оператор, определенный на блоховских по всем переменным функциях из $L^2(\Omega_0)$, где $\Omega_0 = [0, 1]^3$; здесь квазиимпульс трехмерен: $k = (k_{\parallel}, k_3) \in \Omega_0^* = (-\pi, \pi]^3$. Спектр оператора $H_0(k)$ дискретен (см. [1], разд. XIII.16). Обозначим через $E_n(k)$ его собственные значения, занумерованные в порядке неубывания с учетом кратности, а через $\psi_n(x, k)$ – соответствующие собственные функции ($n = 1, 2, \dots$). Существенный спектр оператора $H(k_{\parallel})$ равен (см. [3], предложение 1)

$$\sigma_{\text{ess}}(H(k_{\parallel})) = \sigma(H_0(k_{\parallel})) = \bigcup_{k_3 \in (-\pi, \pi], n=1,2,\dots} \{E_n(k)\},$$

где $\sigma(H_0(k_{\parallel}))$ – спектр оператора $H_0(k_{\parallel})$, и имеет зонную структуру (состоит из промежутков).

Пусть собственное значение $E_{n_0}(k_0) = E_0$, где $k_0 = (k_{\parallel}, k_3^{(0)}) \in \Omega_0^*$, невырожденное и находится на границе множества $\sigma(H_0(k_{\parallel}))$ (на границе зоны). Согласно теории возмущений (см. [4], добавление 1) $E_{n_0}(k)$ аналитически зависит от k_3 в окрестности $k_3^{(0)}$; очевидно, что

$$\frac{\partial E_{n_0}(k_0)}{\partial k_3} = 0. \quad (1)$$

Здесь и далее $\partial^m E_{n_0}(k_0)/\partial k^m$ означает $\partial^m E_{n_0}/\partial k^m$ в точке k_0 . Будем предполагать выполнение условия

$$\frac{\partial^2 E_{n_0}(k_0)}{\partial k_3^2} \neq 0; \quad (2)$$

кроме того, предполагаем, что $E_n(k_0) \neq E_0$ для $n \neq n_0$, т.е. граница зоны описывается только функцией $E_{n_0}(k)$. Равенство (1) определяет в силу (2) в (комплексной) окрестности точки k_0 комплексно-аналитическое многообразие $\mathcal{V}_0$, описываемое некоторой аналитической функцией $k_3 = k_3^{(0)}(\tilde{k}_{\parallel})$, заданной в (комплексной) окрестности точки $k_{\parallel}$.

Уравнение $E_{n_0}(k) = E$ имеет относительно k_3 для E , близких к E_0 , ровно два корня (сливающихся при $E = E_0$), через $k_3^{(1)}$ обозначим тот из них, для которого (при вещественных значениях $k_3^{(1)}$, $E_{n_0}(k_{\parallel}, k_3^{(1)})$)

$$\frac{\partial E_{n_0}(k_{\parallel}, k_3^{(1)})}{\partial k_3} > 0, \quad k_3^{(1)} \neq k_3^{(0)}.$$

В дальнейшем вместо величины E будем часто использовать $k_3^{(1)} = k_3$.

Положим $R_0(k_{\parallel}, E) = (H_0(k_{\parallel}) - E)^{-1}$, $R(k_{\parallel}, E) = (H(k_{\parallel}) - E)^{-1}$. Согласно [3] функция Грина оператора $H_0(k)$ (т.е. ядро резольвенты оператора, возможно, продолженное аналитически по параметру k_3 (или по E на второй лист)) имеет вид

$$\Gamma(x, y, k) = -\frac{\psi_{n_0}(x, k_0) \overline{\psi_{n_0}(y, k_0)}}{i(k_3 - k_3^{(0)}) \partial^2 E_{n_0}(k_0) / \partial k_3^2} + \Gamma'(x, y, k), \quad (3)$$

где функция Γ' такова, что выражение

$$\sqrt{W(x)} \Gamma'(x, y, k) \sqrt{W(y)} \quad (4)$$

является аналитической $L^2(\Omega \times \Omega)$ -значной функцией аргумента $k_3 = k_3^{(1)}$ (здесь и далее $\sqrt{z} = \sqrt{\rho e^{i\phi}} = \sqrt{\rho} e^{i\phi/2}$, $\phi \in (-\pi, \pi]$). По переменной E (вместо k_3) функция Γ имеет в точке E_0 ветвление порядка 2, что обеспечивает возможность появления вблизи E_0 резонансов. Уравнение, описывающее как собственные значения (для $E \in \mathbb{R}$), так и резонансные уровни (или резонансы, см. ниже), имеет вид [3]

$$\psi(x) = - \int_{\Omega} \Gamma(x, y, k_{\parallel}, E) W(y) \psi(y) dy. \quad (5)$$

С помощью замены $\phi = \sqrt{W} \psi$ перейдем к эквивалентному (предполагаем, что $W \neq 0$) “модифицированному” [1] уравнению, заменяя также E на k_3 :

$$\phi(x) = - \int_{\Omega} \sqrt{W(x)} \Gamma(x, y, k) \sqrt{W(y)} \phi(y) dy, \quad (6)$$

которое будет рассматриваться в классе $L^2(\Omega)$. Под резонансами будем понимать значения E , отвечающие величинам k_3 с $\text{Im } k_3 < 0$, для которых существует ненулевое решение уравнения (6) (ср. [3], [5]; заметим, что употребление здесь термина “резонанс” несколько условно, см., например, [6]). Условие на мнимую часть k_3 означает экспоненциальное возрастание функции Γ и, следовательно, функции ψ из уравнения (5); при этом E находится на втором листе (см. [3]). Наоборот, неравенство $\text{Im } k_3 > 0$ означает, что ψ экспоненциально убывает и, следовательно, соответствующее E является собственным значением.

Множество точек $\tilde{k} = (\tilde{k}_{\parallel}, k_3) \in \mathbb{C}^3$ из окрестности k_0 , а также отвечающее им множество точек $(\tilde{k}_{\parallel}, E)$, для которых существует ненулевое решение уравнения (6), будем называть поверхностью уровней и обозначать через $\mathcal{V}$; при этом E (уровни) могут быть как собственными значениями, так и резонансами. Множество $\mathcal{V}$ является аналитическим множеством в $U \setminus \mathcal{V}_0$, где U – некоторая комплексная окрестность точки k_0 , описываемым уравнением вида $\Delta(k) = 0$, где $\Delta(k)$ – аналитическая функция в $U \setminus \mathcal{V}_0$ (и мероморфная в U), не равная нулю тождественно (последнее справедливо, так как в противном случае E_0 не было бы границей зоны). Это следует из доказательства мероморфной теоремы Фредгольма [1] (интегральный оператор в правой части (6) в силу (3) и сказанного выше удовлетворяет условиям этой теоремы); см. также ниже доказательство теоремы 1. Будем говорить, что $\mathcal{V}$ проходит через точку k_0 (границу зоны), если k_0 – предельная точка множества $\mathcal{V}$.

В настоящей работе определено условие прохождения поверхности уровней $\mathcal{V}$ через k_0 . Это представляется важным по той причине, что наличие уровня вблизи нулевой энергии вызывает, вообще говоря, особенности в рассеянии, причем здесь существенную роль играет также характер зависимости уровня от квазимпульса $k_{\parallel}$ (см. [7]). Поведение же уровня в случае, если $\mathcal{V}$ проходит через точку k_0 , весьма специфично (см. ниже теорему 3 и замечание 1 к ней). При введении “параметра связи” μ в потенциал заменой W на μW оказывается, что попадание уровня на границу зоны происходит “достаточно часто”. Заметим, что это подтверждается также вычислениями, проведенными в работе [7]. Наконец, показывается, что в случае аналитической зависимости уровня от

μ собственное значение при касании границы зоны отражается от нее и превращается в резонанс. Заметим, что в рассматриваемом случае функция Грина оператора $H_0(k_{\parallel})$ имеет полюс на границе зоны, чего нет в случае возмущающего потенциала, убывающего по всем переменным [8], и потому в полученных результатах вместо не существующей в точке k_0 функции Грина фигурируют ее регулярная часть и вычет.

2. ПРОХОЖДЕНИЕ ПОВЕРХНОСТИ УРОВНЕЙ ЧЕРЕЗ ГРАНИЦУ ЗОНЫ

ЛЕММА 1. Пусть резольвента $R_0(k) = R_0(k_{\parallel}, E)$ существует. Тогда существование оператора $\sqrt{W}R(k)\sqrt{W}$ эквивалентно существованию оператора $(1 + \sqrt{W}R_0(k)\sqrt{W})^{-1}$, причем имеет место равенство

$$(1 + \sqrt{W}R_0(k)\sqrt{W})^{-1} = 1 - \sqrt{W}R(k)\sqrt{W}. \quad (7)$$

Доказательство леммы стандартно.

Вследствие (3) и мероморфной теоремы Фредгольма [1] $(1 + \sqrt{W}R_0(k)\sqrt{W})^{-1}$ представляет собой мероморфную операторнозначную функцию переменной k_3 с полюсами в резонансах. Лемма 1 позволяет определить резонансы как полюсы мероморфной функции $R(k)$, продолженной равенством (7) по переменной k_3 .

Обозначим через $A(k)$ оператор с ядром (4). Всюду в дальнейшем предполагаем, что либо $W(x) \geq 0$, либо $W(x) \leq 0$ для всех x . Далее, будем предполагать, что вблизи точки $k_3^{(0)}$ функция $E_{n_0} = E_{n_0}(k_0 + (0, 0, k_3 - k_3^{(0)}))$ является четной относительно переменной $k_3 - k_3^{(0)}$. Так будет, например, в случае, если $k_3^{(0)} = 0$, а $V(x)$ — четная по x_3 функция.

Под лакуной, как обычно, понимаем открытый промежуток между зонами (для крайней зоны — полубесконечный интервал).

ЛЕММА 2. Число $E = E_{n_0}(k)$ из малой окрестности точки E_0 принадлежит лакуне, примыкающей к точке E_0 , в том и только в том случае, если $k_3 - k_3^{(0)} \in i\mathbb{R}$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Пусть для определенности E_0 — точка минимума, $k_3 = k_3^{(0)} + i\epsilon$, где $\epsilon \in \mathbb{R}$ достаточно мало. Функция $E_{n_0}(k)$ разлагается в ряд Тейлора по четным степеням $k_3 - k_3^{(0)}$, следовательно,

$$E = E_{n_0}(k) = E_0 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E_{n_0}(k_0)}{\partial k_3^2} (i\epsilon)^2 + \dots < E_0,$$

если $\epsilon \neq 0$. Наоборот, пусть $E_{n_0}(k) < E_0$ для малых $k_3 - k_3^{(0)}$. Уравнение $E_{n_0}(k) = E < E_0$, где E близко к E_0 , в силу подготовительной теоремы Вейерштрасса [9] имеет ровно два корня $k_3^{(1)}, k_3^{(2)}$. С другой стороны, функция $E_{n_0} = E_{n_0}(k_0 + (0, 0, i\epsilon))$ имеет по ϵ максимум в точке $\epsilon = 0$, и, таким образом, уравнение $E_{n_0}(k_0 + (0, 0, i\epsilon)) = E < E_0$, $\epsilon \neq 0$, имеет два вещественных корня $\epsilon_1 \neq \epsilon_2$. Поэтому $k_3^{(1,2)} = k_3^{(0)} + i\epsilon_{1,2}$. Лемма доказана.

ЛЕММА 3. Если значение E , близкое к E_0 , принадлежит лакуне, то оператор $A(k) = A(k_{||}, E)$ самосопряжен.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Оператор $R_0(k)$ самосопряжен в лакуне, поэтому $\overline{\Gamma(x, y, k)} = \Gamma(y, x, k)$. Вследствие (3) и вещественности $i(k_3 - k_3^{(0)})$ (см. лемму 2) это же верно и для Γ' , а в силу знакопостоянства W – и для ядра оператора $A(k)$. Лемма доказана.

Пусть число $k_3 - k_3^{(0)}$ мало и является чисто мнимым. Тогда в силу лемм 2, 3 оператор $A(k)$ самосопряжен (из справедливости равенства $(A(k)\phi, \psi) - (\phi, A(k)\psi) = 0$ в лакуне в силу теоремы единственности вытекает его справедливость во всей окрестности точки $k_3^{(0)}$). Обозначим через $\lambda_n(k) \in \mathbb{R}$ и $\phi_n(x, k)$, $n = 1, 2, \dots$, собственные значения $A(k)$, занумерованные в порядке невозрастания модуля с учетом кратности, и соответствующие им собственные функции, образующие ортонормированный базис в $L^2(\Omega)$. Согласно теории возмущений (см. [4], добавление 1) как $\lambda_n(k)$, так и $\phi_n(x, k)$ (как $L^2(\Omega)$ -значные функции) можно считать аналитическими по переменной $\kappa_3 = -i(k_3 - k_3^{(0)})$ в некоторой вещественной окрестности нуля.

Введем обозначение $\phi_0(x) = \sqrt{W(x)}\psi_{n_0}(x, k_0)$. Далее предполагаем, что существует ограниченный обратный оператор $(1 + A(k_0))^{-1}$; в силу теоремы Фредгольма это эквивалентно тому, что $\lambda_n(k_0) \neq -1$ для всех $n = 1, 2, \dots$ (см. ниже, в начале раздела 3 обсуждение, касающееся выполнения данного условия).

Положим $c_n(k) = (\phi_0(x), \phi_n(x, k))$, $n = 1, 2, \dots$.

ЛЕММА 4. Пусть H – гильбертово пространство, $A = A_1 + a(\cdot, x_0)y_0$, где A_1 – линейный ограниченный оператор, действующий в H , такой, что существует обратный оператор $(1 + A_1)^{-1}$, $a = \text{const} \neq 0$, $x_0, y_0 \in H \setminus \{0\}$. Тогда обратный оператор $(1 + A)^{-1}$ существует в том и только в том случае, если

$$1 + a((1 + A_1)^{-1}y_0, x_0) \neq 0. \quad (8)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Имеем

$$1 + A = (1 + A_1)(1 + a(\cdot, x_0)(1 + A_1)^{-1}y_0). \quad (9)$$

Достаточно найти условие обратимости второго сомножителя в правой части (9). Положим для $x \in H$

$$y = x + a(x, x_0)(1 + A_1)^{-1}y_0. \quad (10)$$

Имеем $x = C(1 + A_1)^{-1}y_0 + y$, где $C = \text{const}$. Подставляя данное выражение в (10), получаем равенство

$$C(1 + A_1)^{-1}y_0 + Ca((1 + A_1)^{-1}y_0, x_0)(1 + A_1)^{-1}y_0 = -a(y, x_0)(1 + A_1)^{-1}y_0.$$

Отсюда находим, что условие однозначной разрешимости уравнения (10) относительно x для любого y или, что то же, условие существования оператора $(1 + A)^{-1}$, совпадает с (8), что и доказывает лемму.

ТЕОРЕМА 1. Пусть поверхность уровней проходит через точку k_0 . Тогда справедливо равенство

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{|c_n(k_0)|^2}{1 + \lambda_n(k_0)} = 0. \quad (11)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. В силу (3) имеем ($k \neq k_0$)

$$\sqrt{W}R_0(k)\sqrt{W} = -\frac{\text{sign}(W)(\cdot, \phi_0)\phi_0}{i(k_3 - k_3^{(0)})\partial^2 E_{n_0}(k_0)/\partial k_3^2} + A(k).$$

Согласно лемме 4 получаем условие несуществования оператора $(1 + \sqrt{W}R_0(k)\sqrt{W})^{-1}$ или, что то же, условие существования уровня в окрестности точки k_0 :

$$\Delta(k) = i(k_3 - k_3^{(0)})\frac{\partial^2 E_{n_0}(k_0)}{\partial k_3^2} - \text{sign}(W)((1 + A(k))^{-1}\phi_0, \phi_0) = 0; \quad (12)$$

но

$$((1 + A(k))^{-1}\phi_0, \phi_0) = \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\phi_0(x), \phi_n(x, k))\phi_n(x, k)}{1 + \lambda_n(k)}, \phi_0(x) \right) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{|c_n(k)|^2}{1 + \lambda_n(k)}. \quad (13)$$

По условию существует последовательность точек $k_n \in \mathcal{V}$, $n = 1, 2, \dots$, таких, что $k_n \rightarrow k_0$, $n \rightarrow \infty$. Из (12) и (13) для $k = k_n$, переходя к пределу при $n \rightarrow \infty$, получаем (11). Теорема доказана.

3. СЛУЧАЙ ВОЗМУЩЕНИЯ, ЗАВИСЯЩЕГО ОТ ПАРАМЕТРА

В дальнейшем вместо $W(x)$ рассматриваем зависящую от параметра функцию $\mu W(x)$, $\mu \in \mathbb{R}$. Это приводит к замене λ_n на $\mu\lambda_n$ и ϕ_0 на $\sqrt{\mu}\phi_0$; при этом ϕ_n , $n = 1, 2, \dots$, остаются теми же. При этом легко добиться выполнения условия $\mu\lambda_n(k_0) \neq -1$, $n = 1, 2, \dots$, сколь угодно малым изменением μ , в дальнейшем предполагается выполнение этого условия.

Положим (см. (12))

$$\Delta(k, \mu) = i(k_3 - k_3^{(0)})\frac{\partial^2 E_{n_0}(k_0)}{\partial k_3^2} - \text{sign}(\mu W)((1 + \mu A(k))^{-1}\phi_0, \phi_0).$$

В следующей теореме 2 будем предполагать, что для всех μ $\Delta(k, \mu) \not\equiv 0$ на многообразии $\mathcal{V}$ или, что то же самое, дробь $\Delta(k, \mu)/(k_3 - k_3^{(0)})$ несократима. (Заметим по поводу этого предположения, что возмущение $\mu W(x)$, главным образом определяющее уровни $\mathcal{V}$, т.е. нули функции $\Delta(k, \mu)$, и потенциал $V(x)$, определяющий множество $\mathcal{V}_0$, не связаны друг с другом. См. также замечание 2 к теореме 2, в котором сформулирован вариант этой теоремы, не требующий данного предположения.)

Введем обозначение

$$a_n = \sum_{m: \lambda_m(k_0) = \lambda_n(k_0)} |c_m(k_0)|^2.$$

ТЕОРЕМА 2. Пусть $0 < \lambda_{n_0}(k_0) < \lambda_{n'_0}(k_0)$ ($\lambda_{n_0}(k_0) < \lambda_{n'_0}(k_0) < 0$) – два соседних собственных значения оператора $A(k_0)$, причем $a_{n_0} \neq 0$, $a_{n'_0} \neq 0$. Тогда существует единственное число $\mu_0 \in (-1/\lambda_{n_0}(k_0), -1/\lambda_{n'_0}(k_0))$ такое, что у оператора $H_\mu(k_\parallel) = H_0(k_\parallel) + \mu W(x)$ поверхность уровней проходит через точку k_0 .

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Рассмотрим для определенности случай $\lambda_{n_0}(k_0) < \lambda_{n'_0}(k_0) < 0$, тогда $\mu > 0$. Докажем, что функция $\Delta(k_0, \mu)$ обращается в нуль в некоторой точке μ_0 интервала $\delta = (-1/\lambda_{n_0}(k_0), -1/\lambda_{n'_0}(k_0))$. Положим $\epsilon = -1/\mu$, тогда в силу равенства (см. (13))

$$\Delta(k_0, \mu) = -\mu \operatorname{sign}(W) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{|c_n(k_0)|^2}{1 + \mu \lambda_n(k_0)}$$

и стремления к нулю последовательности собственных значений $\lambda_n(k_0)$ функция

$$\begin{aligned} \Delta(k_0, \mu) + \mu \operatorname{sign}(W) \left(\frac{a_{n_0}}{1 + \mu \lambda_{n_0}(k_0)} + \frac{a_{n'_0}}{1 + \mu \lambda_{n'_0}(k_0)} \right) = \\ = \Delta \left(k_0, -\frac{1}{\epsilon} \right) + \operatorname{sign}(W) \left(\frac{a_{n_0}}{\lambda_{n_0}(k_0) - \epsilon} + \frac{a_{n'_0}}{\lambda_{n'_0}(k_0) - \epsilon} \right) \end{aligned}$$

равномерно ограничена по $\epsilon \in (\lambda_{n_0}(k_0), \lambda_{n'_0}(k_0))$. При возрастании ϵ от $\lambda_{n_0}(k_0) + 0$ до $\lambda_{n'_0}(k_0) - 0$ выражение

$$\frac{a_{n_0}}{\lambda_{n_0}(k_0) - \epsilon} + \frac{a_{n'_0}}{\lambda_{n'_0}(k_0) - \epsilon},$$

а вместе с ним и функция $\Delta(k_0, -1/\epsilon)$ (или $-\Delta(k_0, -1/\epsilon)$) возрастают от $-\infty$ до ∞ . Отсюда вытекает, что в некоторой точке $\mu_0 \in \delta$ имеет место равенство $\Delta(k_0, \mu_0) = 0$. Равенство $\Delta(k, \mu_0) = 0$ определяет уровни (см. доказательство теоремы 1), следовательно, $\Delta(k, \mu_0) \neq 0$ по переменной k_3 , иначе E_0 не было бы границей зоны. Пусть $k_3^{(m)}(\tilde{k}_\parallel)$, $m = 1, \dots, M$, – корни многочлена Вейерштрасса по переменной k_3 , отвечающего функции $\Delta(k, \mu_0)$ в окрестности точки k_0 [9]. Очевидно, что множество нулей функции $\Delta(k, \mu_0)$ задается в окрестности k_0 равенствами $k_3 = k_3^{(m)}(\tilde{k}_\parallel)$, $m = 1, \dots, M$. Пусть равенство $k_3 = k_3^{(0)}(\tilde{k}_\parallel)$ определяет многообразие $\mathcal{V}_0$ (см. введение). В силу предположения, сформулированного перед теоремой 2, в произвольно малой окрестности точки $k_\parallel$ имеем $k_3^{(m)}(\tilde{k}_\parallel) \neq k_3^{(0)}(\tilde{k}_\parallel)$, $m = 1, \dots, M$, и потому k_0 принадлежит замыканию множества $\mathcal{V}$.

Докажем единственность μ . Для этого вычислим

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Delta(k_0, \mu)}{\partial \mu} &= -\operatorname{sign}(W) \left(((1 + \mu A(k))^{-1} \phi_0, \phi_0) - \right. \\ &\quad \left. - \mu ((1 + \mu A(k))^{-1} A(k) (1 + A(k))^{-1} \phi_0, \phi_0) \right) = \\ &= -\operatorname{sign}(W) ((1 + A(k))^{-2} \phi_0, \phi_0). \end{aligned}$$

Данная величина сохраняет знак, следовательно, функция $\Delta(k_0, \mu)$ строго монотонна по переменной μ , и $\Delta(k_0, \mu) \neq 0$, если $\mu \neq \mu_0$, так что в силу теоремы 1 чисел $\mu \neq \mu_0$, для которых $\mathcal{V}$ проходило бы через точку k_0 , не существует. Теорема доказана.

ЗАМЕЧАНИЕ 1. В силу компактности оператора $A(k_0)$ имеем $\lim_{n \rightarrow \infty} \lambda_n = 0$. Если при этом число, например, положительных собственных значений бесконечно велико и для них всегда выполняются условия теоремы, то при $\mu \rightarrow -\infty$ поверхности уровней систематически бесконечное число раз проходят через границу зоны.

ЗАМЕЧАНИЕ 2. Аналогично с использованием равенства $\Delta(k, \mu) = 0$ без наложения условия на множества $\mathcal{V}$ и $\mathcal{V}_0$ можно доказать, что любая точка k вблизи k_0 такая, что $k_3 - k_3^{(0)} \in i\mathbb{R}$, является уровнем для некоторого $\mu_0 \in (-1/\lambda_{n_0}(k_0), -1/\lambda_{n'_0}(k_0))$, определяемого однозначно.

В силу сказанного выше множество $\mathcal{V}$ по переменной k описывается нулями функции $\Delta(k, \mu)$, которые представляют собой корни многочлена Вейерштрасса по переменной k_3 , имеющие в силу теоремы Пюизо [1] вид

$$k_3(k_{\parallel}, \mu) = k_3^{(0)}(k_{\parallel}, \mu) + \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n(k_{\parallel}) (\mu - \mu_0)^{n/p}, \quad (14)$$

где $p \geq 1$ – некоторое целое число (выбрана одна из ветвей корня $(\mu - \mu_0)^{1/p}$).

Будем говорить, что уровни, отвечающие корню $k_3(k_{\parallel}, \mu)$ многочлена Вейерштрасса, заходят в лауну, если для всех $\mu > \mu_0$ (или $\mu < \mu_0$), достаточно близких к μ_0 , значения E , соответствующие точкам $k_3 = k_3(k_{\parallel}, \mu)$ из окрестности $k_3^{(0)}$, принадлежат лауне и являются собственными значениями. (Число E , будучи на втором листе, может находиться в лауне, но не быть собственным значением.)

Пусть $\mu_0 \neq 0$, $\mu_0 \lambda_n(k_0) \neq -1$. Заметим, что функция

$$f(k, \mu) = \text{sign}(\mu W) ((1 + \mu A(k))^{-1} \phi_0, \phi_0) = \text{sign}(W) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\mu |c_n(k)|^2}{1 + \mu \lambda_n(k)}$$

в силу теоремы Хартогса [9] аналитична по совокупности переменных в окрестности точки (μ_0, k_0) .

ТЕОРЕМА 3. *Предположим, что уровни, отвечающие корню $k_3 = k_3(k_{\parallel}, \mu)$, заходят в лауну. Функция $k_3(k_{\parallel}, \mu)$ является аналитической функцией параметра μ в окрестности μ_0 в том и только в том случае, если*

$$-1 + \frac{\frac{\partial f(k_0, \mu_0)}{\partial k_3}}{i \frac{\partial^2 E_{n_0}}{\partial k_3^2}} \neq 0. \quad (15)$$

При этом

$$\frac{\partial \text{Im } k_3(k_{\parallel}, \mu_0)}{\partial \mu} \neq 0,$$

и при переходе параметра через точку μ_0 собственное значение становится резонансом.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Пусть $k_3 = k_3^{(0)} + i\kappa_3$, где $\kappa_3 \in \mathbb{R}$. С использованием выражения для функции $f(k, \mu)$ перепишем равенство (12) для $k \in \mathcal{V}$ с μW вместо W :

$$-i(k_3 - k_3^{(0)}) \frac{\partial^2 E_{n_0}(k_0)}{\partial k_3^2} + f(k, \mu) = 0. \quad (16)$$

Предположим, что выполнено (15), тогда по теореме о неявной функции [9] уравнение (16) определяет в комплексной окрестности точки $(k_3^{(0)}, \mu_0)$ комплексно-аналитическое многообразие, описываемое аналитической функцией $k_3 = \tilde{k}_3(\mu)$. С другой стороны, функция $k_3 = k_3(k_{\parallel}, \mu) = k_3(\mu)$, описывающая уровни, заходящие в лакуну, для $\mu > \mu_0$ (или для $\mu < \mu_0$) в силу лемм 2, 3 удовлетворяет уравнению (16). Полагая для определенности $\mu > \mu_0$, согласно (14) имеем

$$\begin{aligned} k_3(\mu) = \tilde{k}_3(\mu) &= k_3^{(0)}(k_{\parallel}, \mu) + \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n(k_{\parallel})(\mu - \mu_0)^{n/p} = \\ &= k_3^{(0)}(k_{\parallel}, \mu) + \sum_{m=1}^{\infty} \tilde{\alpha}_m(k_{\parallel})(\mu - \mu_0)^m, \end{aligned}$$

где в правой части стоит ряд Тейлора функции $\tilde{k}_3(\mu)$. Из равенства рядов легко получаем, что в разложении по степеням $(\mu - \mu_0)^{1/p}$ отличны от нуля лишь коэффициенты с номерами, кратными p , и, следовательно, функция $k_3(\mu)$ является аналитической.

С другой стороны, пусть уровни, отвечающие корню $k_3(\mu)$, заходят в лакуну, и функция $k_3(\mu)$ является аналитической. Подставив в (16) $k_3 = k_3(\mu)$, дифференцируя по μ и переходя к пределу при $\mu \rightarrow \mu_0$, получаем

$$\left(-i \frac{\partial^2 E_{n_0}(k_0)}{\partial k_3^2} + \frac{\partial f(k_0, \mu_0)}{\partial k_3} \right) k_3'(\mu_0) + \frac{\partial f(k_0, \mu_0)}{\partial \mu} = 0; \quad (17)$$

но

$$\frac{\partial f(k_0, \mu_0)}{\partial \mu} = \text{sign}(W) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{|c_n(k_0)|^2}{(1 + \mu_0 \lambda_n(k_0))^2} \neq 0 \quad (18)$$

(см. доказательство теоремы 2). Из (17), (18) и вещественности функции f вытекают неравенство (15) и неравенство $k_3'(\mu_0) \neq 0$, а также включение $k_3'(\mu_0) \in i\mathbb{R}$. Из этого включения и равенства

$$k_3(\mu) = k_3^{(0)} + k_3'(\mu_0)(\mu - \mu_0) + o(\mu - \mu_0)$$

следует, что $\text{Im } k_3(\mu)$ меняет знак при переходе через μ_0 , что и доказывает последнее утверждение теоремы.

ЗАМЕЧАНИЕ 1. Пусть для определенности E_0 – нижняя граница зоны. При переходе параметра μ через точку μ_0 собственное значение, возрастая до границы зоны E_0 , в точке μ_0 “отражается” от E_0 и далее, оставаясь вещественным, убывает, переходя на второй лист и превращаясь в резонанс (в “виртуальный уровень” (см. [10], гл. 13)).

ЗАМЕЧАНИЕ 2. Из условия $k'_3(\mu_0) \neq 0$ вытекает, что в (14) $\alpha_1(k_{\parallel}) \neq 0$ при $p = 1$. Если теперь для некоторого $p > 1$ выполнено $\alpha_1(k_{\parallel}) \neq 0$ и уровни, отвечающие $k_3(\mu)$, заходят в лауну, то при переходе μ через μ_0 собственное значение и в этой ситуации становится резонансом. Действительно, в противном случае выражение $\phi(\mu) = i\alpha_1(k_{\parallel})(\mu - \mu_0)^{1/p}$, будучи вещественным, сохраняло бы знак в окрестности точки μ_0 , но тогда разность $\mu - \mu_0 = (\phi(\mu)/i\alpha_1(k_{\parallel}))^p$ тоже должна сохранять знак в окрестности μ_0 , получаем противоречие. Переход собственного значения в собственное значение может быть, например, в ситуации, когда $k_3(\mu) = k_3^{(0)} + ic_2(\mu - \mu_0)^{2/p} + o((\mu - \mu_0)^{2/p})$, где $c_2 > 0$, и корень вещественный.

Список литературы

- [1] *М. Рид, Б. Саймон.* Методы современной математической физики. Т. 4. Анализ операторов. М.: Мир, 1982.
- [2] *E. B. Davies.* Proc. Cambridge Philos. Soc. 1977. V. 82. P. 327–334.
- [3] *Ю. П. Чубурин.* ТМФ. 1997. Т. 110. № 3. С. 443–453.
- [4] *Ф. А. Березин, М. А. Шубин.* Уравнение Шредингера. М.: Изд-во МГУ, 1983.
- [5] *С. Альбеверио, Ф. Гестези, Р. Хёзг-Крон, Х. Хольден.* Решаемые модели в квантовой механике. М.: Мир, 1991.
- [6] *А. А. Арсеньев.* ТМФ. 1995. Т. 104. № 2. С. 214–232.
- [7] *Г. В. Вольф, Ю. П. Чубурин, Л. А. Рубцова.* Поверхность. 1991. № 10. С. 81–89.
- [8] *М. Ш. Бирман.* Алгебра и анализ. 1996. Т. 8. № 1. С. 3–20.
- [9] *Р. Ганнинг, Х. Росси.* Аналитические функции многих комплексных переменных. М.: Мир, 1969.
- [10] *Дж. Тейлор.* Теория рассеяния. Квантовая теория нерелятивистских столкновений. М.: Мир, 1975.

Поступила в редакцию 17.I.2000 г.,
после доработки 18.VIII.2000 г.