Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Т. С. Тинюкова, Ю. П. Чубурин, Рассеяние электро-
на на кристаллическом слое, *ТМФ*, 2013, том 176, но-
мер 3, 444–457

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf8453>

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

Параметры загрузки:

IP: 52.90.164.192

26 апреля 2023 г., 09:28:32

© 2013 г.

Т. С. Тинюкова*, Ю. П. Чубурин†

РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНА НА КРИСТАЛЛИЧЕСКОМ СЛОЕ

Рассмотрен одночастичный дискретный оператор Шредингера H с периодическим потенциалом, возмущенным функцией εW , периодической по двум переменным и экспоненциально убывающей по третьей; здесь ε – малый параметр. Исследуется задача рассеяния для оператора H вблизи точки экстремума по третьей координате квазиимпульса для некоторого собственного значения оператора Шредингера с периодическим потенциалом в ячейке, другими словами, для малой перпендикулярной составляющей угла падения частицы на потенциальный барьер εW . Получены простые формулы для вероятностей прохождения и отражения.

Ключевые слова: дискретный оператор Шредингера, возмущенный периодический оператор, вероятности прохождения и отражения.

DOI: 1010.4231/tmf8453

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящей статье рассматривается дискретный оператор Шредингера вида

$$H = H_0 + V(n) + \varepsilon W(n), \quad n = (n_1, n_2, n_3) \in \mathbb{Z}^3,$$

действующий в пространстве $l^2(\mathbb{Z}^3)$. Здесь H_0 действует по формуле

$$(H_0\psi)(n) = \psi(n_1 + 1, n_2, n_3) + \psi(n_1 - 1, n_2, n_3) + \psi(n_1, n_2 + 1, n_3) + \\ + \psi(n_1, n_2 - 1, n_3) + \psi(n_1, n_2, n_3 + 1) + \psi(n_1, n_2, n_3 - 1)$$

и $V(n)$ – вещественный потенциал, периодический с периодом $T \geq 1$ по всем переменным n_j , $j = 1, 2, 3$, а $W(n)$ – вещественный ненулевой потенциал, периодический с периодом T по переменным n_1, n_2 , удовлетворяющий оценке

$$|W(n)| \leq C e^{-\alpha|n_3|}, \quad \alpha > 0, \quad (1)$$

*Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия. E-mail: tashih@mail.ru

†Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, Россия.

E-mail: chuburin@ftiudm.ru

где $\varepsilon > 0$ – (малый) параметр. Оператор H представляет собой гамильтониан электрона в конечно-разностном приближении в периодической слоистой структуре. Общие спектральные свойства, а также собственные значения и резонансы такого гамильтониана в “непрерывном” случае исследовались в статьях [1], [2]. Для кристаллической пленки ($V = 0$) задача рассеяния изучалась в работе [3].

Мы исследуем задачу рассеяния для оператора H преимущественно в ситуации, когда малые возмущения εW способны значительно влиять на картину рассеяния, а именно в случае электронов с малой перпендикулярной составляющей скорости, что означает малый угол падения. Это отвечает задаче вблизи экстремума по третьей компоненте квазиимпульса для некоторого собственного значения оператора Шредингера $H_0 + V(n)$ с периодическим потенциалом в ячейке. В частности, получены простые формулы для вероятностей прохождения и отражения от потенциального барьера, описываемого функцией εW .

Полученные в статье результаты можно применить, например, к исследованию прохождения электронов вдоль полосчатых (stripe) структур в высокотемпературных сверхпроводниках [4] через неоднородности, которые порождены избыточными зарядами или дырками.

Через $l^2(A) \otimes l^2(B)$, где $A \subset \mathbb{Z}^n$, B – измеримое множество в $\mathbb{R}^m$, будем обозначать гильбертово пространство измеримых по x функций $\varphi(n, x)$, где $(n, x) \in A \times B$, таких, что

$$\sum_{n \in A} \int_B |\varphi(n, x)|^2 dx < \infty,$$

с обычным скалярным произведением.

2. ВСПОМОГАТЕЛЬНЫЕ КОНСТРУКЦИИ И УТВЕРЖДЕНИЯ

Рассмотрим унитарный оператор (ср. с работами [5], [6])

$$U: l^2(\mathbb{Z}^3) \rightarrow l^2(\Omega_0) \otimes L^2(\Omega_0^*) \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\Omega_0^*}^{\otimes} l^2(\Omega_0) dk,$$

действующий на функцию $\varphi \in l^2(\mathbb{Z}^3)$ по формуле

$$(U\varphi)(n, k) = \widehat{\varphi}(n, k) = \left(\frac{T}{2\pi}\right)^{3/2} \sum_{\nu \in \mathbb{Z}^3} e^{-iT(\nu, k)} \varphi(n + T\nu) \Big|_{\Omega_0 \times \Omega_0^*},$$

где $\Omega_0 = \{0, 1, \dots, T-1\}^3$ и $\Omega_0^* = [0, 2\pi/T)^3$ – ячейки в прямой и обратной решетках соответственно. Положим $H_V = H_0 + V(n)$. Оператор $UH_V U^{-1}$ задается семейством действующих в $l^2(\Omega_0)$ операторов $H_V(k) = H_0(k) + V$, где $k = (k_1, k_2, k_3) \in \Omega_0^*$ – квазиимпульс, а оператор $H_0(k)$ имеет тот же вид, что и оператор H_0 , но с использованием свойства блоховости

$$\widehat{\varphi}(n + Tn_0, k) = e^{iT(n_0, k)} \widehat{\varphi}(n, k) \quad (2)$$

при $n_j \pm 1 \notin \{0, 1, \dots, T-1\}$, $j = 1, 2, 3$. В этом случае говорят, что оператор $UH_V U^{-1}$ разложен в прямом интеграле пространств $\int_{\Omega_0^*}^{\otimes} l^2(\Omega_0) dk$.

Для исследования оператора H нам потребуется также унитарный оператор (ср. с работами [1], [2])

$$U_{\parallel}: l^2(\mathbb{Z}^3) \rightarrow l^2(\Omega) \otimes L^2(\Omega^*) \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\Omega^*}^{\otimes} l^2(\Omega) dk_{\parallel}, \quad (3)$$

действующий на функцию $\varphi \in l^2(\mathbb{Z}^3)$ по формуле

$$(U_{\parallel}\varphi)(n, k_{\parallel}) = \tilde{\varphi}(n, k_{\parallel}) = \frac{T}{2\pi} \sum_{\mu \in \mathbb{Z}^2} e^{-iT(\mu, k_{\parallel})} \varphi(n + T(\mu, 0)) \Big|_{\Omega \times \Omega^*},$$

где $\Omega = \{0, 1, \dots, T-1\}^2 \times \mathbb{Z}$, $\Omega^* = [0, 2\pi/T)^2$, $k_{\parallel} = (k_1, k_2)$. Свойство блоховости здесь имеет вид

$$\tilde{\varphi}(n + T(n_{0\parallel}, 0), k_{\parallel}) = e^{iT(n_{0\parallel}, k_{\parallel})} \tilde{\varphi}(n, k_{\parallel}). \quad (4)$$

Оба оператора $U_{\parallel}H_VU_{\parallel}^{-1}$ и $U_{\parallel}HU_{\parallel}^{-1}$ могут быть разложены в прямом интеграле пространств $\int_{\Omega^*}^{\otimes} l^2(\Omega) dk_{\parallel}$ в семейства операторов $H_V(k_{\parallel})$ и $H(k_{\parallel})$ соответственно.

Оператор $H_V(k)$, действующий в конечномерном пространстве $l^2(\Omega_0) \cong \mathbb{C}^{T^3}$, является самосопряженным, следовательно, в $l^2(\Omega_0)$ существует ортонормированный базис, состоящий из блоховских собственных функций $\psi_m(n, k)$ оператора $H_V(k)$, отвечающих собственным значениям $\lambda_m(k)$, $m = 1, \dots, T^3$, пронумерованных с учетом кратности в порядке возрастания. Введем ядро резольвенты (функцию Грина) оператора $H_V(k)$:

$$G_V(n, n', k, \lambda) = \sum_{m=1}^{T^3} \frac{\psi_m(n, k) \overline{\psi_m(n', k)}}{\lambda_m(k) - \lambda}. \quad (5)$$

Через $G_V(n, n', k_{\parallel}, \lambda)$ будем обозначать функцию Грина оператора $H_V(k_{\parallel})$. Связь между двумя функциями Грина выражается формулами (ср. с работой [6])

$$\begin{aligned} G_V(n - (0, 0, Tm_3), n', k_{\parallel}, \lambda) &= G_V(n, n' + (0, 0, Tm_3), k_{\parallel}, \lambda) = \\ &= \frac{T}{2\pi} \int_0^{2\pi/T} G_V(n, n', k, \lambda) e^{-iTm_3k_3} dk_3, \\ G_V(n, n', k, \lambda) &= \sum_{m_3 \in \mathbb{Z}} e^{iTm_3k_3} G_V(n - (0, 0, Tm_3), n', k_{\parallel}, \lambda). \end{aligned} \quad (6)$$

Пусть $\lambda_0 = \lambda_{m_0}(k_0)$ – невырожденное собственное значение оператора $H_V(k_0)$, где $k_0 = (k_{10}, k_{20}, k_{30})$, которое отвечает нормированному собственному вектору $\psi_{m_0}(n, k_0)$. Можно считать, что функции $\lambda_{m_0}(k)$, $\psi_{m_0}(n, k)$ аналитически зависят от k в некоторой окрестности точки k_0 [5]. В дальнейшем предполагается, что

$$\frac{\partial \lambda_{m_0}(k_0)}{\partial k_3} = 0, \quad \frac{\partial^2 \lambda_{m_0}(k_0)}{\partial k_3^2} \neq 0.$$

В силу этих условий и теоремы о неявной функции [7] уравнение $\partial \lambda_{m_0}(k)/\partial k_3 = 0$ задает в окрестности точки k_0 поверхность, описываемую аналитической функцией $k_3^{(0)} = k_3^{(0)}(k_{\parallel})$, где $k_{\parallel}$ принадлежит некоторой окрестности точки $k_{0\parallel} = (k_{10}, k_{20})$. Далее мы будем предполагать, что в окрестности точки k_0 равенство $\lambda_m(k) = \lambda$

при фиксированном $k_{\parallel}$ может выполняться не более чем в конечном числе точек $k_{m,\alpha} = (k_{\parallel}, k_3^{(m,\alpha)})$, $\alpha = 1, \dots, A_m$, в которых для $m \neq m_0$ выполнено соотношение $\partial \lambda_m(k_{m,\alpha}) / \partial k_3 \neq 0$, а собственные значения $\lambda_m(k_{m,\alpha})$ невырождены. Множество точек $k_{m,\alpha}$, в которых данные производные положительны (отрицательны) обозначим через N_+ (соответственно через N_-). Запишем произвольные $n, n' \in \Omega$ в виде

$$n = n_0 + T(0, 0, \nu), \quad n' = n'_0 + T(0, 0, \nu'),$$

где $n_0, n'_0 \in \Omega_0$, $\nu, \nu' \in \mathbb{Z}$. Введем обозначение (только для W) $\sqrt{W} = \sqrt{|W|} \operatorname{sgn} W$.

Согласно работе [1] уравнение $\lambda_{m_0}(k) = \lambda$, рассматриваемое относительно k_3 , имеет для значений $k_{\parallel}$ из окрестности точки $k_{0\parallel}$ ровно два решения $k_{3j} = k_{3j}(k_{\parallel}, \lambda)$, $j = 1, 2$, аналитически зависящих от $k_{\parallel}, \lambda$ при $k_{31} \neq k_{32}$ и сливающихся, если $k = k_0$. Положим $\xi_j = k_{3j} - k_3^{(0)}(k_{\parallel})$, $j = 1, 2$, тогда $\xi_2 = f(\xi_1)$, где f – аналитическая функция такая, что $f'(0) = -1$ [1]. Таким образом, $\xi_2 = -\xi_1 + o(\xi_1)$. В дальнейшем вместо параметра λ мы будем часто использовать параметр ξ_1 . Как правило, для краткости мы будем опускать аргумент $k_{\parallel}$ у функции $k_3^{(0)}$. Для определенности предположим, что $(k_{\parallel}, k_{31}) \in N_+$.

Из соотношений (5), (6), как и в работах [1], [8], можно получить (см. приложение) следующие утверждения, в которых приведены несколько отличающиеся друг от друга формулы для функции Грина $G_V(n, n', k_{\parallel}, \lambda)$.

ЛЕММА 1. *Для точек $\lambda \neq \lambda_0$ из достаточно малой окрестности точки λ_0 имеет место формула*

$$\begin{aligned} G_V(n_0 + T(0, 0, \nu), n'_0 + T(0, 0, \nu'), k_{\parallel}, \lambda + i0) = \\ = -\frac{T}{i} \sum_{m: k_{m,\alpha} \in N_+} \frac{\psi_m(n_0 + T(0, 0, \nu), k_{m,\alpha}) \overline{\psi_m(n'_0 + T(0, 0, \nu'), k_{m,\alpha})}}{\partial \lambda_m(k_{m,\alpha}) / \partial k_3} \theta(\nu - \nu' - 1) + \\ + \frac{T}{i} \sum_{m: k_{m,\alpha} \in N_-} \frac{\psi_m(n_0 + T(0, 0, \nu), k_{m,\alpha}) \overline{\psi_m(n'_0 + T(0, 0, \nu'), k_{m,\alpha})}}{\partial \lambda_m(k_{m,\alpha}) / \partial k_3} \theta(\nu' - \nu) + \\ + \gamma(n, n', k_{\parallel}, \lambda), \end{aligned} \quad (7)$$

где $\theta(t)$ – функция Хевисайда, а функция $\gamma(n, n', k_{\parallel}, \lambda)$ удовлетворяет оценке

$$|\gamma(n, n', k_{\parallel}, \lambda)| \leq C e^{-\sigma|\nu - \nu'|}, \quad \sigma > 0, \quad (8)$$

причем функции

$$\sqrt{W(n)} \gamma(n, n', k_{\parallel}, \lambda), \quad \gamma(n, n', k_{\parallel}, \lambda) \sqrt{W(n')} \quad (9)$$

аналитически зависят от $(k_{\parallel}, \lambda)$ в некоторой окрестности точки $(k_{0\parallel}, \lambda_0)$ как $l^2(\Omega \times \Omega)$ -значные функции.

В следующей лемме мы пишем ξ_1 вместо $\xi_1 \pm i0$, (см. ниже замечание 1 перед леммой 3).

ЛЕММА 2. Для точек $(k_{\parallel}, \xi_1)$, где $\xi_1 \neq 0$, из достаточно малой окрестности точки $(k_{0\parallel}, 0)$ справедливо равенство

$$G_V(n, n', k_{\parallel}, \xi_1) = -\frac{T\psi_{m_0}(n, (k_{\parallel}, k_3^{(0)}))\overline{\psi_{m_0}(n', (k_{\parallel}, k_3^{(0)}))}}{i\xi_1 \partial^2 \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_3^{(0)})/\partial k_3^2} + g(n, n', k_{\parallel}, \xi_1),$$

причем $\sqrt{|W(n)|}g(n, n', k_{\parallel}, \xi_1)\sqrt{W(n')}$ является $l^2(\Omega \times \Omega)$ -значной аналитической функцией от $(k_{\parallel}, \xi_1)$ в окрестности точки $(k_{0\parallel}, 0)$.

3. УРАВНЕНИЕ ЛИППМАНА–ШВИНГЕРА

Уравнение Липпмана–Швингера в пространстве $l^2(\mathbb{Z}^3)$, отвечающее оператору H , запишем в виде

$$\psi(n) = \psi_{m_0}(n, k) - \varepsilon \sum_{n' \in \mathbb{Z}^3} G_V(n, n', \lambda + i0)W(n')\psi(n'), \quad (10)$$

где $G_V(n, n', \lambda)$ – функция Грина оператора H_V в $l^2(\mathbb{Z}^3)$, значение $\lambda = \lambda_{m_0}(k)$ принадлежит внутренности одной из зон, причем мы выбираем $k_3 = k_{31}$ (см. выше). Применим (формально) к равенству (10) оператор $U_{\parallel}$. Пользуясь соотношениями (2), (3), а также равенствами (ср. с работой [6])

$$\begin{aligned} G_V(n - T(\mu, 0), n', \lambda) &= G_V(n, n' + T(\mu, 0), \lambda) = \\ &= \left(\frac{T}{2\pi}\right)^2 \int_{\Omega_0^*} G_V(n, n', k, \lambda) e^{-iT(\mu, k_{\parallel})} dk, \end{aligned}$$

где $n, n' \in \Omega$, $\mu \in \mathbb{Z}^2$, получим

$$\tilde{\psi}(n, \tilde{k}_{\parallel}) = \tilde{\psi}_{m_0}(n, k, \tilde{k}_{\parallel}) - \varepsilon \sum_{n' \in \Omega} G_V(n, n', \tilde{k}_{\parallel}, \lambda + i0)W(n')\tilde{\psi}(n', \tilde{k}_{\parallel}),$$

где

$$G_V(n, n', \tilde{k}_{\parallel}, \lambda) = \sum_{\mu \in \mathbb{Z}^2} e^{iT(\mu, \tilde{k}_{\parallel})} G_V(n - T(\mu, 0), n', \lambda)$$

есть функция Грина оператора $H_V(k_{\parallel})$. При этом согласно свойству (4) (см. также монографию [9], § 7)

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_{m_0}(n, k, \tilde{k}_{\parallel}) &= \frac{T}{2\pi} \sum_{\mu \in \mathbb{Z}^2} e^{iT(\mu, k_{\parallel} - \tilde{k}_{\parallel})} \psi_{m_0}(n, k) = \\ &= \frac{2\pi}{T} \psi_{m_0}(n, (\tilde{k}_{\parallel}, k_3)) \delta_{\text{per}}(k_{\parallel} - \tilde{k}_{\parallel}), \end{aligned} \quad (11)$$

где мы положили

$$\delta_{\text{per}}(k_{\parallel}) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{\mu \in \mathbb{Z}^2} \delta\left(k_{\parallel} + \frac{2\pi}{T}\mu\right)$$

(ряды в (11) понимаются в смысле сходимости обобщенных функций от $k_{\parallel}$). Таким образом, уравнение Липпмана–Швингера в ячейке Ω имеет вид

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(n, \tilde{k}_{\parallel}) &= \frac{2\pi}{T} \psi_{m_0}(n, k) \delta_{\text{per}}(k_{\parallel} - \tilde{k}_{\parallel}) - \\ &- \varepsilon \sum_{n' \in \Omega} G_V(n, n', \tilde{k}_{\parallel}, \lambda + i0)W(n')\tilde{\psi}(n', \tilde{k}_{\parallel}). \end{aligned} \quad (12)$$

Полагая $k_3 = k_{31} = k_3^{(0)}(k_{\parallel}) + \xi_1$, запишем с помощью леммы 2 уравнение (12) для значений $k_{\parallel}$, близких к $k_{0\parallel}$, и малых ξ_1 в виде

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(n, \tilde{k}_{\parallel}) &= \frac{2\pi}{T} \psi_{m_0}(n, k) \delta_{\text{per}}(k_{\parallel} - \tilde{k}_{\parallel}) + \\ &+ \frac{\varepsilon T \psi_{m_0}(n, (\tilde{k}_{\parallel}, k_3^{(0)}))}{i \xi_1 \partial^2 \lambda_{m_0}(\tilde{k}_{\parallel}, k_3^{(0)}) / \partial k_3^2} \sum_{n' \in \Omega} \overline{\psi_{m_0}(n', (\tilde{k}_{\parallel}, k_3^{(0)}))} W(n') \tilde{\psi}(n', \tilde{k}_{\parallel}) - \\ &- \varepsilon \sum_{n' \in \Omega} g(n, n', \tilde{k}_{\parallel}, \xi_1) W(n') \tilde{\psi}(n', \tilde{k}_{\parallel}). \end{aligned} \quad (13)$$

Заметим, что первая сумма в (13) имеет смысл (после применения $\sqrt{|W|} \tilde{\psi}$ к пробным функциям) скалярного произведения $(\sqrt{|W|} \tilde{\psi}, \sqrt{W} \psi_{m_0})$ в пространстве $l^2(\Omega)$; в результате получаем скалярную обобщенную функцию. Обозначим через $K(\tilde{k}_{\parallel}, \xi_1)$ оператор с ядром $-\sqrt{|W(n)|} g(n, n', \tilde{k}_{\parallel}, \xi_1) \sqrt{W(n')}$.

Введем обозначения $\varphi = \sqrt{|W|} \tilde{\psi}$, $\varphi_{m_0} = \sqrt{|W|} \psi_{m_0}$ и положим

$$\theta(n, \tilde{k}_{\parallel}) = (1 - \varepsilon K(\tilde{k}_{\parallel}, \xi_1)) \varphi(n, \tilde{k}_{\parallel}). \quad (14)$$

Для новой неизвестной функции φ уравнение (13) примет вид

$$\begin{aligned} \varphi(n, \tilde{k}_{\parallel}) &= \frac{2\pi}{T} \varphi_{m_0}(n, k) \delta_{\text{per}}(k_{\parallel} - \tilde{k}_{\parallel}) + \\ &+ \frac{\varepsilon T \varphi_{m_0}(n, (\tilde{k}_{\parallel}, k_3^{(0)}))}{i \xi_1 \partial^2 \lambda_{m_0}(\tilde{k}_{\parallel}, k_3^{(0)}) / \partial k_3^2} \sum_{n' \in \Omega} \sqrt{W(n')} \overline{\varphi_{m_0}(n', (\tilde{k}_{\parallel}, k_3^{(0)}))} \varphi(n', \tilde{k}_{\parallel}) + \\ &+ \varepsilon K(\tilde{k}_{\parallel}, \xi_1) \varphi(n, \tilde{k}_{\parallel}). \end{aligned} \quad (15)$$

Решение φ данного уравнения будем искать в классе $l^2(\Omega)$ -значных обобщенных периодических функций с периодом $2\pi/T$ по переменным $\tilde{k}_j$, $j = 1, 2$, поскольку такой функцией является выражение $(2\pi/T) \varphi_{m_0}(n, k) \delta_{\text{per}}(k_{\parallel} - \tilde{k}_{\parallel})$ в правой части уравнения (15). Поясним действие операторнозначной функции K в соотношениях (14), (15) на векторнозначную обобщенную функцию.

Обозначим через $L(l^2(\Omega))$ банахово пространство всех линейных ограниченных операторов, действующих в $l^2(\Omega)$, а через

$$\mathcal{E}(\omega, L(l^2(\Omega))) \cong \mathcal{E}(\omega) \hat{\otimes} L(l^2(\omega)) \quad (16)$$

обозначим пространство Фреше бесконечно дифференцируемых $L(l^2(\Omega))$ -значных функций [10], [11], определенных в некоторой окрестности ω точки $k_{0\parallel}$. Вследствие леммы 2 для малых ξ_1 имеем, что $K \in \mathcal{E}(\omega, L(l^2(\Omega)))$ как функция аргумента $\tilde{k}_{\parallel}$. Обозначим как $\mathcal{D}'(\omega, l^2(\Omega))$ пространство $l^2(\Omega)$ -значных обобщенных функций на ω . Пусть $F \in \mathcal{D}'(\omega, l^2(\Omega))$. Определим отображение

$$\mathcal{E}(\omega) \times L(l^2(\Omega)) \xrightarrow{\alpha_F} \mathcal{D}'(\omega, l^2(\Omega))$$

формулой $\alpha_F(f, A)(\psi) = AF(f\psi)$ для $\psi \in \mathcal{D}(\omega)$. Очевидно, что билинейное отображение α_F раздельно непрерывно, а следовательно, непрерывно [12]. Таким образом, отображение α_F порождает согласно соотношению (16) непрерывное отображение

$$\tilde{\alpha}_F: \mathcal{E}(\omega, L(l^2(\Omega))) \rightarrow \mathcal{D}'(\omega, l^2(\Omega)).$$

Итак, действие $K(\tilde{k}_{\parallel}, \xi_1)\varphi(n, \tilde{k}_{\parallel})$ операторнозначной функции K на векторнозначную обобщенную функцию φ мы понимаем как $\tilde{\alpha}_{\varphi}(K)$. Заметим, что K можно (не единственным образом) представить в виде абсолютно сходящегося ряда [12]:

$$K(\tilde{k}_{\parallel}, \xi_1) = \sum_{m=1}^{\infty} \lambda_m \varphi_m(\tilde{k}_{\parallel}) A_m,$$

где $\{\lambda_m\} \in l^1$, а $\{\varphi_m\}$ и $\{A_m\}$ – сходящиеся к нулю последовательности в $\mathcal{E}(\omega)$ и $L(l^2(\Omega))$ соответственно. Тогда

$$(K(\tilde{k}_{\parallel}, \xi_1)\varphi(n, \tilde{k}_{\parallel}))(\psi) = \sum_{m=1}^{\infty} \lambda_m A_m \varphi(n, \tilde{k}_{\parallel})(\varphi_m \psi), \quad \psi \in \mathcal{D}(\omega).$$

Из этого равенства и теоремы III.4 из монографии [12] о сходимости отображений на предкомпактах очевидным образом вытекает непрерывность обобщенной функции $K\varphi$ по φ .

Такие же рассуждения справедливы, если взять пространство $l^{\infty}(\Omega)$ вместо $l^2(\Omega)$.

В дальнейшем будем предполагать, что

$$\xi_1 = A\varepsilon, \quad A = \text{const} \neq 0, \quad (17)$$

тогда $\xi_2 = -A\varepsilon + o(\varepsilon)$ (см. рассуждения перед леммой 1). Данное предположение означает, что для малых потенциалов рассматриваются частицы с малой третьей компонентой скорости (см. ниже).

ЗАМЕЧАНИЕ 1. Выбор знака плюс в выражении $\lambda + i0$ в уравнении (12) означает выбор определенного знака у $\xi_1 \pm i0$. Из принятого условия (17) следует, что полюс в точке $\xi_1 = 0$ (см. уравнение (13)) является устранимым. Таким образом, выбор знака не играет роли, и в дальнейшем мы опускаем $\pm i0$.

ЛЕММА 3. *Предположим, что выполнено условие (17). Тогда для значений $\tilde{k}_{\parallel}$ из некоторой окрестности точки $k_{0\parallel}$ и достаточно малых ε существует единственное решение уравнения Липпмана–Швингера (12) в ячейке Ω , имеющее вид*

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(n, \tilde{k}_{\parallel}) &= \frac{2\pi}{T} \psi_{m_0}(n, (k_{\parallel}, k_3^{(0)})) \times \\ &\times \left[\frac{iA \partial^2 \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_3^{(0)}) / \partial k_3^2}{iA \partial^2 \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_3^{(0)}) / \partial k_3^2 - W_0} + O(\varepsilon) \right] \delta_{\text{per}}(k_{\parallel} - \tilde{k}_{\parallel}), \end{aligned} \quad (18)$$

где

$$W_0 = T(\psi_{m_0}(n, (k_{\parallel}, k_3^{(0)})), W(n) \psi_{m_0}(n, (k_{\parallel}, k_3^{(0)}))),$$

а величина $\sqrt{W(n)} O(\varepsilon)$ аналитически зависит от $k_{\parallel}, \varepsilon$ как $l^2(\Omega)$ -значная функция и удовлетворяет оценке

$$\|\sqrt{W(n)} O(\varepsilon)\| \leq C\varepsilon, \quad C = \text{const}. \quad (19)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Из формулы (14) и уравнения (15) получаем, что в окрестности точки $k_{0\parallel}$

$$\theta = \frac{2\pi}{T} \varphi_{m_0}(n, k) \delta_{\text{per}}(k_{\parallel} - \tilde{k}_{\parallel}) + C \varphi_{m_0}(n, (\tilde{k}_{\parallel}, k_3^{(0)})), \quad (20)$$

где C не зависит от n . Вследствие соотношений (15), (20), продолжая равенства по периодичности, имеем

$$\begin{aligned} C &= \frac{\varepsilon T}{i\xi_1 \partial^2 \lambda_{m_0}(\tilde{k}_{\parallel}, k_3^{(0)}) / \partial k_3^2} ((1 - \varepsilon K)^{-1} \theta, \sqrt{W} \psi_{m_0}) = \\ &= \frac{\varepsilon T}{i\xi_1 \partial^2 \lambda_{m_0}(\tilde{k}_{\parallel}, k_3^{(0)}) / \partial k_3^2} \left[\left(\frac{2\pi}{T} \varphi_{m_0}(n, k), \sqrt{W(n)} \psi_{m_0}(n, (\tilde{k}_{\parallel}, k_3^{(0)})) \right) \delta_{\text{per}}(k_{\parallel} - \tilde{k}_{\parallel}) + \right. \\ &\quad + (\varphi_{m_0}, \sqrt{W} \psi_{m_0}) C + \\ &\quad \left. + \varepsilon \left[\left(L \left(\frac{2\pi}{T} \varphi_{m_0} \right), \sqrt{W} \psi_{m_0} \right) \delta_{\text{per}}(k_{\parallel} - \tilde{k}_{\parallel}) + (L(\varphi_{m_0}), \sqrt{W} \psi_{m_0}) C \right] \right], \end{aligned}$$

где $L = \sum_{n=1}^{\infty} \varepsilon^{n-1} K^n$. Отсюда получаем

$$\begin{aligned} C &= \frac{2\pi (\psi_{m_0}(n, k), W(n) \psi_{m_0}(n, (\tilde{k}_{\parallel}, k_3^{(0)}))) \delta_{\text{per}}(k_{\parallel} - \tilde{k}_{\parallel})}{iA \partial^2 \lambda_{m_0}(\tilde{k}_{\parallel}, k_3^{(0)}) / \partial k_3^2 - T (\psi_{m_0}(n, k), W(n) \psi_{m_0}(n, (\tilde{k}_{\parallel}, k_3^{(0)})))} + \\ &\quad + O(\varepsilon) \delta_{\text{per}}(k_{\parallel} - \tilde{k}_{\parallel}) = \\ &= \frac{2\pi (\psi_{m_0}(n, (\tilde{k}_{\parallel}, k_3^{(0)})), W(n) \psi_{m_0}(n, (\tilde{k}_{\parallel}, k_3^{(0)}))) \delta_{\text{per}}(k_{\parallel} - \tilde{k}_{\parallel})}{iA \partial^2 \lambda_{m_0}(\tilde{k}_{\parallel}, k_3^{(0)}) / \partial k_3^2 - T (\psi_{m_0}(n, (\tilde{k}_{\parallel}, k_3^{(0)})), W(n) \psi_{m_0}(n, (\tilde{k}_{\parallel}, k_3^{(0)})))} + \\ &\quad + O(\varepsilon) \delta_{\text{per}}(k_{\parallel} - \tilde{k}_{\parallel}), \end{aligned} \quad (21)$$

где было использовано равенство

$$\psi_{m_0}(n, k) = \psi_{m_0}(n, (k_{\parallel}, k_3^{(0)} + \xi_1)) = \psi_{m_0}(n, (\tilde{k}_{\parallel}, k_3^{(0)})) + O(\varepsilon).$$

Из формул (14), (20) и (21) находим

$$\begin{aligned} \varphi(n, \tilde{k}_{\parallel}) &= (1 - \varepsilon K)^{-1} \theta(n, \tilde{k}_{\parallel}) = \frac{2\pi}{T} \varphi_{m_0}(n, (\tilde{k}_{\parallel}, k_3^{(0)})) \delta_{\text{per}}(k_{\parallel} - \tilde{k}_{\parallel}) + \\ &\quad + \frac{2\pi}{T} \frac{W_0 \varphi_{m_0}(n, (\tilde{k}_{\parallel}, k_3^{(0)})) \delta_{\text{per}}(k_{\parallel} - \tilde{k}_{\parallel})}{iA \partial^2 \lambda_{m_0}(\tilde{k}_{\parallel}, k_3^{(0)}) / \partial k_3^2 - W_0} + O(\varepsilon) \delta_{\text{per}}(k_{\parallel} - \tilde{k}_{\parallel}) = \\ &= \frac{2\pi}{T} \left(\frac{iA \partial^2 \lambda_{m_0}(\tilde{k}_{\parallel}, k_3^{(0)}) / \partial k_3^2}{iA \partial^2 \lambda_{m_0}(\tilde{k}_{\parallel}, k_3^{(0)}) - W_0} + O(\varepsilon) \right) \varphi_{m_0}(n, (\tilde{k}_{\parallel}, k_3^{(0)})) \delta_{\text{per}}(k_{\parallel} - \tilde{k}_{\parallel}). \end{aligned}$$

Если $W(n) \neq 0$ для всех $n \in \Omega$, после деления на $\sqrt{|W(n)|}$ получаем требуемое равенство (18). В противном случае берем последовательность не обращающихся в нуль функций W_l , $l = 1, 2, \dots$, удовлетворяющих оценке (1) с одним и тем же α и поточечно сходящихся к W . После этого в равенстве (18), заменив W на W_l , переходим к пределу при $l \rightarrow \infty$. Аналитическая зависимость $\sqrt{W(n)} O(\varepsilon)$ от $k_{\parallel}, \varepsilon$ следует из леммы 2, а оценка (19) очевидна из проделанных выкладок.

4. РАССЕЯНИЕ

Пользуясь соотношениями (12), (18), а также леммой 1, запишем решение ψ уравнения (12) в виде, подходящем для исследования рассеяния. Имеем для $n_0, n'_0 \in \Omega_0$

$$\begin{aligned}
 \tilde{\psi}(n_0 + T(0, 0, \nu), \tilde{k}_{\parallel}) &= \frac{2\pi}{T} \psi_{m_0}(n_0 + T(0, 0, \nu), k) \delta_{\text{per}}(k_{\parallel} - \tilde{k}_{\parallel}) + \\
 &+ \frac{\varepsilon T \psi_{m_0}(n_0 + T(0, 0, \nu), (k_{\parallel}, k_{31}))}{i \partial \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_{31}) / \partial k_3} \times \\
 &\times \sum_{\substack{n' \in \Omega, \\ \nu' \leq \nu-1}} \overline{\psi_{m_0}(n'_0 + T(0, 0, \nu'), (k_{\parallel}, k_{31}))} W(n'_0 + T(0, 0, \nu')) \tilde{\psi}(n'_0 + T(0, 0, \nu'), \tilde{k}_{\parallel}) - \\
 &- \frac{\varepsilon T \psi_{m_0}(n_0 + T(0, 0, \nu), (k_{\parallel}, k_{32}))}{i \partial \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_{32}) / \partial k_3} \times \\
 &\times \sum_{\substack{n' \in \Omega, \\ \nu' \geq \nu}} \overline{\psi_{m_0}(n'_0 + T(0, 0, \nu'), (k_{\parallel}, k_{32}))} W(n'_0 + T(0, 0, \nu')) \tilde{\psi}(n'_0 + T(0, 0, \nu'), \tilde{k}_{\parallel}) - \\
 &- \varepsilon \sum_{n' \in \Omega} \eta(n, n', k_{\parallel}, \xi_1) W(n') \tilde{\psi}(n', \tilde{k}_{\parallel}) = \frac{2\pi}{T} \psi_{m_0}(n_0 + T(0, 0, \nu), k) \delta_{\text{per}}(k_{\parallel} - \tilde{k}_{\parallel}) + \\
 &+ \left(\frac{T \psi_{m_0}(n_0 + T(0, 0, \nu), (k_{\parallel}, k_{31}))}{i A \partial^2 \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_3^{(0)}) / \partial k_3^2} \frac{2\pi}{T} \frac{i A \partial^2 \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_3^{(0)}) / \partial k_3^2}{i A \partial^2 \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_3^{(0)}) / \partial k_3^2 - W_0} \times \right. \\
 &\times \sum_{\substack{n' \in \Omega, \\ \nu' \leq \nu-1}} |\psi_{m_0}(n'_0 + T(0, 0, \nu'), (k_{\parallel}, k_3^{(0)}))|^2 W(n'_0 + T(0, 0, \nu')) + \\
 &+ \frac{T \psi_{m_0}(n_0 + T(0, 0, \nu), (k_{\parallel}, k_{32}))}{i A \partial^2 \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_3^{(0)}) / \partial k_3^2} \frac{2\pi}{T} \frac{i A \partial^2 \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_3^{(0)}) / \partial k_3^2}{i A \partial^2 \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_3^{(0)}) / \partial k_3^2 - W_0} \times \\
 &\times \sum_{\substack{n' \in \Omega, \\ \nu' \geq \nu}} |\psi_{m_0}(n'_0 + T(0, 0, \nu'), (k_{\parallel}, k_3^{(0)}))|^2 W(n'_0 + T(0, 0, \nu')) + O(\varepsilon) \Big) \delta_{\text{per}}(k_{\parallel} - \tilde{k}_{\parallel}) = \\
 &= \frac{2\pi}{T} \left[1 + \frac{T}{i A \partial^2 \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_3^{(0)}) / \partial k_3^2 - W_0} \times \right. \\
 &\times \sum_{\substack{n' \in \Omega, \\ \nu' \leq \nu-1}} |\psi_{m_0}(n'_0 + T(0, 0, \nu'), (k_{\parallel}, k_3^{(0)}))|^2 W(n'_0 + T(0, 0, \nu')) \Big] \times \\
 &\times \psi_{m_0}(n, (k_{\parallel}, k_{31})) \delta_{\text{per}}(k_{\parallel} - \tilde{k}_{\parallel}) + \frac{2\pi}{T} \left[\frac{T}{i A \partial^2 \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_3^{(0)}) / \partial k_3^2 - W_0} \times \right. \\
 &\times \sum_{\substack{n' \in \Omega, \\ \nu' \geq \nu}} |\psi_{m_0}(n'_0 + T(0, 0, \nu'), (k_{\parallel}, k_3^{(0)}))|^2 W(n'_0 + T(0, 0, \nu')) \Big] \times \\
 &\times \psi_{m_0}(n, (k_{\parallel}, k_{32})) \delta_{\text{per}}(k_{\parallel} - \tilde{k}_{\parallel}) + O(\varepsilon) \delta_{\text{per}}(k_{\parallel} - \tilde{k}_{\parallel}). \tag{22}
 \end{aligned}$$

Здесь η является суммой слагаемых, порожденных последним слагаемым γ в правой части равенства (7) в лемме 1, а также слагаемыми, отвечающими $k_{m,\alpha} \neq (k_{\parallel}, k_{3j})$,

$j = 1, 2$ (у этих слагаемых знаменатели по условию не обращаются в нуль при $\lambda_m(k) = \lambda_0$ и, таким образом, все они войдут в состав $O(\varepsilon)$). Легко видеть, что величина $O(\varepsilon)$ аналитически зависит от $(k_{\parallel}, \varepsilon)$ в окрестности точки $(k_{0\parallel}, 0)$.

Используя формулы (3), (4), (22), найдем решение исходного уравнения Липпмана–Швингера (10) в $\mathbb{Z}^2$ (точный смысл интеграла от периодической обобщенной функции см. в книге [9]). Имеем для $n = \bar{n} + T(\mu_{\parallel}, 0)$, где $\bar{n} = n_0 + T(0, 0, \mu_3) \in \Omega$, $n_0 \in \Omega_0$,

$$\begin{aligned} \psi(n) &= \frac{T}{2\pi} \int_{\Omega^*} e^{iT(\mu_{\parallel}, \tilde{k}_{\parallel})} \tilde{\psi}(\bar{n}, \tilde{k}_{\parallel}) d\tilde{k}_{\parallel} = \\ &= \left[1 + \frac{T}{iA \partial^2 \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_3^{(0)}) / \partial k_3^2 - W_0} \sum_{\substack{n' \in \Omega, \\ \mu'_3 \leq \mu_3 - 1}} |\psi_{m_0}(n'_0 + T(0, 0, \mu'_3), (k_{\parallel}, k_3^{(0)}))|^2 \times \right. \\ &\quad \times W(n'_0 + T(0, 0, \mu'_3)) \Big] \psi_{m_0}(n, (k_{\parallel}, k_{31})) + \\ &+ \left[\frac{T}{iA \partial^2 \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_3^{(0)}) / \partial k_3^2 - W_0} \sum_{\substack{n' \in \Omega, \\ \mu'_3 > \mu_3}} |\psi_{m_0}(n'_0 + T(0, 0, \mu'_3), (k_{\parallel}, k_3^{(0)}))|^2 \times \right. \\ &\quad \times W(n'_0 + T(0, 0, \mu'_3)) \Big] \psi_{m_0}(n, (k_{\parallel}, k_{32})) + O(\varepsilon). \end{aligned} \quad (23)$$

Отсюда получаем следующее утверждение.

ТЕОРЕМА 1. В условиях леммы 3 имеем

$$\psi(n) = \begin{cases} a_+ \psi_{m_0}(n, (k_{\parallel}, k_{31})) + \eta_+(n) + O(\varepsilon), & n_3 \geq 0, \\ \psi_{m_0}(n, (k_{\parallel}, k_{31})) + a_- \psi_{m_0}(n, (k_{\parallel}, k_{32})) + \eta_-(n) + O(\varepsilon), & n_3 < 0, \end{cases} \quad (24)$$

где

$$\begin{aligned} a_+ &= \frac{iA \partial^2 \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_3^{(0)}) / \partial k_3^2}{iA \partial^2 \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_3^{(0)}) / \partial k_3^2 - W_0} = \frac{i \partial \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_{31}) / \partial k_3}{i \partial \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_{31}) / \partial k_3 - \varepsilon W_0} + O(\varepsilon), \\ a_- &= \frac{W_0}{iA \partial^2 \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_3^{(0)}) / \partial k_3^2 - W_0} = \frac{\varepsilon W_0}{i \partial \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_{31}) / \partial k_3 - \varepsilon W_0} + O(\varepsilon), \end{aligned}$$

a функции $\eta_{\pm}(n) = \eta_{\pm}(n, k)$ удовлетворяют неравенству (1) и аналитически зависят от k как $l^2(\Omega_{\pm})$ -значные функции, где $\Omega_+ = \Omega \cap \{n_3 \geq 0\}$, $\Omega_- = \Omega \cap \{n_3 < 0\}$.

Рассмотрим поведение волновых пакетов, которые порождены блоховской функцией $\psi_{m_0}(n, k)$. Имеем $\psi_{m_0}(n, k) = e^{i(k, n)} \theta(n, k)$, где $\theta(n, k)$ – функция, периодическая по всем переменным с периодом T . Для ортонормированного базиса в $l^2(\Omega_0)$ вида

$$\psi_j(n) = T^{-3/2} e^{(2\pi i/T)(n, j)}, \quad j \in \Omega_0,$$

имеем

$$\theta(n, k) = T^{-3/2} \sum_{j \in \Omega_0} c_j(k) e^{(2\pi i/T)(n, j)}, \quad c_j(k) = (\theta(n, k), T^{-3/2} e^{(2\pi i/T)(n, j)}).$$

Далее, решение уравнения Шредингера

$$i \frac{\partial \psi(n, t)}{\partial t} = H_V \psi(n, t)$$

ищем в виде

$$\begin{aligned} \psi(n, t) &= \int_{\mathbb{R}^3} C(k) \psi_{m_0}(n, k) e^{-it\lambda_{m_0}(k)} dk = \\ &= T^{-3/2} \sum_{j \in \Omega_0} e^{(2\pi i/T)(n, j)} \int_{\mathbb{R}^3} C(k) c_j(k) e^{i[(k, n) - it\lambda_{m_0}(k)]} dk, \end{aligned} \quad (25)$$

где $C(k) \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ и носитель функции $C(k)$ находится в достаточно малой окрестности некоторой точки k , $k_3 \neq k_3^{(0)}(k_{\parallel})$. Волновой пакет, отвечающий j -му слагаемому в (25), при больших $|t|$ сосредоточен (с точностью до слагаемого со сколь угодно малой нормой в $l^2(\mathbb{Z}^3)$) в узлах n , для которых

$$-\delta < \frac{n_\nu}{t} - \frac{\partial \lambda_{m_0}(k)}{\partial k_\nu} < \delta, \quad \nu = 1, 2, 3, \quad (26)$$

где $\delta > 0$ достаточно мало (см. книгу [13], раздел XI.3). Таким образом, волновой пакет, расплываясь при $|t| \rightarrow \infty$, перемещается со скоростью $\text{grad } \lambda_{m_0}(k)$.

Аналогично, решение уравнения Шредингера

$$i \frac{\partial \psi(n, t)}{\partial t} = H \psi(n, t)$$

ищем в виде

$$\psi(n, t) = \int_{\mathbb{R}^3} C(k) \psi(n, k) e^{-it\lambda_{m_0}(k)} dk, \quad (27)$$

где функция $C(k)$ та же, что и выше, $\psi(n, k) = \psi(n)$ – решение (23) уравнения Липпмана–Швингера в $\mathbb{Z}^3$. При этом $k_3 = k_{31}$, а k_{32} считаем функцией от k_{31} . Заметим, что норма в $l^2(\mathbb{Z}^3)$ интегралов, содержащих η_+ , при $|t| \rightarrow \infty$ стремится к нулю [3]. Поэтому с точностью $O(\varepsilon)$ интеграл в правой части (27) сводится согласно формулам (24) к интегралам вида (25).

Сказанное выше позволяет описать картину рассеяния для значений k_3 , близких к $k_3^{(0)}$, т. е. для малой перпендикулярной составляющей скорости налетающего электрона. Будем предполагать, что

$$\frac{\partial^2 \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_3^{(0)})}{\partial k_3^2} > 0, \quad \xi_1 > 0,$$

тогда

$$\frac{\partial \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_{31})}{\partial k_3} = \frac{\partial^2 \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_3^{(0)})}{\partial k_3^2} \xi_1 + o(\xi_1) > 0, \quad \frac{\partial \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_{32})}{\partial k_3} < 0.$$

При $t \approx -\infty$ и $n_3 \approx -\infty$ справедлива нижняя формула в (24), причем вклад в рассеяние согласно условию (26) вносит лишь первое слагаемое из этой формулы; вдоль оси On_3 частица перемещается слева направо. При $t \approx \infty$ вклад дает второе слагаемое в нижнем из равенств (24), описывающее отражение частицы от потенциального барьера. Также при $t \approx \infty$ дает вклад в рассеяние первое слагаемое из верхнего равенства в (24), описывающее прохождение частицы. Рассматриваемые волновые пакеты для достаточно больших $|t|$ и малых ε с любой степенью точности локализованы в непересекающихся областях $\{n_3 \geq 0\}$ и $\{n_3 < 0\}$, что позволяет вычислить вероятности (пропорциональные суммам $|\psi(n, t)|^2$ по данным областям значений n) распространения частицы в эти области. Проводя стандартные рассуждения, получаем равенство $C = |a_+|^2 C + |a_-|^2 C'$, где константы C и C' отвечают слагаемым с функциями $\psi_{m_0}(n, (k_{\parallel}, k_{31}))$ и $\psi_{m_0}(n, (k_{\parallel}, k_{32}))$ соответственно. Из очевидного равенства $1 = |a_+|^2 + |a_-|^2$ вытекает, что $C' = C$. Следовательно, вероятности P_+ и P_- прохождения и отражения от потенциала $\varepsilon W(n)$ равны

$$\begin{aligned} P_+ &= |a_+|^2 = \frac{A^2(\partial^2 \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_3^{(0)})/\partial k_3^2)^2}{A^2(\partial^2 \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_3^{(0)})/\partial k_3^2)^2 + W_0^2} + O(\varepsilon) = \\ &= \frac{(\partial \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_{31})/\partial k_3)^2}{(\partial \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_{31})/\partial k_3)^2 + \varepsilon^2 W_0^2} + O(\varepsilon), \\ P_- &= |a_-|^2 = \frac{W_0^2}{A^2(\partial^2 \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_3^{(0)})/\partial k_3^2)^2 + W_0^2} + O(\varepsilon) = \\ &= \frac{\varepsilon^2 W_0^2}{(\partial \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_{31})/\partial k_3)^2 + \varepsilon^2 W_0^2} + O(\varepsilon). \end{aligned}$$

Меняя третью компоненту $\partial \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_{31})/\partial k_3$ скорости налетающей частицы при фиксированном потенциале (т.е. при $\varepsilon = \text{const}$), мы меняем величину A . Таким образом, варьируя угол падения электронов, можно добиться изменения по определенному закону величин P_+ и P_- .

ЗАМЕЧАНИЕ 2. Подобные формулы для вероятности прохождения (отражения) могут быть получены также для гамильтониана $A\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} + V(x)$, где $A = \text{const}$, $\mathbf{p} = (p_x, p_y, 0)$ – импульс, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ – вектор из матриц Паули, рассматриваемого в полосе. Гамильтонианы такого вида возникают при изучении графена или прохождения электронов по поверхности трехмерного топологического изолятора [14].

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы рассмотрели задачу рассеяния блоховского электрона в бесконечном кристалле на плоском внедренном слое. Предполагается, что энергия Ферми находится вблизи локального экстремума одной из ветвей закона дисперсии, вычисленного вдоль оси, перпендикулярной к слою. В случае одновременной малости двух величин, возмущения и компоненты скорости, перпендикулярной к слою, найдено простое выражение для вероятности прохождения (отражения), зависящее от скорости частицы и матричного элемента, связывающего потенциал слоя и блоховскую волновую функцию налетающего электрона.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Доказательство леммы 1

Из соотношений (2), (5), (6) имеем

$$\begin{aligned}
 G_V(n_0 + T(0, 0, \nu), n'_0 + T(0, 0, \nu'), k_{\parallel}, \lambda + i0) = \\
 = \frac{T}{2\pi} \int_0^{2\pi/T} \left(\sum_{m=1}^{T^3} \frac{\psi_m(n_0, k) \overline{\psi_m(n'_0, k)}}{\lambda_m(k) - \lambda - i0} \right) e^{iT(\nu - \nu')k_3} dk_3 = \\
 = \frac{T}{2\pi} \int_0^{2\pi/T} \left(\sum_{m: k_{m,\alpha} \in N_+} \frac{\psi_m(n_0, k_{m,\alpha}) \overline{\psi_m(n'_0, k_{m,\alpha})}}{(i/T) \partial \lambda_m(k_{m,\alpha}) / \partial k_3 (1 - \exp(iT(k_3 - k_3^{(m,\alpha)} - i0)))} \right) \times \\
 \times e^{iT(\nu - \nu')k_3} dk_3 + \\
 + \frac{T}{2\pi} \int_0^{2\pi/T} \left(\sum_{m: k_{m,\alpha} \in N_-} \frac{\psi_m(n_0, k_{m,\alpha}) \overline{\psi_m(n'_0, k_{m,\alpha})}}{(i/T) \partial \lambda_m(k_{m,\alpha}) / \partial k_3 (1 - \exp(iT(k_3 - k_3^{(m,\alpha)} + i0)))} \right) \times \\
 \times e^{iT(\nu - \nu')k_3} dk_3 + \gamma(n, n', k_{\parallel}, \lambda) = \\
 = \frac{T}{2\pi} \int_0^{2\pi/T} \left(- \sum_{m: k_{m,\alpha} \in N_+} \frac{\psi_m(n_0, k_{m,\alpha}) \overline{\psi_m(n'_0, k_{m,\alpha})}}{(i/T) \partial \lambda_m(k_{m,\alpha}) / \partial k_3} \sum_{n=1}^{\infty} e^{iT(k_3^{(m,\alpha)} - k_3 + i0)n} \right) \times \\
 \times e^{iT(\nu - \nu')k_3} dk_3 + \\
 + \frac{T}{2\pi} \int_0^{2\pi/T} \left(\sum_{m: k_{m,\alpha} \in N_-} \frac{\psi_m(n_0, k_{m,\alpha}) \overline{\psi_m(n'_0, k_{m,\alpha})}}{(i/T) \partial \lambda_m(k_{m,\alpha}) / \partial k_3} \sum_{n=0}^{\infty} e^{iT(k_3^{(m,\alpha)} - k_3 + i0)n} \right) \times \\
 \times e^{iT(\nu - \nu')k_3} dk_3 + \gamma(n, n', k_{\parallel}, \lambda) = \\
 = - \sum_{m: k_{m,\alpha} \in N_+} \frac{\psi_m(n_0, k_{m,\alpha}) \overline{\psi_m(n'_0, k_{m,\alpha})}}{(i/T) \partial \lambda_m(k_{m,\alpha}) / \partial k_3} e^{iT(\nu - \nu')k_3^{(m,\alpha)}} \theta(\nu - \nu' - 1) + \\
 + \sum_{m: k_{m,\alpha} \in N_-} \frac{\psi_m(n_0, k_{m,\alpha}) \overline{\psi_m(n'_0, k_{m,\alpha})}}{(i/T) \partial \lambda_m(k_{m,\alpha}) / \partial k_3} e^{iT(\nu - \nu')k_3^{(m,\alpha)}} \theta(\nu - \nu') + \gamma(n, n', k_{\parallel}, \lambda),
 \end{aligned}$$

что совпадает с выражением (7). Здесь γ как коэффициент Фурье аналитической функции удовлетворяет неравенству (8), и для функций (9) выполнено второе из утверждений леммы 1.

Лемма 2 формально следует из леммы 1, поскольку

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_{31})}{\partial k_3} &= \frac{\partial^2 \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_3^{(0)})}{\partial k_3^2} \xi_1 + o(\xi_1), \\
 \frac{\partial \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_{32})}{\partial k_3} &= \frac{\partial^2 \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_3^{(0)})}{\partial k_3^2} \xi_2 + o(\xi_2) = - \frac{\partial^2 \lambda_{m_0}(k_{\parallel}, k_3^{(0)})}{\partial k_3^2} \xi_1 + o(\xi_1),
 \end{aligned}$$

и все слагаемые, кроме одного, составляют функцию g . Подробные выкладки см. в работе [1].

Благодарности. Работа частично поддержана УрО РАН (грант 12-У-2-1021).

Список литературы

- [1] Ю. П. Чубурин, *ТМФ*, **110**:3 (1997), 443–453.
- [2] Yu. P. Chuburin, *Commun. Math. Phys.*, **249**:3 (2004), 497–510.
- [3] Ю. П. Чубурин, *ТМФ*, **72**:1 (1987), 120–131.
- [4] M. Vojta, *Adv. Phys.*, **58**:6 (2009), 699–820, arXiv: 0901.3145.
- [5] М. Рид, Б. Саймон, *Методы современной математической физики*, т. 4: *Анализ операторов*, Мир, М., 1982.
- [6] L. Y. Baranova, Y. P. Chuburin, *J. Phys. A*, **41**:43 (2008), 435205, 11 pp.
- [7] Р. Ганнинг, Х. Росси, *Аналитические функции многих комплексных переменных*, Мир, М., 1969.
- [8] Ю. П. Чубурин, *ТМФ*, **98**:1 (1994), 38–47.
- [9] В. С. Владимиров, *Обобщенные функции в математической физике*, Наука, М., 1976.
- [10] L. Schwartz, *Ann. Inst. Fourier*, **7** (1957), 1–141; **8** (1958), 1–209.
- [11] A. Grothendieck, *Produits tensoriels topologiques et espaces nucléaires*, Memoirs of the American Mathematical Society, **16**, AMS, Providence, RI, 1955.
- [12] Х. Шефер, *Топологические векторные пространства*, Мир, М., 1971.
- [13] М. Рид, Б. Саймон, *Методы современной математической физики*, т. 3: *Теория рассеяния*, Мир, М., 1982.
- [14] M. Z. Hasan, C. L. Kane, *Rev. Modern Phys.*, **82**:4 (2010), 3045–3067, arXiv: 1002.3895.

Поступила в редакцию 7.12.2013,
после доработки 21.01.2013