Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

М. С. Сметанина, Ю. П. Чубурин, Об уровнях оператора Шредингера для кристаллической пленки с нелокальным потенциалом, *ТМФ*, 2004, том 140, номер 2, 297–302

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf94>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 52.90.164.192

26 апреля 2023 г., 16:51:27

© 2004 г.

М. С. Сметанина*, Ю. П. Чубурин*

ОБ УРОВНЯХ ОПЕРАТОРА ШРЕДИНГЕРА ДЛЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ПЛЕНКИ С НЕЛОКАЛЬНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ

Рассматривается оператор Шредингера для кристаллической пленки, определенный на блоховских по двум переменным функциях в ячейке. Потенциал представляет собой сумму двух малых слагаемых: убывающей по третьей переменной функции и оператора ранга один. Доказано существование двух уровней (собственных значений или резонансов) вблизи $E = 0$ и найдена их асимптотика.

Ключевые слова: оператор Шредингера, периодический потенциал, нелокальный потенциал, собственное значение, резонанс, асимптотика.

1. ВВЕДЕНИЕ

Рассмотрим оператор Шредингера $H = -\Delta + V(x)$, где $x = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$, с периодическим по переменным x_1, x_2 с единичным периодом потенциалом $V(x)$. Операторы такого рода возникают в квантовой теории твердого тела [1]. Как известно (см. [2]), изучение оператора H сводится к изучению семейства операторов $H(k_{\parallel}) = -\Delta + V(x)$ (здесь и далее употребляются обозначения вида $k_{\parallel} = (k_1, k_2)$), определенных на блоховских по переменным x_1, x_2 функциях из $L^2(\Omega)$, где $\Omega = [0, 1]^2 \times \mathbb{R}$ – ячейка, $k_{\parallel} \in \Omega^* = [-\pi, \pi)^2$ – квазиимпульс.

Обычно в физической литературе используются “локальные” потенциалы, т.е. операторы умножения на функцию. Однако потенциалы, которые строятся, например, в теории псевдопотенциала [3], оказываются нелокальными и представляют собой, в том числе для периодического оператора в ячейке, сумму локального потенциала и некоторого конечномерного.

В настоящей работе изучается оператор Шредингера в $L^2(\Omega)$ с нелокальным потенциалом, соответствующим кристаллической пленке, вида $H(k_{\parallel}) = -\Delta + \epsilon W(x) + \lambda V_s$, где $W(x)$ – вещественная функция, удовлетворяющая оценке $|W(x)| \leq C e^{-a|x_3|}$, где C, a – константы, причем $a > 0$ (функции, удовлетворяющие неравенству такого вида, мы

*Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия. E-mail: chuburin@otf.pti.udm.ru

будем называть экспоненциально убывающими по переменной x_3), $V_s = (\cdot, \phi_0)\phi_0$ – одномерный оператор (сепарабельный потенциал); здесь и далее

$$(\psi, \phi_0) = \int_{\Omega} \psi(x) \overline{\phi_0(x)} dx$$

(ψ может не принадлежать $L^2(\Omega)$), а ϕ_0 – бловская по x_1, x_2 и экспоненциально убывающая по x_3 функция; наконец, $\epsilon, \lambda \in \mathbb{R}$ – параметры, которые обычно будут предполагаться малыми.

В настоящей работе получена асимптотика собственных значений и резонансов, те и другие вместе будем называть уровнями оператора $H(k_{\parallel})$. В одномерном случае асимптотика собственного значения для локального потенциала с малым параметром была найдена Саймоном (см. [2]), а для нелокального потенциала достаточно общего вида с малым параметром – Гадильшиным [4]. Аналогичное исследование для трехмерного случая и локального “плечного” потенциала было проведено в работе [5].

В дальнейшем будем использовать обозначения $H_0(k_{\parallel}) = -\Delta$, $H_s(k_{\parallel}) = -\Delta + \lambda V_s$ для операторов и $R_0(k_{\parallel}, E) = (H_0(k_{\parallel}) - E)^{-1}$, $R_s(k_{\parallel}, E) = (H_s(k_{\parallel}) - E)^{-1}$ для их резольвент. Аналогично полагаем $R(k_{\parallel}, E) = (H(k_{\parallel}) - E)^{-1}$. Мы будем пользоваться также обозначениями вида $R_0(x, y, k)$ вместо $R_0(x, y, k_{\parallel}, E)$, где $k = (k_{\parallel}, k_3)$, $k_3 = \sqrt{E - k_{\parallel}^2}$. Через $\sigma(A)$ ($\sigma_{\text{ess}}(A)$) обозначается спектр (существенный спектр) оператора A . Ядро резольвенты оператора, вообще говоря продолженное по параметру E на некоторую риманову поверхность, будем для краткости называть функцией Грина данного оператора.

Для функции Грина G_0 оператора $H_0(k_{\parallel})$ имеют место равенства (см. [6])

$$\begin{aligned} G_0(x, y, k) &= -\frac{e^{i(k, (x_{\parallel} - y_{\parallel}, |x_3 - y_3|))}}{2ik_3} + G_1(x - y, k) = \\ &= -\frac{e^{i(k_{\parallel}, x_{\parallel} - y_{\parallel})}}{2ik_3} + G^{(1)}(x, y, k), \end{aligned} \quad (1)$$

где $G_1(x) \in L^2(\Omega)$, а $G^{(1)}$ обладает тем свойством, что $a(x)G^{(1)}(x, y, k)b(y)$, где $a(x), b(x)$ – произвольные экспоненциально убывающие по переменной x_3 функции, представляет собой $L^2(\Omega \times \Omega)$ -значную аналитическую функцию параметра k_3 в окрестности нуля.

Заметим, что из утверждения об относительно компактных возмущениях [2] легко следует, что $\sigma_{\text{ess}}(H(k_{\parallel})) = \sigma_{\text{ess}}(H_s(k_{\parallel})) = \sigma(H_0(k_{\parallel})) = [k_{\parallel}^2, \infty)$.

Резольвента $R_s(k_{\parallel}, E)$ оператора $H_s(k_{\parallel})$ задается формулой (см. [7], приложение В)

$$R_s(k_{\parallel}, E)\phi = R_0(k_{\parallel}, E)\phi - \lambda \frac{(R_0(k_{\parallel}, E)\phi, \phi_0)}{\lambda(R_0(k_{\parallel}, E)\phi_0, \phi_0) + 1} R_0(k_{\parallel}, E)\phi_0, \quad (2)$$

где $\phi \in L^2(\Omega)$.

Всюду в дальнейшем предполагаем, что ϕ_0 удовлетворяет условию

$$\int_{\Omega} e^{-i(k_{\parallel}, x_{\parallel})} \phi_0(x) dx \neq 0, \quad (3)$$

а решение ψ ищется в классе функций, удовлетворяющих условиям $\sqrt{W}\psi \in L^2(\Omega)$ и $\psi\phi_0 \in L^1(\Omega)$.

В настоящей работе под уровнями будем понимать такие комплексные $k_3 \neq 0$ (а также соответствующие $E = k^2 = k_{\parallel}^2 + k_3^2$), для которых операторнозначная функция $(1 + \epsilon\sqrt{W}R_s(k)\sqrt{W})^{-1}$ (с ядром, продолженным по k_3 в окрестность нуля) имеет полюс по переменной k_3 . В силу аналитической теоремы Фредгольма [8] существование уровня эквивалентно существованию ненулевого решения уравнения

$$\phi = -\epsilon\sqrt{|W|}R_s(k)\sqrt{W}\phi \quad (4)$$

в классе $L^2(\Omega)$, где $\sqrt{W} = \sqrt{|W|} \operatorname{sgn} W$. Нетрудно доказать, что если выполнено (3), то такое понимание уровня эквивалентно обычному [7], с использованием $R_0(k)$ вместо $R_s(k)$.

2. ИССЛЕДОВАНИЕ УРОВНЕЙ

Пусть $\phi(z)$ – вещественная аналитическая функция, определенная в окрестности нуля и переводящая некоторую окрестность нуля в себя. Будем предполагать, что параметры λ и ϵ связаны друг с другом соотношением $\lambda = \phi(\epsilon^{\alpha_0})$, где $\alpha_0 > 0$. Рассмотрим вначале случай $\phi \neq 0$, $\phi(0) = 0$. Разлагая ϕ в ряд Тейлора, получаем $\lambda = A\epsilon^{\alpha} + o(\epsilon^{\alpha})$, где $A = \operatorname{const} \neq 0$, $\alpha > 0$. Для простоты всюду в дальнейшем полагаем $\lambda = A\epsilon^{\alpha}$, хотя все результаты справедливы в общем случае.

Определим операторнозначную функцию $M(k)$ равенством

$$\begin{aligned} M(k)\phi(x) = & - \int_{\Omega} \sqrt{|W(x)|} G^{(1)}(x, y, k) \sqrt{W(y)} \phi(y) dy + \\ & + \frac{\lambda(2ik_3 \int_{\Omega} G_0(x - y, k) \sqrt{W(y)} \phi(y) dy, \phi_0(x))}{\lambda(2ik_3 \int_{\Omega} G_0(x, y, k) \phi_0(y) dy, \phi_0(x)) + 2ik_3} \times \\ & \times \int_{\Omega} \sqrt{|W(x)|} G^{(1)}(x, y, k) \phi_0(y) dy, \end{aligned}$$

где функция $G^{(1)}$ взята из равенства (1).

Функция $M(k)$ является аналитической в окрестности нуля функцией со значениями в множестве компактных операторов. Пусть ϵ настолько мало, что существует обратный оператор $(1 - \epsilon M(k))^{-1}$. Положим

$$\begin{aligned} F(k) = & \frac{1}{2i} \int_{\Omega} \sqrt{W(y)} e^{-i(k_{\parallel}, y_{\parallel})} (1 - \epsilon M(k))^{-1} (\sqrt{|W(y)|} e^{i(k_{\parallel}, y_{\parallel})}) dy - \\ & - \frac{\lambda(2ik_3 \int_{\Omega} G_0(x, y, k) \sqrt{W(y)} (1 - \epsilon M(k))^{-1} (\sqrt{|W(y)|} e^{i(k_{\parallel}, y_{\parallel})}) dy, \phi_0(x))}{\lambda(2ik_3 \int_{\Omega} G_0(x, y, k) \phi_0(y) dy, \phi_0(x)) + 2ik_3} \times \\ & \times \frac{1}{2i} \int_{\Omega} e^{-i(k_{\parallel}, y_{\parallel})} \phi_0(y) dy. \end{aligned}$$

ТЕОРЕМА 1. Пусть ϵ достаточно мало и α в соотношении $\lambda = A\epsilon^\alpha$ целое. Тогда в некоторой окрестности точки $k_3 = 0$ существует только два (возможно, сливающихся) уровня, которые можно разложить в ряды Тейлора по степеням ϵ или $\sqrt{\epsilon}$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Докажем, что условие существования уровня в достаточно малой окрестности точки $k_3 = 0$ равносильно существованию решения уравнения

$$k_3 = \epsilon F(k). \quad (5)$$

Положим $\theta = (1 - \epsilon M(k))\phi$. Используя выражения (1), (2) и эту замену, запишем (4) в следующем виде:

$$\begin{aligned} \theta(x) = & \frac{\epsilon \sqrt{|W(x)|} e^{i(k_{\parallel}, x_{\parallel})}}{2ik_3} \int_{\Omega} e^{-i(k_{\parallel}, y_{\parallel})} \sqrt{W(y)} (1 - \epsilon M(k))^{-1} \theta(y) dy - \\ & - \frac{\lambda \epsilon (2ik_3 \int_{\Omega} G_0(x, y, k) \sqrt{W(y)} (1 - \epsilon M(k))^{-1} \theta(y) dy, \phi_0(x))}{\lambda (2ik_3 \int_{\Omega} G_0(x, y, k) \phi_0(y) dy, \phi_0(x)) + 2ik_3} \times \\ & \times \frac{\sqrt{|W(x)|} e^{i(k_{\parallel}, x_{\parallel})}}{2ik_3} \int_{\Omega} e^{-i(k_{\parallel}, y_{\parallel})} \phi_0(y) dy. \end{aligned}$$

Отсюда следует (5). Пользуясь равенством $\lambda = A\epsilon^\alpha$, представим (5) в виде

$$2ik_3^2 + a(k, \epsilon)k_3 + b(k, \epsilon) = 0, \quad (6)$$

где

$$\begin{aligned} a(k, \epsilon) = & -\epsilon \int_{\Omega} \sqrt{W(y)} e^{-i(k_{\parallel}, y_{\parallel})} (1 - \epsilon M(k))^{-1} (\sqrt{|W(y)|} e^{i(k_{\parallel}, y_{\parallel})}) dy + \\ & + A\epsilon^\alpha \left(2ik_3 \int_{\Omega} G_0(x, y, k) \phi_0(y) dy, \phi_0(x) \right), \\ b(k, \epsilon) = & -A\epsilon^{\alpha+1} \int_{\Omega} \sqrt{W(y)} e^{-i(k_{\parallel}, y_{\parallel})} (1 - \epsilon M(k))^{-1} (\sqrt{|W(y)|} e^{i(k_{\parallel}, y_{\parallel})}) dy \times \\ & \times \left(k_3 \int_{\Omega} G_0(x, y, k) \phi_0(y) dy, \phi_0(x) \right) + \\ & + A\epsilon^{\alpha+1} \left(k_3 \int_{\Omega} G_0(x, y, k) \sqrt{W(y)} (1 - \epsilon M(k))^{-1} \times \right. \\ & \times \left. (\sqrt{|W(y)|} e^{i(k_{\parallel}, y_{\parallel})}) dy, \phi_0(x) \right) \int_{\Omega} e^{-i(k_{\parallel}, y_{\parallel})} \phi_0(y) dy. \end{aligned} \quad (7)$$

Функция в левой части равенства (6) имеет в точке $(0, 0)$ порядок нуля по k_3 , равный двум, и с точностью до умножения на не обращающуюся в нуль функцию является многочленом Вейерштрасса второго порядка по k_3 (см. [9]). Утверждение теоремы вытекает теперь из теоремы о представимости корней многочлена Вейерштрасса в виде ряда Пюизё (см. [2], гл. 1).

ТЕОРЕМА 2. *Предположим, что выполнены, кроме (3), условия вида*

$$\int_{\Omega} W(x) dx \neq 0, \quad \int_{\Omega} W(x) dx + A \left| \int_{\Omega} e^{-i(k_{\parallel}, x_{\parallel})} \phi_0(x) dx \right|^2 \neq 0,$$

а ϵ достаточно мало. Тогда в некоторой окрестности точки $k_3 = 0$ существует ровно два различных уровня $k_3^{(1,2)} = k_3^{(1,2)}(\epsilon)$ оператора $H(k_{\parallel})$, причем:

1) *если $0 < \alpha \leq 1/2$, то*

$$k_3^{(1)} = \frac{A\epsilon^{\alpha}}{2i} \left| \int_{\Omega} e^{-i(k_{\parallel}, y_{\parallel})} \phi_0(y) dy \right|^2 + O(\epsilon^{2\alpha}),$$

$$k_3^{(2)} = O(\epsilon^{2\alpha});$$

2) *если $1/2 < \alpha < 2$, то*

$$k_3^{(1)} = \frac{A\epsilon^{\alpha}}{2i} \left| \int_{\Omega} e^{-i(k_{\parallel}, y_{\parallel})} \phi_0(y) dy \right|^2 + \frac{\epsilon}{2i} \int_{\Omega} W(y) dy + O(\epsilon^{2 \min\{\alpha, 1\}}),$$

$$k_3^{(2)} = O(\epsilon^{2 \min\{\alpha, 1\}});$$

3) *наконец, для $\alpha \geq 2$*

$$k_3^{(1)} = \frac{\epsilon}{2i} \int_{\Omega} W(y) dy + O(\epsilon^2),$$

$$k_3^{(2)} = O(\epsilon^2).$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Имеем согласно (7) следующие соотношения:

$$a(k, \epsilon) = O(\epsilon^{\min\{1, \alpha\}}), \quad \frac{\partial a(k, \epsilon)}{\partial k_3} = O(\epsilon^{\min\{2, \alpha\}}),$$

$$b(k, \epsilon) = O(\epsilon^{\alpha+1}), \quad \frac{\partial b(k, \epsilon)}{\partial k_3} = O(\epsilon^{\alpha+1}),$$

причем константы в неравенствах вида $|O(\epsilon^a)| \leq C|\epsilon|^a$ не зависят от $k_3 \in S$ для достаточно малых r . Разлагая в формулах (7) выражение $(1 - \epsilon M(k))^{-1}$ в ряд по степеням ϵ и пользуясь (1), получаем, полагая $k_0 = (k_{\parallel}, 0)$,

$$a(k_0, \epsilon) = -\epsilon \int_{\Omega} W(y) dy - A\epsilon^{\alpha} \left| \int_{\Omega} e^{-i(k_{\parallel}, y_{\parallel})} \phi_0(y) dy \right|^2 + O(\epsilon^2),$$

$$b(k_0, \epsilon) = \frac{A\epsilon^{\alpha+1}}{2i} \int_{\Omega} W(y) dy \cdot \left| \int_{\Omega} e^{-i(k_{\parallel}, y_{\parallel})} \phi_0(y) dy \right|^2 -$$

$$- \frac{A\epsilon^{\alpha+1}}{2i} \left| \int_{\Omega} e^{-i(k_{\parallel}, y_{\parallel})} \phi_0(y) dy \right|^2 \cdot \int_{\Omega} W(y) dy + O(\epsilon^{\alpha+2}) =$$

$$= O(\epsilon^{\alpha+2}).$$

Перепишем уравнение (6), определяющее уровни, в виде двух уравнений

$$k_3^{(1,2)} = f_{\pm}(k, \epsilon),$$

где функции

$$f_{\pm}(k, \epsilon) = \frac{-a(k, \epsilon) \pm \sqrt{a^2(k, \epsilon) - 8ib(k, \epsilon)}}{4i}$$

рассматриваются в некотором круге $S = \{|k_3| \leq r\}$, где $r > 0$. Для достаточно малого r и всех достаточно малых ϵ функции $f_{\pm}$ переводят S в себя и являются сжимающими отображениями в этом круге. Существование уровней и асимптотические формулы для них вытекают из принципа сжимающих отображений и вида функций $a(k, \epsilon)$ и $b(k, \epsilon)$.

ЗАМЕЧАНИЕ. В случае $\epsilon = 0$ уровень единствен, и его асимптотика соответствует асимптотике уровня $k_3^{(1)}$ в теореме 2. Если, напротив, $\lambda = \text{const} \neq 0$, то для малых $|\epsilon|$ уровней не существует.

Список литературы

- [1] Дж. Займан. Принципы теории твердого тела. М.: Мир, 1974.
- [2] М. Рид, Б. Саймон. Методы современной математической физики. Т. 4. Анализ операторов. М.: Мир, 1982.
- [3] В. Хейне, М. Коэн, Д. Уэйр. Теория псевдопотенциала. М.: Мир, 1973.
- [4] Р. Р. Гадильшин. ТМФ. 2002. Т. 132. С. 97.
- [5] Ю. П. Чубурин. Матем. заметки. 1992. Т. 52. С. 138.
- [6] Ю. П. Чубурин. ТМФ. 1987. Т. 72. С. 120.
- [7] С. Альбеверио, Ф. Гестези, Р. Хёгг-Крон, Х. Хольден. Решаемые модели в квантовой механике. М.: Мир, 1991.
- [8] М. Рид, Б. Саймон. Методы современной математической физики. Т. 1. Функциональный анализ. М.: Мир, 1977.
- [9] Р. Ганнинг, Х. Росси. Аналитические функции многих комплексных переменных. М.: Мир, 1969.

Поступила в редакцию 22.IX.2003 г.,
после доработки 5.I.2004 г.