Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Ю. П. Чубурин, О малых возмущениях оператора Шредингера с периодическим потенциалом, *ТМФ*, 1997, том 110, номер 3, 443–453

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf980>

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: 18.207.199.55

26 апреля 2023 г., 16:47:30

Ю. П. Чубурин*

О МАЛЫХ ВОЗМУЩЕНИЯХ ОПЕРАТОРА ШРЕДИНГЕРА С ПЕРИОДИЧЕСКИМ ПОТЕНЦИАЛОМ

Рассматриваются малые возмущения периодического по переменным x_j , $j = 1, 2, 3$, потенциала функций, периодической по переменным x_1, x_2 и экспоненциально убывающей при $|x_3| \rightarrow \infty$. Показано, что вблизи энергий, отвечающих экстремумам по третьей компоненте квазиимпульса невырожденных собственных значений оператора Шредингера с периодическим потенциалом, рассматриваемого в ячейке, имеется единственное с точностью до множителя решение интегрального уравнения, описывающего как собственные значения, так и резонансные уровни; найдена их асимптотика.

1. ВВЕДЕНИЕ

Пусть $V(x)$, $x = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$, — вещественная периодическая по всем переменным с периодом единица ограниченная функция; $W(x)$ — вещественная периодическая по переменным x_1, x_2 с периодом единица функция, удовлетворяющая неравенству

$$|W(x)| \leq C e^{-a|x_3|}, \quad a > 0. \quad (1)$$

Положим $H_\epsilon = -\Delta + V(x) + \epsilon W(x)$, $\epsilon \in \mathbb{R}$; соответственно $H_0 = -\Delta + V(x)$. Как известно [1–3], изучение оператора Шредингера с периодическим потенциалом сводится с помощью разложения в прямом интеграле пространств к исследованию семейства операторов в ячейке. В рассматриваемом случае имеем семейство операторов

$$H_\epsilon(k_\parallel) = -\Delta + V(x) + \epsilon W(x), \quad (2)$$

определенных на достаточно гладких блоховских по переменным x_1, x_2 функциях из $L^2(\Omega)$, где $\Omega = [0, 1]^2 \times \mathbb{R}$ (ячейка), а блоховские функции представляют собой по определению сужения на Ω функций $\varphi(x)$, $x \in \mathbb{R}^3$, удовлетворяющих свойству

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

здесь $k_\parallel = (k_1, k_2) \in \mathbb{R}^2$ (квазиимпульс); можно считать, что $k_\parallel \in \Omega^* = [-\pi, \pi)^2$. (Операторы вида (2) имеют смысл операторов энергии электрона в ситуации бесконечного кристалла при наличии локального по переменной x_3 возмущения.)

* Физико-технический институт Удмуртского научного центра Уральского отделения РАН

В статье рассматриваются операторы вида (2) с точки зрения появляющихся при малых ϵ собственных значений, а также резонансных уровней. В отличие от имеющихся работ (см., например, [4–8]) изучается, во-первых, нелокальное по переменным x_1, x_2 возмущение и, во-вторых, асимптотика собственных значений (резонансов) исследуется при $\epsilon \rightarrow 0$. Заметим, что такого рода задача для оператора H_ϵ и функции $W(x)$, удовлетворяющей оценке $|W(x)| \leq Ce^{-a|x|}$, $a > 0$, вообще говоря, не имеет смысла; как легко доказать, при $V = 0$ и достаточно малых ϵ нет ни собственных значений (см. [1]), ни резонансов.

Введем в рассмотрение оператор $H_0(k) = -\Delta + V(x)$, определенный на блоховских по всем переменным функциях из $L^2(\Omega_0)$, где $\Omega_0 = [0, 1]^3$; здесь квазиимпульс трехмерен: $k = (k_\parallel, k_3) \in \Omega_0^* = [-\pi, \pi)^3$. Согласно [1] оператор $H_0(k)$ имеет чисто дискретный спектр; через $E_n(k)$ обозначим его собственные значения, расположенные в порядке неубывания с учетом кратности, а через $\psi_n(x, k)$ – отвечающие им линейно независимые при фиксированном k собственные функции такие, что $\|\psi_n\|_{L^2(\Omega_0)} = 1$ ($n = 1, 2, \dots$). Всюду в дальнейшем предполагается, что для любого n как $E_n(k)$, так и $\psi_n(x, k)$ аналитически зависят от k_3 в окрестностях рассматриваемых точек ($\psi_n(x, k)$ как $L^2(\Omega_0)$ -значная функция); это следует из теории возмущений (см. [1]).

Обозначим через $\sigma(A)$ спектр оператора A . Заметим, что $\sigma(H_0(k_\parallel))$ имеет “зонную структуру” (см. [1, 2]), т.е. справедливо равенство

$$\sigma(H_0(k_\parallel)) = \bigcup_{k_3 \in [-\pi, \pi)} \sigma(H_0(k))$$

и спектр $\sigma(H_0(k_\parallel))$ состоит, таким образом, из объединения промежутков (зон). Под лагунами будут пониматься открытые промежутки, составляющие множество $\mathbb{R} \setminus \sigma(H_0(k_\parallel))$.

2. ИССЛЕДОВАНИЕ ФУНКЦИИ ГРИНА

Пусть $E_0 \in \sigma(H_0(k_\parallel))$ совпадает со значением локального экстремума при фиксированном $k_\parallel$ в точке $k_3 = k_3^{(0)}$ некоторого – и только одного – собственного значения $E_{n_0}(k)$. Если, в частности, $V(x)$ является четной функцией аргумента x_3 , то, как легко видеть, $E_n(k)$ – четные функции аргумента k_3 и в точках $k_3^{(0)} = 0, \pm\pi$ всегда имеют экстремум. Будем предполагать, что $E_{n_0}(k_0)$, где $k_0 = (k_\parallel, k_3^{(0)})$, – невырожденное собственное значение, причем

$$\partial^2 E_{n_0}(k_0) / \partial k_3^2 \neq 0. \quad (3)$$

Рассмотрим при фиксированном $k_\parallel$ уравнения $E_n(k) = E_0$ относительно k_3 ; их решения, отличные от $k_3^{(0)}$, обозначим через $k_3^{(j)}$, $j = 1, \dots, N$ (конечность числа таких точек вытекает из аналитичности функций $E_n(k)$ по переменной k_3 и того факта, что у них нет участков постоянства – см. [9, 1]). Положим $k_j = (k_\parallel, k_3^{(j)})$. Обозначим через $E_{n(j, \nu)}(k)$, где $j = 0, 1, \dots, N$, $\nu = 1, \dots, \mu_j$, собственные значения, для которых выполнены равенства $E_{n(j, \nu)}(k_j) = E$; здесь μ_j означает их кратность в точке k_j , при этом $n_0 = n(0, 1)$, $\mu_0 = 1$. Вследствие сделанного предположения

$$\partial E_{n(j, \nu)}(k_j) / \partial k_3 \neq 0, \quad j \neq 0. \quad (4)$$

Заметим, что в силу теоремы о неявной функции [10] существуют решения $k_{j,\nu} = k_{j,\nu}(E) = (k_{\parallel}, k_3^{(j,\nu)}(E))$ уравнений $E_{n(j,\nu)}(k) = E$ ($j = 1, \dots, N; \nu = 1, \dots, \mu_j$), аналитически зависящие от E из некоторой комплексной окрестности точки E_0 ; при этом $k_{j,\nu}(E_0) = k_j$ для всех j, ν .

В силу (3), равенства $\partial E_{n_0}(k_0)/\partial k_3 = 0$ и подготовительной теоремы Вейерштрасса [10] уравнение $E_{n_0}(k) = E$ имеет для E , близких к E_0 , ровно два корня (с учетом кратности) $k_{3,0}^{(1,2)}(E)$. Выразим один корень через другой, вводя обозначение $k_{3,0}^{(2)} - k_{3,0}^{(0)} = \xi(k_{3,0}^{(1)} - k_{3,0}^{(0)})$.

ЛЕММА 1. *Функция $\xi(t)$ является аналитической в окрестности нуля, причем $\xi'(0) = -1$.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. В силу подготовительной теоремы Вейерштрасса имеем (в дальнейшем будем часто опускать для краткости записи зависимость величин от $k_{\parallel}$)

$$\begin{aligned} E_{n_0}(k_3) - E &= a(k_3, E)(k_3 - k_{3,0}^{(1)}(E))(k_3 - k_{3,0}^{(2)}(E)) = \\ &= a(k_3, E)((k_3 - k_{3,0}^{(0)})^2 - p(E)(k_3 - k_{3,0}^{(0)}) + q(E)), \end{aligned} \quad (5)$$

где функции $a(k_3, E)$ и $p(E) = k_{3,0}^{(1)}(E) + k_{3,0}^{(2)}(E) - 2k_{3,0}^{(0)}$, $q(E) = (k_{3,0}^{(1)}(E) - k_{3,0}^{(0)})(k_{3,0}^{(2)}(E) - k_{3,0}^{(0)})$ являются аналитическими в окрестностях точек соответственно $(k_3^{(0)}, E_0)$ и E_0 , при этом $a(k_3^{(0)}, E_0) \neq 0$, $p(E_0) = q(E_0) = 0$. Подставляя разложения функций $a(k_3, E)$ и $E_{n_0}(k_0)$ в ряд Тейлора по степеням $k_3 - k_3^{(0)}$:

$$\begin{aligned} a(k_3, E) &= a(k_3^{(0)}, E) + \frac{\partial a(k_3^{(0)}, E)}{\partial k_3}(k_3 - k_3^{(0)}) + \dots, \\ E_{n_0}(k_3) &= E_0 + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 E_{n_0}(k_3^{(0)})}{\partial k_3^2}(k_3 - k_3^{(0)})^2 + \dots, \end{aligned} \quad (6)$$

в равенство (5), находим

$$E_0 - E = a(k_3^{(0)}, E)q(E). \quad (7)$$

Имеем согласно (6), (3)

$$E_{n_0}(k_3) - E_0 = (k_3 - k_3^{(0)})^2 \varphi(k_3), \quad (8)$$

где $\varphi(k_3)$ — аналитическая функция в окрестности точки $k_3^{(0)}$, причем $\varphi(k_3^{(0)}) \neq 0$. Пользуясь (5), (8) и равенством $E = E_{n_0}(k_{3,0}^{(1)})$, получаем

$$-(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)})^2 \varphi(k_{3,0}^{(1)}) = a(k_3^{(0)}, E_{n_0}(k_{3,0}^{(1)}))(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)})(k_{3,0}^{(2)}(E_{n_0}(k_{3,0}^{(1)})) - k_3^{(0)}),$$

откуда

$$k_{3,0}^{(2)} - k_3^{(0)} = \xi(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)}) = -\frac{(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)})\varphi(k_{3,0}^{(1)})}{a(k_3^{(0)}, E_{n_0}(k_{3,0}^{(1)}))} \quad (9)$$

— аналитическая функция при малых $k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)}$.

Докажем, что $\xi'(0) = -1$. Вследствие (5), (6) имеем

$$a(k_3, E_0)(k_3 - k_3^{(0)})^2 = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E_{n_0}(k_3^{(0)})}{\partial k_3^2} (k_3 - k_3^{(0)})^2 + o((k_3 - k_3^{(0)})^2),$$

откуда

$$a(k_3^{(0)}, E_0) = (1/2) \partial^2 E_{n_0}(k_3^{(0)}) / \partial k_3^2. \quad (10)$$

Далее, в соответствии с (8) и (6) $\varphi(k_3^{(0)}) = (1/2) \partial^2 E_{n_0}(k_3^{(0)}) / \partial k_3^2$. Полученные равенства дают совместно с (9) при $k_{3,0}^{(1)} \rightarrow k_3^{(0)}$ требуемый результат. Лемма доказана.

Обозначим через $\Gamma(x, y, k_{\parallel}, E)$, $\Gamma(x, y, k, E)$ ядра резольвент (функции Грина) операторов $H_0(k_{\parallel})$, $H_0(k)$ в точке E . Имеем (см. [11–13]) для $x, y \in \Omega_0$, $n_3, m_3 \in \mathbb{Z}$

$$\begin{aligned} \Gamma(x + (0, 0, n_3), y + (0, 0, m_3), k_{\parallel}, E + i0) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{ik_3(n_3 - m_3)} \Gamma(x, y, k, E + i0) dk_3 = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{ik_3(n_3 - m_3)} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\psi_n(x, k) \overline{\psi_n(y, k)}}{E_n(k) - E - i0} \right) dk_3. \end{aligned} \quad (11)$$

Вместо переменной E будем также пользоваться переменной $k_{3,0}^{(1)}$, которую можно найти из равенства $E = E_{n_0}(k_{3,0}^{(1)})$. При этом считаем, меняя местами в случае необходимости номера корней $k_{3,0}^{(1,2)}$, что для вещественных E и $k_{3,0}^{(1,2)}$ выполнено неравенство $\partial E_{n_0}(k_{3,0}^{(1)}) / \partial k_3 > 0$ (вследствие леммы 1 корни находятся по разные стороны от $k_3^{(0)}$). Заметим, что при изменении $k_{3,0}^{(1)}$ в комплексной окрестности $k_3^{(0)}$ величина E в силу (6) и условия (3) меняется на двулистной поверхности с точкой разветвления E_0 . Далее используем обозначение вида $\Gamma(x, y, k_{\parallel}, k_{3,0}^{(1)}) = \Gamma(x, y, k_{\parallel}, E_{n_0}(k_{3,0}^{(1)}))$.

ЛЕММА 2. Для $k_{3,0}^{(1)}$ из достаточно малой комплексной окрестности точки $k_3^{(0)}$ имеет место равенство

$$\Gamma(x, y, k_{\parallel}, k_{3,0}^{(1)}) = - \frac{\psi_{n_0}(x, k_0) \overline{\psi_{n_0}(y, k_0)}}{i(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)}) \partial^2 E_{n_0}(k_0) / \partial k_3^2} + \Gamma'(x, y, k_{\parallel}, k_{3,0}^{(1)}), \quad (12)$$

где Γ' обладает тем свойством, что $L^2(\Omega \times \Omega)$ -значная функция

$$\sqrt{|W(x)|} \Gamma'(x, y, k_{\parallel}, k_{3,0}^{(1)}) \sqrt{|W(y)|}, \quad (13)$$

где $\sqrt{|W|} = \sqrt{|W|} \operatorname{sign} W$, является аналитической функцией аргумента $k_{3,0}^{(1)}$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Положим $f(k_3) = \psi_{n_0}(x, k_3) \overline{\psi_{n_0}(y, k_3)}$. Преобразуем, используя (5) и выражая при этом $k_{3,0}^{(2)}$ через $k_{3,0}^{(1)}$ с помощью леммы 1 и формулы Тейлора,

$$\begin{aligned} \frac{f(k_3)}{E_{n_0}(k_3) - E - i0} &= \frac{f(k_3)}{E_{n_0}(k_3) - E_{n_0}(k_{3,0}^{(1)} + i0)} = \\ &= \frac{f(k_3)}{a(k_3, k_{3,0}^{(1)})(k_3 - k_{3,0}^{(1)} - i0)(k_3 + k_{3,0}^{(1)} - 2k_3^{(0)} - 2\alpha(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)}) + i0)^{-1}}, \quad (14) \end{aligned}$$

где $2\alpha(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)}) = O((k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)})^2)$ – аналитическая функция от переменной $k_{3,0}^{(1)}$ в окрестности $k_3^{(0)}$. Выражение (14) равно

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2} \left(\frac{f(k_3)}{a(k_3, k_{3,0}^{(1)})} - \frac{f(k_3^{(0)} + \alpha(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)}))}{a(k_3^{(0)} + \alpha(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)}), k_{3,0}^{(1)})} \right) \frac{1}{k_3 - k_3^{(0)} - \alpha(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)})} \times \\ &\times \left(\frac{1}{k_3 - k_{3,0}^{(1)} - i0} + \frac{1}{k_3 + k_{3,0}^{(1)} - 2k_3^{(0)} - 2\alpha(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)}) + i0} \right) + \\ &+ \frac{f(k_3^{(0)} + \alpha(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)}))}{2a(k_3^{(0)} + \alpha(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)}), k_{3,0}^{(1)})(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)} - \alpha(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)}))} \times \\ &\times \left((k_3 - k_{3,0}^{(1)} - i0)^{-1} - (k_3 + k_{3,0}^{(1)} - 2k_3^{(0)} - 2\alpha(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)}) + i0)^{-1} \right). \quad (15) \end{aligned}$$

Легко видеть, что $L^2(\Omega_0 \times \Omega_0)$ -значная функция

$$F(k_3, k_{3,0}^{(1)}) = \frac{1}{2} \left(\frac{f(k_3)}{a(k_3, k_{3,0}^{(1)})} - \frac{f(k_3^{(0)} + \alpha(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)}))}{a(k_3^{(0)} + \alpha(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)}), k_{3,0}^{(1)})} \right) (k_3 - k_3^{(0)} - \alpha(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)}))^{-1}$$

является аналитической в окрестности точки $(k_3^{(0)}, k_{3,0}^{(0)})$. Далее преобразуем полученное выражение к виду

$$\begin{aligned} &\frac{F(k_3, k_{3,0}^{(1)}) - F(k_{3,0}^{(1)}, k_{3,0}^{(1)})}{k_3 - k_{3,0}^{(1)}} + \frac{F(k_3, k_{3,0}^{(1)}) - F(-k_{3,0}^{(1)} + 2k_3^{(0)} + 2\alpha(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)}), k_{3,0}^{(0)})}{k_3 + k_{3,0}^{(1)} - 2k_3^{(0)} - 2\alpha(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)})} + \\ &+ \frac{F(k_{3,0}^{(1)}, k_{3,0}^{(1)})}{k_3 - k_{3,0}^{(1)} - i0} + \frac{F(-k_{3,0}^{(1)} + 2k_3^{(0)} + 2\alpha(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)}), k_{3,0}^{(1)})}{k_3 + k_{3,0}^{(1)} - 2k_3^{(0)} - 2\alpha(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)}) + i0} + \\ &+ \frac{g(k_{3,0}^{(1)}) - g(k_3^{(0)})}{2(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)})} \left(\frac{1}{k_3 - k_{3,0}^{(1)} - i0} - \frac{1}{k_3 + k_{3,0}^{(1)} - 2k_3^{(0)} - 2\alpha(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)}) + i0} \right) + \\ &+ \frac{g(k_3^{(0)})}{2(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)})} \left(\frac{1}{k_3 - k_{3,0}^{(1)} - i0} - \frac{1}{k_3 + k_{3,0}^{(1)} - 2k_3^{(0)} - 2\alpha(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)}) + i0} \right), \quad (16) \end{aligned}$$

где

$$g(k_{3,0}^{(1)}) = \frac{f(k_3^{(0)} + \alpha(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)}))}{a(k_3^{(0)} + \alpha(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)}), k_{3,0}^{(1)})(1 - (\alpha(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)})/k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)}))} \quad (17)$$

— аналитическая функция в окрестности точки $k_3^{(0)}$ (см. лемму 1). Введем обозначения

$$\begin{aligned}\mu(k_{3,0}^{(1)}) &= F(k_{3,0}^{(1)}, k_{3,0}^{(1)}) + \frac{g(k_{3,0}^{(1)}) - g(k_3^{(0)})}{2(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)})}, \\ \nu(k_{3,0}^{(1)}) &= F(-k_{3,0}^{(1)} + 2k_3^{(0)} - 2\alpha(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)}), k_{3,0}^{(1)}) - \frac{g(k_{3,0}^{(1)}) - g(k_3^{(0)})}{2(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)})}.\end{aligned}\quad (18)$$

Это аналитические функции в окрестности $k_3^{(0)}$. Заметим далее, что из (17) и (10) вытекает равенство

$$g(k_3^{(0)}) = \frac{2\psi_{n_0}(x, k_0)\overline{\psi_{n_0}(y, k)}}{\partial^2 E_{n_0}(k_0)/\partial k_3^2}. \quad (19)$$

Из вида функции $\Gamma(x, y, k, E+i0) = \Gamma(x, y, k, k_{3,0}^{(1)}+i0)$ (см. (11)), соотношений (14)–(19) и условия (4) вытекает (ср. [13]), что выражение

$$\begin{aligned}&\Gamma(x, y, k, k_3^{(1)}) + \frac{\psi_{n_0}(x, k_0)\overline{\psi_{n_0}(y, k_0)}}{i(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)})\partial^2 E_{n_0}(k_0)/\partial k_3^2} \times \\&\times \left(\frac{1}{1 - \exp(i(-(k_3 - k_{3,0}^{(1)}) + i0))} + \right. \\&\quad \left. + \frac{1}{1 - \exp(i(k_3 + k_{3,0}^{(1)} - 2k_3^{(0)} - 2\alpha(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)}) + i0))} \right) + \\&+ \frac{\mu(k_{3,0}^{(1)})}{i\left(1 - \exp(i(-(k_3 - k_{3,0}^{(1)}) + i0))\right)} - \\&- \frac{\nu(k_{3,0}^{(1)})}{i\left(1 - \exp(i(k_3 + k_{3,0}^{(1)} - 2k_3^{(0)} - 2\alpha(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)}) + i0))\right)} + \\&+ \sum_{j=1}^N \sum_{\nu=1}^{\mu_j} \frac{\psi_{n(j,\nu)}(x, k_{j,\nu})\overline{\psi_{n(j,\nu)}(y, k_{j,\nu})}}{i(\sigma_{j,\nu}\partial E_{n(j,\nu)}(k_{j,\nu})/\partial k_3)\left(1 - \exp(i(-\sigma_{j,\nu}(k_3 - k_3^{(j,\nu)}) + i0))\right)},\end{aligned}$$

где $\sigma_{j,\nu} = \text{sign}(\partial E_{n(j,\nu)}(k_{j,\nu})/\partial k_3)$, представляет собой аналитическую функцию со значениями в $L^2(\Omega_0 \times \Omega_0)$ переменных k_3 и $k_3^{(1)}$ (из окрестности точки $k_3^{(0)}$). Отсюда

для $x, y \in \Omega_0$, $n_3, m_3 \in \mathbb{Z}$ с использованием формулы (11) получим

$$\begin{aligned}
& \Gamma(x + (0, 0, n_3), y + (0, 0, m_3), k_{\parallel}, k_{3,0}^{(1)}) = \\
& = -\frac{\psi_{n_0}(x, k_0) \overline{\psi_{n_0}(y, k_0)}}{i(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)}) \partial^2 E_{n_0}(k_0) / \partial k_3^2} \left(\Theta(n_3 - m_3) \exp(i(n_3 - m_3)k_{3,0}^{(1)}) + \right. \\
& + \Theta(m_3 - n_3) \exp\left(i(m_3 - n_3)(k_{3,0}^{(1)} - 2k_3^{(0)} - 2\alpha(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)}))\right) + \\
& + i\mu(k_{3,0}^{(1)}) \Theta(n_3 - m_3) \exp(i(n_3 - m_3)k_{3,0}^{(1)}) - i\nu(k_{3,0}^{(1)}) \Theta(m_3 - n_3) \times \\
& \times \exp\left(i(m_3 - n_3)(k_{3,0}^{(1)} - 2k_3^{(0)} - 2\alpha(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)}))\right) \Big) + \\
& + \sum_{j=1}^N \left(- \sum_{(j,\nu): \sigma_{j,\nu} > 0} \frac{\psi_{n(j,\nu)}(x, k_{j,\nu}) \overline{\psi_{n(j,\nu)}(y, k_{j,\nu})}}{i \partial E_{n(j,\nu)}(k_{j,\nu}) / \partial k_3} \Theta(n_3 - m_3) \exp(i(n_3 - m_3)k_3^{(j,\nu)}) + \right. \\
& + \sum_{(j,\nu): \sigma_{j,\nu} < 0} \frac{\psi_{n(j,\nu)}(x, k_{j,\nu}) \overline{\psi_{n(j,\nu)}(y, k_{j,\nu})}}{i \partial E_{n(j,\nu)}(k_{j,\nu}) / \partial k_3} \Theta(m_3 - n_3) \exp(i(n_3 - m_3)k_3^{(j,\nu)}) \Big) + \\
& + \gamma_{n_3, m_3}(x, y, k_{\parallel}, k_{3,0}^{(1)}), \tag{20}
\end{aligned}$$

здесь $\Theta(t)$ — функции Хевисайда, а функция γ_{n_3, m_3} аналитически зависит от $k_{3,0}^{(1)}$ и удовлетворяет оценке вида

$$\|\gamma_{n_3, m_3}\|_{L^2(\Omega_0 \times \Omega_0)} \leq C e^{-\alpha|n_3 - m_3|}, \quad \alpha, C > 0, \tag{21}$$

причем константы C, α не зависят от $k_{3,0}^{(1)}$ из некоторой окрестности точки $k_3^{(0)}$. Соотношения (20), (21) доказывают лемму.

3. ИССЛЕДОВАНИЕ ОСНОВНОГО УРАВНЕНИЯ

Пусть $E \in \mathbb{R} \setminus \{E_0\}$ находится в окрестности точки E_0 . Наряду с (20) будем использовать также равенство (ср. [13])

$$\begin{aligned}
& \Gamma(x + (0, 0, n_3), y + (0, 0, m_3), k_{\parallel}, E + i0) = \\
& = - \sum_{j=0}^N \sum_{\nu=1}^{\mu_j} \frac{\psi_{n(j,\nu)}(x + (0, 0, n_3), k_{j,\nu}) \overline{\psi_{n(j,\nu)}(y + (0, 0, m_3), k_{j,\nu})}}{i |\partial E_{n(j,\nu)}(k_{j,\nu}) / \partial k_3|} \times \\
& \times \Theta(\sigma_{j,\nu}(n_3 - m_3)) + \gamma_{n_3, m_3}(x, y, k_{\parallel}, E) \tag{22}
\end{aligned}$$

(равномерности оценки (21) по E здесь нет).

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 1. *Существенный спектр оператора $H_\epsilon(k_{\parallel})$ совпадает с $\sigma(H_0(k_{\parallel}))$.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Для $E \in \mathbb{R} \setminus \sigma(H_0(k_{\parallel}))$ сумма по j, ν в (22) отсутствует, и в силу (21)

$$W(x)\Gamma(x, y, k_{\parallel}, E) \in L^2(\Omega \times \Omega).$$

Отсюда вытекает компактность оператора с данным ядром, что означает относительную компактность возмущения W по отношению к оператору $H_0(k_{\parallel})$ и, следовательно, требуемое утверждение (см. [1]).

Легко видеть, что всякое блоховское по переменным x_1, x_2 ограниченное решение ψ уравнения Шредингера

$$(-\Delta + V(x) + \epsilon W(x))\psi = E\psi$$

удовлетворяет интегральному уравнению

$$\psi(x) = \psi_0(x) - \epsilon \int_{\Omega} \Gamma(x, y, k_{\parallel}, E + i0) W(y) \psi(y) dy, \quad (23)$$

где $\psi_0(x)$ – некоторое ограниченное блоховское по переменным x_1, x_2 решение уравнения $(-\Delta + V(x))\psi_0 = E\psi_0$; верно и обратное. Докажем, что если при этом $\psi \in L^2(\Omega)$, то $\psi_0 = 0$. Используя (21), (22), (23), ограниченность функций $\psi_{n(j, \nu)}$, ψ и условие (1), нетрудно получить соотношение (см. близкие рассуждения в [13])

$$\psi(x) = \sum_{j=0}^N \sum_{\nu=1}^{\mu_j} A_{j, \nu}^{\pm} \psi_{n(j, \nu)}(x, k_{j, \nu}) + \eta(x), \quad (24)$$

где $A_{j, \nu}^{\pm} = \text{const}$, знаки у данных величин означают знак x_3 , а функция η удовлетворяет оценке

$$\|\eta(x + (0, 0, n_3))\|_{L^2(\Omega_0)} \leq C e^{-a|n_3|}, \quad n_3 \in \mathbb{Z}, \quad (25)$$

где $a > 0$. Пусть для определенности $x_3 > 0$. Применим к обеим частям (24) преобразование вида [14]

$$\varphi(x) \mapsto \sum_{n_3=0}^{\infty} e^{-in_3 k_3} \varphi(x + (0, 0, n_3)) \Big|_{\Omega_0 \times (-\pi, \pi)} = \hat{\varphi}(x_3, k_3) = \hat{\varphi}(x, k_3 - i0).$$

Заметим, что если функция φ ограничена, то $\hat{\varphi}$ является $L^2(\Omega_0)$ -значной обобщенной функцией аргумента k_3 . Так как

$$\psi, \eta \in L^2((0, 1)^2 \times (0, \infty)),$$

то

$$\hat{\psi}, \hat{\eta} \in L^2((0, 1)^3 \times (-\pi, \pi))$$

в силу равенства Парсеваля. Имеем

$$\hat{\psi}(x, k_3) - \hat{\eta}(x, k_3) = \sum_{j=0}^N \sum_{\nu=1}^{\mu_j} A_{j, \nu}^+ \psi_{n(j, \nu)}(x, k_{j, \nu}) \left(1 - \exp(-i(k_3 - k_3^{(j, \nu)} - i0))\right)^{-1}.$$

Для почти всех x данное выражение принадлежит $L^2(-\pi, \pi)$, откуда $A_{j,\nu}^+ = 0$ для всех j, ν . Аналогично и $A_{j,\nu}^- = 0$ для всех j, ν . Утверждение следует теперь из (24).

Пусть обратно уравнение (23) имеет ненулевое блоховское решение ψ для $\psi_0 = 0$. Принадлежность $\psi \in L^2(\Omega)$ можно доказать для случая $V = 0$; это проделывается с помощью формулы Грина, применяемой в области Ω и с учетом плосковолновой асимптотики функции ψ (см. [15]): коэффициенты при плоских волнах обязаны быть равными нулю вследствие полученного таким способом аналога формулы сохранения потока. Другой случай включения $\psi \in L^2(\Omega)$ описывает ниже следствие 1 теоремы 1.

Рассмотрим уравнение

$$\psi(x) = -\epsilon \int_{\Omega} \Gamma(x, y, k_{\parallel}, E) W(y) \psi(y) dy \quad (26)$$

для комплексных $E \neq E_0$, близких к E_0 (точке ветвления функции Γ по переменной E). Подквазистационарными состояниями будут пониматься решения $\psi \neq 0$ уравнения (26), которые отвечают E (“резонансному уровню”), находящемуся на втором листе и такому, что $\text{Im } E < 0$. Это мотивируется отсутствием в уравнении (26) “налетающей волны”, а также экспоненциальным возрастанием ψ (последнее вытекает из экспоненциального возрастания блоховских функций $\psi_{n(j,\nu)}$ при комплексных $k_3^{(j,\nu)}$ и соотношения (22) с $E - i\epsilon$ вместо $E + i0$) (ср. [16–18]). Вследствие сказанного выше уравнение (26) описывает также для $E \in \mathbb{R}$ собственные значения и собственные функции оператора $H(k_{\parallel})$.

В уравнении (26) перейдем к величинам $\varphi = \sqrt{|W|} \psi$ вместо ψ (см. [1]) и $k_{3,0}^{(1)}$ вместо E , в результате чего оно примет вид

$$\varphi(x) = -\epsilon \int_{\Omega} \sqrt{|W(x)|} \Gamma(x, y, k_{\parallel}, k_{3,0}^{(1)}) \sqrt{W(y)} \varphi(y) dy. \quad (27)$$

Данное уравнение будем рассматривать в классе $\varphi \in L^2(\Omega)$. В силу (1) этот класс достаточно широк, позволяя при малых $|\text{Im } E|$ охватить квазистационарные состояния. Вследствие леммы 2 ядро интегрального оператора в правой части (27) аналитически зависит от $k_{3,0}^{(1)} \neq k_3^{(0)}$ в окрестности $k_3^{(0)}$ как $L^2(\Omega \times \Omega)$ -значная функция. Заметим, что при $\epsilon \rightarrow 0$ как резонансные, так и собственные уровни (в соответствии с мероморфной теоремой Фредгольма [1] число тех и других в окрестности $k_3^{(0)}$ конечно) стремятся к E_0 . Действительно, для фиксированного E (соответственно $k_{3,0}^{(1)}$) при достаточно малых ϵ норма оператора в правой части (27) меньше единицы и ненулевых решений уравнения (27) не существует.

ТЕОРЕМА 1. *Предположим, что*

$$W_0 = \int_{\Omega} |\psi_{n_0}(x, k_0)|^2 W(x) dx \neq 0. \quad (28)$$

Тогда для $k_{3,0}^{(1)}$ из малой окрестности $k_3^{(0)}$ и всех достаточно малых $\epsilon \in \mathbb{R}$ существует ровно одно (с точностью до числового множителя) ненулевое решение в

$L^2(\Omega)$ уравнения (27). Для соответствующего значения $E = E(k_{3,0}^{(1)})$ справедлива формула

$$E = E_0 - \frac{\epsilon^2 W_0^2}{2\partial^2 E_{n_0}(k_0)/\partial k_3^2} + O(\epsilon^3); \quad (29)$$

при этом E аналитически зависит от ϵ из окрестности нуля и от $\tilde{k}_{\parallel}$ из некоторой окрестности $k_{\parallel}$; в оценке $|O(\epsilon^3)| \leq C|\epsilon|^3$ константу C можно считать не зависящей от $\tilde{k}_{\parallel}$ из окрестности $k_{\parallel}$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. В силу леммы 2 уравнение (27) можно записать в виде

$$\varphi(x) = \frac{\epsilon \sqrt{|W(x)|} \psi_{n_0}(x, k_0)}{i(k_{3,0}^{(1)} - k_3^{(0)})\partial^2 E_{n_0}(k_3^{(0)})/\partial k_3^2} \int_{\Omega} \overline{\psi_{n_0}(y, k_0)} \sqrt{W(y)} \varphi(y) dy + \epsilon K(k_{\parallel}, k_{3,0}^{(1)})\varphi,$$

где $K(k_{\parallel}, k_{3,0}^{(1)})$ — оператор с ядром (13). Дальнейшее доказательство вполне аналогично рассуждениям в более простой ситуации [19].

СЛЕДСТВИЕ 1. Пусть E_0 представляет собой границу зоны, уровень E веществен. Тогда E есть собственное значение оператора $H_{\epsilon}(k_{\parallel})$ кратности единица, находящееся в лакуне.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Пусть для определенности E_0 — минимальная точка зоны, тогда $\partial^2 E_{n_0}(k_0)/\partial k_3^2 > 0$, откуда $E < E_0$ для малых ϵ . При этом согласно [20] $E \in \sigma(H_{\epsilon}(k_{\parallel}))$, поскольку для данного E существует ограниченное нетривиальное решение уравнения (26) (ограниченность вытекает из неравенства Коши–Буняковского с учетом принадлежности $\sqrt{|W|}\psi \in L^2(\Omega)$ и ограниченности нормы $\sqrt{|W(x)|}\Gamma(x, y, k_{\parallel}, E)$ в $L^2(\Omega \times \Omega)$ — см. доказательство предложения 1). В силу предложения 1 E — изолированное собственное значение конечной кратности, но кратность равна единице вследствие теоремы.

СЛЕДСТВИЕ 2. Имеет место равенство $\text{Im } E = O(\epsilon^3)$.

ЗАМЕЧАНИЕ 1. Уточнить порядок $\text{Im } E$ по следующему члену разложения в (29) не представляется возможным даже в случае $V = 0$ (см. [19]).

ЗАМЕЧАНИЕ 2. Полученные результаты и их доказательства с очевидными упрощениями переносятся на одномерный случай малых экспоненциально убывающих возмущений периодического потенциала $V(x)$, $x \in \mathbb{R}$ (при этом речь может идти согласно [1] лишь о границах зон).

Список литературы

- [1] *М. Рид, Б. Саймон.* Методы современной математической физики. Т. 4. М.: Мир, 1982.
- [2] *М. М. Скриганов.* Геометрические и арифметические методы в спектральной теории многомерных периодических операторов. В кн.: Тр. Матем. ин-та АН СССР. Т. 171. Л.: Наука, 1985.
- [3] *E. B. Davies.* Proc. Cambridge Philos. Soc. 1977. V. 82. P. 327.
- [4] *Н. Е. Фурсова.* Матем. заметки. 1984. Т. 36. № 5. С. 711.
- [5] *М. Ш. Бирман.* Функц. анализ и его прилож. 1991. Т. 25. № 2. С. 89.
- [6] *А. В. Соболев.* Функц. анализ и его прилож. 1991. Т. 25. № 2. С. 93.
- [7] *M. Dimassi.* Ann. Inst. Henri Poincaré. Phys. theor. 1994. V. 61. № 2. P. 189.
- [8] *F. Klopp.* Ark. mat. 1994. V. 32. № 2. P. 323.
- [9] *L. E. Thomas.* Commun. Math. Phys. 1973. V. 33. P. 335.
- [10] *Р. Ганнинг, Х. Росси.* Аналитические функции многих комплексных переменных. М.: Мир, 1969.
- [11] *В. В. Дякин.* Аналитическое исследование общих свойств зонных спектров твердых тел: Дис. докт. физ.-мат. наук. Свердловск: ИФМ УНЦ АН СССР, 1984.
- [12] *Ю. П. Чубурин.* О спектре оператора Шредингера в случае полуграниченного кристалла. Деп. в ВИНТИ № 7614-В. М.: ВИНТИ, 1985.
- [13] *Ю. П. Чубурин.* ТМФ. 1994. Т. 98. № 1. С. 38.
- [14] *Ю. П. Чубурин.* ТМФ. 1988. Т. 77. № 3. С. 472.
- [15] *Ю. П. Чубурин.* ТМФ. 1987. Т. 72. № 1. С. 120.
- [16] *А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов.* Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука, 1966.
- [17] *Т. М. Гатауллин, М. В. Карасев.* ТМФ. 1971. Т. 9. № 2. С. 252.
- [18] *С. Альбеверьо, Ф. Гестези, Р. Хезг-Крон, Х. Хольден.* Решаемые модели в квантовой механике. М.: Мир, 1991.
- [19] *Ю. П. Чубурин.* Матем. заметки. 1992. Т. 52. № 2. С. 138.
- [20] *Х. Цикон, Р. Фрёзе, В. Кири, Б. Саймон.* Операторы Шрёдингера с приложениями к квантовой механике и глобальной геометрии. М.: Мир, 1990.

Поступила в редакцию 14.X.1996 г.

Yu. P. Chuburin

ON SMALL PERTURBATIONS OF THE SCHRÖDINGER EQUATION WITH PERIODIC POTENTIAL

We consider small perturbations of the potential periodic in variables x_j , $j = 1, 2, 3$, by a function which is periodic in x_1, x_2 and exponentially decreases as $|x_3| \rightarrow \infty$. We prove that close to energies corresponding to the extrema in the third component of the quasy-momentum of nondegenerate eigenvalues of the Schrodinger operator with periodic potential considered in the cell there exists a unique (up to multiplicative factor) solution of the integral equation describing both eigenvalues and resonance levels. The asymptotic behaviour of the latter quantities is described.