На правах рукописи

Тинюкова Татьяна Сергеевна

ИССЛЕДОВАНИЕ РАЗНОСТНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА ДЛЯ НЕКОТОРЫХ ФИЗИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

01.01.02 — дифференциальные уравнения, динамические системы и оптимальное управление

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Ижевск — 2013

Работа выполнена на кафедре математического анализа
ГОУВПО «Удмуртский государственный университет».

Научный руководитель	—	доктор физико-математических наук, профессор Ю. П. Чубурин
Официальные оппоненты	—	доктор физико-математических наук, профессор Ю. П. Вирченко кандидат физико-математических наук, доцент В. А. Зайцев
Ведущая организация	—	Башкирский государственный университет

Защита состоится 16 октября 2013 г. в 16.00 ч. на заседании диссертационного совета (Д 212.015.08) по присуждению ученой степени кандидата физико-математических наук в НИУ «БелГУ», по адресу: 308007, г. Белгород, ул. Студенческая, д. 14, корпус 1, ауд. 407.

С диссертацией можно ознакомится в библиотеке НИУ «БелГУ».

Автореферат разослан   сентября 2013 г.

Учёный секретарь
диссертационного совета,
кандидат физ.-мат. наук   С. А. Гриценко

Общая характеристика работы

Актуальность темы. Важность математического исследования уравнения Шредингера в разностном подходе (или в приближении сильной связи) объясняется, во-первых, значительно возросшей в последние 20-30 лет популярностью такого подхода в физической литературе, относящейся к наноразмерным устройствам - основе будущей микроэлектроники (см., например, работы [1–4]). (Заметим, что классическая теория рассеяния для уравнения Шредингера, основанная на интегральном (матричном) уравнении Липпмана–Швингера, в настоящее время особенно актуальна для данных физических приложений, поскольку вероятность прохождения оказывается пропорциональной электронной проводимости в квантовой проволоке (см., например, [5]). Во-вторых, это связано с тем, что, несмотря на физическую актуальность, математических работ, исследующих данные модели, сравнительно немного и относятся они, как правило, к решеткам $\mathbb{Z}^d$, $d \geqslant 1$ (см., например, работы [6–11]). Между тем, математические модели в этой области даже в одномерном случае (на графе) имеют достаточно интересные и необычные свойства.

Объект и предмет исследования. Объектом исследования является разностное уравнение Шредингера с потенциалами, описывающими электрон в квантовых проволоках, в квантовом волноводе и в периодической слоистой структуре. Предмет исследования — спектральные свойства и задача рассеяния для данного оператора Шредингера.

Методы исследования. В работе используются методы разностных уравнений функционального анализа и спектральной теории операторов, а также теории функций нескольких комплексных переменных.

Научная новизна. В диссертации получены следующие новые научные результаты:

1) доказаны теоремы существования и единственности квази-

уровней (т. е. собственных значений и резонансов) разностного оператора Шредингера, отвечающего пересечению квантовых проволок, исследовано асимптотическое поведение квазиуровней;

2) найдены вероятности распространения квантовой частицы в возможных направлениях для данного оператора, получены условия полного отражения (прохождения);

3) доказаны теоремы существования и единственности квазиуровней двумерного разностного оператора Шредингера, отвечающего квантовому волноводу, исследована асимптотика квазиуровней;

4) найдены вероятности отражения (прохождения) для данного оператора в случае малого потенциала и медленных квантовых частиц;

5) найдены вероятности прохождения и отражения для разностного оператора Шредингера в периодической слоистой структуре в случае малого потенциала и малой перпендикулярной составляющей угла падения частицы на потенциальный барьер.

Практическая и теоретическая ценность. Работа носит теоретический характер. Полученные результаты могут найти применение в квантовой теории твердого тела.

Апробация диссертации. Материалы диссертации докладывались и обсуждались:

– на Ижевском городском математическом семинаре по дифференциальным уравнениям и теории оптимального управления под руководством профессора Е. Л. Тонкова (2009 г.);

– на Воронежской весенней математической школе "Понтрягинские чтения - XX" (2009 г.), "Понтрягинские чтения - XXI" (2010 г.);

Публикации. Основные результаты диссертации отражены в 9 публикациях, список которых приведен в конце автореферата.

Структура и объем работы. Диссертация объемом 119 страниц состоит из введения, трех глав, разбитых на параграфы, и библиографического списка, состоящего из 44 наименований.

Основное содержание работы

Во введении приведен краткий обзор основных результатов в исследовании разностного уравнения Шредингера с потенциалами, описывающими электрон в квантовых проволоках, в квантовом волноводе и в периодической слоистой структуре. Отмечены работы близкие по содержанию к теме диссертации. Обосновывается актуальность темы исследования, пояснена ее научная ценность. Дан краткий обзор содержания работы по главам.

Обозначим через $\mathcal{G}$ объединение двух «целочисленных» координатных прямых, то есть

$$\mathcal{G} = (\mathbb{Z} \times \{0\}) \cup (\{0\} \times \mathbb{Z}),$$

а через $l^2(X)$, где $X \subset \mathbb{Z}^2$ — гильбертово пространство квадратично суммируемых функций на X со скалярным произведением

$$(\varphi, \psi)_{l^2(X)} = \sum_{(n,m)\in X} \varphi(n,m)\overline{\psi(n,m)}.$$

В первой главе диссертации рассматривается разностный (дискретный) оператор Шредингера $\mathcal{H}_0$, действующий в $l^2(\mathcal{G})$ следующим образом:

$$\begin{aligned}
(\mathcal{H}_0\psi)(0,0) &= \psi(1,0) + \psi(-1,0) + \psi(0,1) + \psi(0,-1), \\
(\mathcal{H}_0\psi)(n,0) &= \psi(n+1,0) + \psi(n-1,0), \quad n \neq 0, \\
(\mathcal{H}_0\psi)(0,m) &= \psi(0,m+1) + \psi(0,m-1), \quad m \neq 0.
\end{aligned} \tag{1}$$

Оператор $\mathcal{H}_0$ является гамильтонианом (оператором энергии) электрона вблизи пересечения двух одномерных квантовых проволок. Уравнение Шредингера рассмотрено для двух различных классов убывающих на бесконечности потенциалов, при этом изучаются спектр и вероятности прохождения квантовой частицы в возможных направлениях движения.

Перечислим основные результаты первой главы.

Найден вид $\mathcal{R}_0(\lambda)$ (резольвенты оператора $\mathcal{H}_0$), исследованы существенный и дискретный спектры оператора $\mathcal{H}_0$.

Теорема 1. *Существенный спектр оператора $\mathcal{H}_0$ совпадает с отрезком* $[-2, 2]$.

Введем в рассмотрение оператор $H_{01} : l^2(\mathbb{Z}) \to l^2(\mathbb{Z})$, действующий по правилу

$$\big(H_{01}\varphi\big)(n) = \varphi(n-1) + \varphi(n+1), \quad n \in \mathbb{Z}.$$

Ядро резольвенты $R_{01}(\lambda) = (H_{01} - \lambda)^{-1}$ оператора H_{01}, вообще говоря, продолженное по параметру λ на соответствующую риманову поверхность M, будем называть функцией Грина оператора H_{01} и обозначать

$$G_{01}(\lambda, n-m) = -\frac{1}{\sqrt{\lambda^2 - 4}}\left(\frac{\lambda - \sqrt{\lambda^2 - 4}}{2}\right)^{|n-m|}.$$

Поверхность M получена склейкой двух экземпляров комплексной плоскости вдоль интервала $(-2, 2)$.

Рассмотрим оператор Шредингера $\mathcal{H}_\varepsilon = \mathcal{H}_0 + \varepsilon\mathcal{V}$ с малым параметром $\varepsilon > 0$; здесь $\mathcal{V}$ — оператор умножения на вещественную функцию $\mathcal{V}(n, m) \neq 0$ (потенциал), удовлетворяющую условиям

$$|\mathcal{V}(n, 0)| \leqslant \beta e^{-\alpha|n|}, \quad |\mathcal{V}(0, m)| \leqslant \beta e^{-\alpha|m|}, \quad n, m \in \mathbb{Z}, \quad \alpha, \beta > 0, \qquad (2)$$

$\mathcal{V}$ описывает влияние примесей. Оператор $\mathcal{H}_\varepsilon$ является гамильтонианом электрона вблизи пересечения двух квантовых проволок.

Уравнение Шредингера для оператора $\mathcal{H}_\varepsilon$ имеет вид

$$(\mathcal{H}_0 + \varepsilon\mathcal{V})\psi = \lambda\psi. \qquad (3)$$

Спектр и существенный спектр оператора A обозначим $\sigma(A)$ и $\sigma_{ess}(A)$ соответственно.

Уравнение (3), рассматриваемое в классе $l^2(\mathcal{G})$, для $\lambda \notin \sigma(\mathcal{H}_0)$ можно записать в виде

$$\psi = -\mathcal{R}_0(\lambda)\mathcal{V}\psi. \tag{4}$$

Перейдем к новой неизвестной функции $\varphi = \sqrt{|\mathcal{V}|}\psi$ и положим $\sqrt{\mathcal{V}} = \sqrt{|\mathcal{V}|}\mathrm{sgn}\mathcal{V}$ (только для $\mathcal{V}$). Тогда уравнение (4) можно переписать в виде

$$\varphi = -\sqrt{|\mathcal{V}|}\mathcal{R}_0(\lambda)\sqrt{\mathcal{V}}\varphi \tag{5}$$

и, продолжая оператор $-\sqrt{|\mathcal{V}|}\mathcal{R}_0(\lambda)\sqrt{\mathcal{V}}$ на двулистную риманову поверхность M функции Грина оператора $\mathcal{H}_0$ (ядра резольвенты $\mathcal{R}_0(\lambda)$) (см. ниже), рассматривать его как оператор в $l^2(\mathcal{G})$ для $\lambda \in M$.

Определение 1. (см. [12]) Число λ, принадлежащее второму (так называемому «нефизическому») листу римановой поверхности M, будем называть *резонансом* оператора $\mathcal{H}_\varepsilon$, если существует ненулевое решение $\varphi \in l^2(\mathcal{G})$ уравнения (5).

Определение 2. *Квазиуровнем* оператора $\mathcal{H}_\varepsilon$ будем называть его собственное значение или резонанс. В случае, когда λ принадлежит второму листу римановой поверхности M, ненулевые решения ψ уравнения (4) (соответствующие решению уравнения (5) $\varphi \in l^2(\mathcal{G})$), вообще говоря, экспоненциально возрастают.

Найден критерий существования квазиуровня оператора $\mathcal{H}_\varepsilon$. Исследовано наличие квазиуровней в окрестности нуля для оператора $\mathcal{H}_\varepsilon$.

Для произвольной функции $\varphi(n,m)$, определенной на $\mathcal{G}$, будем пользоваться обозначениями

$$f(\varphi) = f(\lambda,\varphi) = \left(R_{01}(\lambda)\varphi\right)(1) + \left(R_{01}(\lambda)\varphi\right)(-1),$$

$$\varphi_1(n) = \varphi(n,0), \qquad \varphi_2(m) = \varphi(0,m), \qquad n,m \in \mathbb{Z}.$$

Теорема 2. *Оператор $\mathcal{H}_\varepsilon$ для всех достаточно малых ε не имеет ненулевых квазиуровней в окрестности нуля.*

Доказаны существование и единственность решения модифицированного уравнения Липпмана–Швингера

$$\begin{cases} \varphi_1(n,\lambda) = \sqrt{|\mathcal{V}_1|}e^{ikn} - \varepsilon\sqrt{|\mathcal{V}_1|}R_{01}(\lambda)\sqrt{\mathcal{V}_1}\varphi_1(n,\lambda) + \sqrt{|\mathcal{V}_1|} \times \\ \times \dfrac{2\cos k \cdot f(\delta) + \varepsilon f(\sqrt{\mathcal{V}_2}\varphi_2) - \varepsilon f(\sqrt{\mathcal{V}_1}\varphi_1)f(\delta)}{1-f^2(\delta)} R_{01}(\lambda)\delta(n), n \in \mathbb{Z}, \\ \varphi_2(m,\lambda) = -\varepsilon\sqrt{|\mathcal{V}_2|}R_{01}(\lambda)\sqrt{\mathcal{V}_2}\varphi_2(m,\lambda) + \sqrt{|\mathcal{V}_2|} \times \\ \times \dfrac{-2\cos k + \varepsilon f(\sqrt{\mathcal{V}_1}\varphi_1) - \varepsilon f(\sqrt{\mathcal{V}_2}\varphi_2)f(\delta)}{1-f^2(\delta)} R_{01}(\lambda)\delta(m), \quad m \in \mathbb{Z}. \end{cases} \tag{6}$$

при определенной взаимосвязи между λ и ε; получена асимптотическая формула этого решения.

В следующей теореме рассматривается случай малого потенциала и «медленной» квантовой частицы.

Теорема 3. *Предположим, что* $k = A\varepsilon$, *в случае знака «+» или* $\tilde{k} = A\varepsilon$ *в случае знака «−», где* $\tilde{k} = -\pi - k$, $A \neq 0$ *— вещественная константа. Тогда для достаточно малых* ε *существует единственное решение* $\varphi \in l^2(\mathcal{G})$ *модифицированного уравнения Липпмана – Швингера* (6), *имеющее вид*

$$\varphi_1(n,\varepsilon) = \sqrt{|\mathcal{V}_1(n)|}(\pm 1)^{n+1}(1+n-|n|)Ai\varepsilon + O(\varepsilon^2),$$
$$\varphi_2(m,\varepsilon) = \sqrt{|\mathcal{V}_2(m)|}(\pm 1)^{m+1}Ai\varepsilon + O(\varepsilon^2).$$

Описана картина рассеяния для оператора $\mathcal{H}_\varepsilon$, выписаны коэффициенты отражения и прохождения. Получены асимптотические формулы для этих коэффициентов в частном случае.

Обозначим через $P_2^{\pm}(\lambda)$ вероятности прохождения вдоль оси m вверх и вниз соответственно, через $P_1^{\pm}(\lambda)$ — вероятности прохождения вдоль оси n вправо и влево соответственно.

Положим

$$C^{-}=2A^2-\frac{1}{2}Ai\sum_{j\in\mathbb{Z}}(-1)^{j+1}(1+j-|j|)\mathcal{V}_2(j)+$$

$$+\frac{1}{4}Ai\sum_{j\in\mathbb{Z}}(2j-2+|1-j|+|1+j|)(1+j-|j|)\mathcal{V}_1(j),$$

$$K^{-}=2A^2-\frac{1}{2}Ai\sum_{j\in\mathbb{Z}}(1+j-|j|)\mathcal{V}_2(j)+$$

$$+\frac{1}{4}Ai\sum_{j\in\mathbb{Z}}(-1)^j(2j-2+|1-j|+|1+j|)(1+j-|j|)\mathcal{V}_1(j).$$

Теорема 4. *В условиях теоремы* 3 *для* λ *достаточно близких к точке* 2 *справедливы равенства*

$$P_1^{+}(\lambda)=P_2^{+}(\lambda)=P_2^{-}(\lambda)=A^2\varepsilon^2+O(\varepsilon^3),$$
$$P_1^{-}(\lambda)=1+(A^2-2C^{-})\varepsilon^2+O(\varepsilon^3);$$

и для λ *достаточно близких к точке* -2 *равенства*

$$P_1^{+}(\lambda)=P_2^{+}(\lambda)=P_2^{-}(\lambda)=A^2\varepsilon^2+O(\varepsilon^3),$$
$$P_1^{-}(\lambda)=1+(A^2-2K^{-})\varepsilon^2+O(\varepsilon^3).$$

В следующей теореме, в отличие от теоремы 4, потенциал мал, а k любое.

Теорема 5. *Пусть* $\lambda=2\cos k$, $k\in(-\pi,0)$ *фиксировано. Тогда*

$$P_1^{+}(\lambda)=(1+E)^2+B^2+O(\varepsilon),\quad P_1^{-}(\lambda)=E^2+B^2+O(\varepsilon),$$

$$P_2^{\pm}(\lambda)=D^2+B^2+O(\varepsilon),$$

где

$$E=-\frac{2+2\cos 2k+\sin^2 2k}{(1+\cos 2k)^2+4\sin^2 2k},\quad B=\frac{\sin 2k(1+\cos 2k)}{(1+\cos 2k)^2+4\sin^2 2k},$$
$$D=\frac{2\sin^2 2k}{(1+\cos 2k)^2+4\sin^2 2k}.$$

Получены следующие результаты о квазиуровнях оператора $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{V}$. Здесь $\mathcal{V}$ — это оператор умножения на функцию

$$\mathcal{V}(n,m) = \begin{cases} V_0(\delta_{n,N} + \delta_{n,-N}), & m = 0, \\ 0, & n = 0 \end{cases}$$

при некотором натуральном $N > 1$. Потенциал $\mathcal{V}$ имеет «резонансный» характер.

Теорема 6. *1) В сколь угодно малой окрестности каждой из точек ± 2 для значений V_0 достаточно близких к $\pm 1/N$ существует единственный квазиуровень $\lambda_\pm = 2\cos k_\pm$ оператора $\mathcal{H}$, причем*

$$k_+ = i\Big(V_0 - \frac{1}{N}\Big) + o\Big(V_0 - \frac{1}{N}\Big),$$
$$k_- = -\pi - i\Big(V_0 + \frac{1}{N}\Big) + o\Big(V_0 + \frac{1}{N}\Big).$$

2) В сколь угодно малой окрестности каждой из точек ± 2 для значений V_0 достаточно близких к $\pm\dfrac{1}{N-1}$ существует единственный квазиуровень $\lambda_\pm = 2\cos k_\pm$ оператора $\mathcal{H}$, причем

$$k_+ = \frac{(N-1)^2 i}{(N-1)^2+1}\Big(V_0 - \frac{1}{N-1}\Big) + o\Big(V_0 - \frac{1}{N-1}\Big),$$
$$k_- = -\pi - \frac{(N-1)^2 i}{(N-1)^2+1}\Big(V_0 + \frac{1}{N-1}\Big) + o\Big(V_0 + \frac{1}{N-1}\Big).$$

Кроме того, доказаны существование и единственность и найден вид решения уравнения Липпмана–Швингера для оператора $\mathcal{H}$ с «налетающей волной», распространяющейся вдоль $\mathbb{Z} \times \{0\}$, а также получен следующий результат.

Теорема 7. *В сколь угодно малой окрестности точки $\lambda_0 = 0$ для всех достаточно малых V_0 существует единственное решение λ уравнения $P_1^-(\lambda) = 0$, причем*

$$\lambda = O(V_0^3).$$

Во второй главе исследуется двумерное разностное уравнение Шредингера в полосе, что отвечает электрону в квантовом волноводе, также являющееся (более реалистичной) моделью квантовой проволоки (ср. одномерные операторы первой главы). В этой главе изучаются резонансы и собственные значения, возникающие, в случае малых потенциалов, вблизи особенностей невозмущенной функции Грина. Также рассматривается задача рассеяния для данного оператора. Получены простые формулы для прохождения (отражения) вблизи упомянутых выше особенностей.

Положим $\Gamma = \mathbb{Z} \times \{1, \ldots, N\} \subset \mathbb{Z}^2$.

Введем в рассмотрение оператор $H_0 = (H_{01} \otimes 1) + (1 \otimes H_{02})$, действующий в $l^2(\Gamma)$. Оператор H_{01}, действующий в $l^2(\mathbb{Z})$, определен выше. Оператор H_{02} действует в $l^2\big(\{1, \ldots, N\}\big) \cong \mathbb{C}^N$ и определяется равенствами

$$\big(H_{02}\varphi\big)(m) = \varphi(m-1) + \varphi(m+1), \quad m = 2, \ldots, N-1,$$
$$\big(H_{02}\varphi\big)(1) = \varphi(2),$$
$$\big(H_{02}\varphi\big)(N) = \varphi(N-1).$$

Последние два равенства означают наличие нулевых граничных условий для $m = 0, N$.

Положим $H_\varepsilon = H_0 + \varepsilon V$, где $\varepsilon > 0$, а V является оператором умножения на вещественную функцию $V(n, m) \neq 0$, заданную на Γ и удовлетворяющую условию

$$|V(n, m)| \leqslant \beta e^{-\alpha|n|}, \quad n \in \mathbb{Z}, \quad m \in \{1, \ldots, N\}, \tag{7}$$

причем $\alpha > 0$.

Найден вид функции Грина $G_0(n, m, n', m', \lambda)$ оператора H_0.

Положим

$$\mu_j = \lambda - 2\cos\frac{\pi j m}{N+1}, \quad j = 1, \dots, N,$$

$$a = \sqrt{\frac{2}{N+1}}.$$

Лемма 1. *Имеет место формула*

$$G_0(n, m, n', m', \lambda) = \sum_{j=1}^{N} a^2 \sin\Big(\frac{\pi j m}{N+1}\Big)\sin\Big(\frac{\pi j m'}{N+1}\Big) G_{01}(n-n', \mu_j),$$

где

$$\lambda \notin \bigcup_{j=1}^{N}\Big[-2 + 2\cos\frac{\pi j}{N+1}, 2 + 2\cos\frac{\pi j}{N+1}\Big] =$$

$$= \Big[-2 + 2\cos\frac{\pi N}{N+1}, 2 + 2\cos\frac{\pi}{N+1}\Big].$$

Данное объединение совпадает с $\sigma(H_0)$.

Изучены спектральные свойства оператора H_ε.

Теорема 8. *Справедливо равенство*

$$\sigma_{ess}(H_\varepsilon) = \sigma(H_0).$$

Теорема 9. *Предположим, что для некоторого* $j \in \{1, \dots, N\}$

$$v_j^{\pm} = \sum_{(n',m')\in\Gamma^2} (\pm 1)^{n'} \sin^2\Big(\frac{\pi j m'}{N+1}\Big) V(n', m') \neq 0.$$

Тогда в некоторой окрестности точек $\lambda_{j0}^{\pm} = \pm 2 + 2\cos\dfrac{\pi j}{N+1}$ *для всех достаточно малых* $\varepsilon > 0$ *существует единственный квазиуровень* $\lambda_j^{\pm} = \lambda_j^{\pm}(\varepsilon)$ *оператора* H_ε*, аналитически зависящий от* ε*, для которого справедлива формула*

$$\lambda_j^{\pm}(\varepsilon) = \pm 2 + 2\cos\frac{\pi j}{N+1} \pm \left(\frac{\varepsilon v_j^{\pm}}{N+1}\right)^2 + O(\varepsilon^4).$$

Положим

$$\sin k_j = -\sqrt{1-(\mu_j/2)^2}, \quad j=1,\dots,N.$$

В окрестности точки λ_0 рассмотрим уравнение Липпмана – Швингера

$$\psi(n,m,\lambda) = \psi_0(n,m,\lambda) - \varepsilon \sum_{(n',m')\in\Gamma} G_0(n-n',m,m',\lambda)\times$$

$$\times V(n',m')\psi(n',m',\lambda), \tag{8}$$

где «налетающая волна» (записанная для переменной k_{j_0}) имеет вид

$$\psi_0(n,m,\lambda) = a\sin\Big(\frac{\pi j_0 m}{N+1}\Big)e^{ink_{j_0}} \tag{9}$$

и удовлетворяет уравнению $H_0\psi_0 = \lambda\psi_0$.

Положим

$$A_j^{\pm}(\lambda) = -\frac{\varepsilon a}{2i\sin k_j}\sum_{(n',m')\in\Gamma}\sin\Big(\frac{\pi j m'}{N+1}\Big)e^{\mp ik_j n'}V(n',m')\psi(n',m',\lambda). \tag{10}$$

Будем предполагать, что

$$\lambda \neq \cos\frac{\pi j}{N+1} + \cos\frac{\pi j'}{N+1}, \quad j,j'=1,\dots,N. \tag{11}$$

В следующей теореме описано рассеяние вблизи особенностей невозмущенной функции Грина для малых потенциалов.

Теорема 10. *Пусть выполнено* (11). *Тогда для вероятностей прохождения P_+ и отражения $P_- = 1-P_+$ в точке λ_0 справедливы формулы*

$$P_+ = \sum_{j:\lambda_0-2\cos\frac{\pi j}{N+1}\in(-2,2)} \left|\delta_{jj_0} + A_j^+(\lambda_0)\right|^2 \sqrt{\frac{4-\Big(\lambda_0-2\cos\dfrac{\pi j}{N+1}\Big)^2}{4-\Big(\lambda_0-2\cos\dfrac{\pi j_0}{N+1}\Big)^2}},$$

$$P_- = \sum_{j:\lambda_0 - 2\cos\frac{\pi j}{N+1} \in (-2,2)} \left|A_j^-(\lambda_0)\right|^2 \sqrt{\frac{4 - \left(\lambda_0 - 2\cos\dfrac{\pi j}{N+1}\right)^2}{4 - \left(\lambda_0 - 2\cos\dfrac{\pi j_0}{N+1}\right)^2}}, \qquad (12)$$

где $A_j^{\pm}(\lambda)$ *определяются равенством* (10).

Лемма 2. *Предположим, что для* j_0 *из* (9) *и всех достаточно малых* ε *справедливо равенство* $k_{j_0} = A\varepsilon$ *в случае знака «+» или* $\widetilde{k}_{j_0} = A\varepsilon$ *в случае знака «−», где* $\widetilde{k}_{j_0} = -\pi - k_{j_0}$, $A \neq 0$ *– вещественная константа. Тогда для решения* ψ *уравнения Липпмана–Швингера* (8) *имеет место равенство*

$$\psi(n,m,\lambda) = \left(1 - \frac{(\pm 1)^n a^2 v_{j_0}^{\pm}}{2iA + a^2 v_{j_0}^{+}}\right) a \sin\left(\frac{\pi j_0 m}{N+1}\right) + O(\varepsilon),$$

где

$$v_{j_0}^{\pm} = \sum_{(n,m)\in\Gamma} (\pm 1)^n V(n,m) \sin^2\left(\frac{\pi j_0 m}{N+1}\right).$$

Это означает, что для малых потенциалов рассматриваются «скользящие» налетающие электроны, имеющие малые угла падения.

Теорема 11. *В условиях леммы* 2 *справедливо равенство*

$$P_- = \frac{a^4\left(v_{j_0}^{\pm}\right)^2}{4A^2 + a^4\left(v_{j_0}^{+}\right)^2} + O(\varepsilon) = \frac{a^4(\varepsilon v_{j_0}^{\pm})^2}{4k_{j_0}^2 + a^4(\varepsilon v_{j_0}^{+})^2} + O(\varepsilon).$$

В третьей главе изучается рассеяние для уравнения Шредингера на трехмерной решетке с возмущенным периодическим потенциалом, отвечающим бесконечному кристаллу с внедренным плоским слоем. В частности, для малых потенциалов слоя и, одновременно, малых перпендикулярных по отношению к слою компонент скорости налетающей «блоховской» частицы, получены формулы прохождения (отражения), имеющие в своем составе скорость частицы и интеграл по ячейке от произведения квадрата модуля блоховской волновой функции и потенциала слоя.

Рассмотрим оператор Шредингера вида

$$\mathbb{H} = \mathbb{H}_0 + \mathbb{V}(n) + \varepsilon\mathbb{W}(n), \quad n = (n_1, n_2, n_3) \in \mathbb{Z}^3,$$

действующий в $l^2(\mathbb{Z}^3)$. Здесь $\mathbb{H}_0$ действует по формуле

$$\begin{aligned}(\mathbb{H}_0\psi)(n) = \psi(n_1+1, n_2, n_3) + \psi(n_1-1, n_2, n_3) + \psi(n_1, n_2+1, n_3) + \\ + \psi(n_1, n_2-1, n_3) + \psi(n_1, n_2, n_3+1) + \psi(n_1, n_2, n_3-1),\end{aligned}$$

$\mathbb{V}(n)$ — вещественный периодический потенциал по всем переменным n_j, $j = 1, 2, 3$ с периодом $T \geqslant 1$, $\mathbb{W}(n)$ — вещественный периодический по переменным n_1, n_2 с периодом T ненулевой потенциал, удовлетворяющий оценке

$$|\mathbb{W}(n)| \leqslant Ce^{-\alpha|n_3|}, \quad \alpha > 0, \tag{13}$$

$\varepsilon > 0$ — (малый) параметр. Оператор $\mathbb{H}$ представляет собой гамильтониан электрона в конечно-разностном приближении в периодической слоистой структуре.

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.

Для исследования оператора $\mathbb{H}$ потребуется унитарный оператор

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

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

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 $\mathbb{H}_{\mathbb{V}} = \mathbb{H}_0 + \mathbb{V}(n)$. Оператор $U\mathbb{H}_{\mathbb{V}}U^{-1}$ задается семейством операторов $\mathbb{H}_{\mathbb{V}}(k) = \mathbb{H}_0(k) + \mathbb{V}$, действующих в $l^2(\Omega_0)$, где $k = (k_1,k_2,k_3) \in \Omega_0^*$ — квазиимпульс, а оператор $\mathbb{H}_0(k)$ имеет тот же вид, что и оператор $\mathbb{H}_0$, но с использованием свойства блоховости

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

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

Для исследования оператора $\mathbb{H}$ потребуется также унитарный оператор

$$U_\parallel : l^2(\mathbb{Z}^3) \to l^2(\Omega) \otimes L^2(\Omega^*) \stackrel{def}{=} \int_{\Omega^*}^{\otimes} l^2(\Omega)dk_\parallel, \qquad (14)$$

$$\varphi \in l^2(\mathbb{Z}^3) \mapsto (U_\parallel\varphi)(n,k_\parallel) = \tilde{\varphi}(n,k_\parallel) =$$
$$= \frac{T}{2\pi} \sum_{\mu\in\mathbb{Z}^2} e^{-iT(\mu,k_\parallel)}\varphi(n+T(\mu,0))\big|_{\Omega\times\Omega^*},$$

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

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

Оба оператора $\mathbb{H}_{\mathbb{V}}$ и $\mathbb{H}$ могут быть разложены в прямом интеграле пространств $\int_{\Omega^*}^{\otimes} l^2(\Omega)dk_\parallel$ в семейства операторов $\mathbb{H}_{\mathbb{V}}(k_\parallel)$ и $\mathbb{H}(k_\parallel)$.

Пусть $\lambda_0 = \lambda_{m_0}(k_0)$, где $k_0 = (k_{10},k_{20},k_{30})$ — невырожденное собственное значение оператора $\mathbb{H}_{\mathbb{V}}(k_0)$, отвечающее нормированному собственному вектору $\psi_{m_0}(n, k_0)$. В дальнейшем предполагается, что

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

Уравнение $\partial\lambda_{m_0}(k)/\partial k_3 = 0$ задает в окрестности точки k_0 поверхность, описываемую аналитической функцией $k_3^{(0)} = k_3^{(0)}(k_\|)$, где $k_\|$ принадлежит некоторой окрестности точки $k_{0\|} = (k_{10}, k_{20})$.

Уравнение $\lambda_{m_0}(k) = \lambda$, рассматриваемое относительно k_3, имеет для $k_\|$ из окрестности точки $k_{0\|}$ ровно два решения $k_{3j} = k_{3j}(k_\|, \lambda)$, $j = 1, 2$, аналитически зависящие от $k_\|, \lambda$ там, где $k_{31} \neq k_{32}$ и сливающиеся, если $k = k_0$. Положим $\xi_j = k_{3j} - k_3^{(0)}(k_\|)$, $j = 1, 2$.

Рассмотрим уравнение Липпмана–Швингера в $l^2(\mathbb{Z}^3)$, отвечающее оператору $\mathbb{H}$, имеющее вид

$$\psi(n) = \psi_{m_0}(n, k) - \varepsilon \sum_{n' \in \mathbb{Z}^3} \mathbb{G}_{\mathbb{V}}(n, n', \lambda + i0)\mathbb{W}(n')\psi(n'), \tag{15}$$

где $\mathbb{G}_{\mathbb{V}}(n, n', \lambda)$ — функция Грина оператора $\mathbb{H}_{\mathbb{V}}$ в $l^2(\mathbb{Z}^3)$, $\lambda = \lambda_{m_0}(k)$ принадлежит внутренности одной из зон (промежутков, образующих спектр оператора $\mathbb{H}$), причем выбираем $k_3 = k_{31}$ (см. выше). Положим

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

Применим к (15) оператор $U_\|$, тогда получим уравнение Липпмана–Швингера в ячейке Ω :

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}(n, \tilde{k}_\|) = \frac{2\pi}{T}\psi_{m_0}(n, k)\delta_{per}(k_\| - \tilde{k}_\|) - \\ - \varepsilon \sum_{n' \in \Omega} \mathbb{G}_{\mathbb{V}}(n, n', \tilde{k}_\|, \lambda + i0)\mathbb{W}(n')\tilde{\psi}(n', \tilde{k}_\|),\end{aligned} \tag{16}$$

где $\mathbb{G}_{\mathbb{V}}(n, n', k_\|, \lambda)$ — функция Грина оператора $\mathbb{H}_{\mathbb{V}}(k_\|)$.

В дальнейшем будем предполагать, что

$$\xi_1 = A\varepsilon, \quad A = const \neq 0. \tag{17}$$

Лемма 3. *Предположим, что выполнено* (17). *Тогда для* $\tilde{k}_\|$ *из некоторой окрестности точки* $k_{0\|}$ *и достаточно малых* ε *существует единственное решение уравнения Липпмана–Швингера в ячейке* Ω (16) *вида*

$$\tilde{\psi}(n,\tilde{k}_\|)=\frac{2\pi}{T}\psi_{m_0}(n,(k_\|,k_3^{(0)}))\times$$
$$\times\left[\frac{iA\partial^2\lambda_{m_0}(k_\|,k_3^{(0)})/\partial k_3^2}{iA\partial^2\lambda_{m_0}(k_\|,k_3^{(0)})/\partial k_3^2-\mathbb{W}_0}+O(\varepsilon)\right]\delta_{per}(k_\|-\tilde{k}_\|),$$

где

$$\mathbb{W}_0=T\big(\psi_{m_0}(n,(k_\|,k_3^{(0)})),\mathbb{W}(n)\psi_{m_0}(n,(k_\|,k_3^{(0)}))\big),$$

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

$$\|\sqrt{\mathbb{W}(n)}O(\varepsilon)\|\leqslant C\varepsilon,\quad C=const.$$

Найдена асимптотическая формула для решения исходного уравнения Липпмана–Швингера (15), результат отражен в следующей теореме.

Теорема 12. *В условиях леммы* 3 *имеем равенства*

$$\psi(n)=a_+\psi_{m_0}(n,(k_\|,k_{31}))+\eta_+(n)+O(\varepsilon),\quad n_3\geqslant 0,$$
$$\psi(n)=\psi_{m_0}(n,(k_\|,k_{31}))+a_-\psi_{m_0}(n,(k_\|,k_{32}))+\eta_-(n)+O(\varepsilon),\quad n_3<0,$$

где

$$a_+=\frac{iA\partial^2\lambda_{m_0}\big(k_\|,k_3^{(0)}\big)/\partial k_3^2}{iA\partial^2\lambda_{m_0}\big(k_\|,k_3^{(0)}\big)/\partial k_3^2-\mathbb{W}_0}=\frac{i\partial\lambda_{m_0}(k_\|,k_{31})/\partial k_3}{i\partial\lambda_{m_0}(k_\|,k_{31})/\partial k_3-\varepsilon\mathbb{W}_0}+O(\varepsilon),$$
$$a_-=\frac{\mathbb{W}_0}{iA\partial^2\lambda_{m_0}\big(k_\|,k_3^{(0)}\big)/\partial k_3^2-\mathbb{W}_0}=\frac{\varepsilon\mathbb{W}_0}{i\partial\lambda_{m_0}\big(k_\|,k_{31}\big)/\partial k_3-\varepsilon\mathbb{W}_0}+O(\varepsilon),$$

а функции $\eta_\pm(n)=\eta_\pm(n,k)$ *удовлетворяют неравенству* (13) *и аналитически зависят от* k *как* $l^2(\Omega_\pm)$*-значные функции, где* $\Omega_+=\Omega\cap\{n_3\geqslant 0\}$, $\Omega_-=\Omega\cap\{n_3<0\}$.

Описана картина рассеяния вблизи точки экстремума по третьей координате квазиимпульса собственного значения оператора Шредингера с периодическим потенциалом в ячейке, то есть для малой перпендикулярной составляющей угла падения частицы на потенциальный барьер $\varepsilon\mathbb{W}$. Получены следующие простые формулы для вероятностей прохождения P_+ и отражения P_- :

$$P_+ = |a_+|^2 = \frac{(\partial\lambda_{m_0}(k_\parallel, k_{31})/\partial k_3)^2}{(\partial\lambda_{m_0}(k_\parallel, k_{31})/\partial k_3)^2 + \varepsilon^2\mathbb{W}_0^2} + O(\varepsilon),$$
$$P_- = |a_-|^2 = \frac{\varepsilon^2\mathbb{W}_0^2}{(\partial\lambda_{m_0}(k_\parallel, k_{31})/\partial k_3)^2 + \varepsilon^2\mathbb{W}_0^2} + O(\varepsilon).$$

Цитируемая литература

1. Miroshnichenko A. E. Engineering Fano resonances in discrete arrays / A. E. Miroshnichenko, Y. S. Kivshar // Phys. Rev. E. -2005. -Vol. 72, №5. -056611 (7p).

2. Bellissard J. Scattering theory for lattice operators in dimension $d \geqslant 3$ / J. Bellissard, H. Schulz-Baldes, // Rev. Math. Phys. -2012. -Vol. 24. -1250020 (51p).

3. Karachalios N. I. The number of bound states for a discrete Schrödinger operator on Z_N, $N \geqslant 1$, lattices / N. I. Karachalios // J. Phys. A: Math. Theor. -2008. -Vol. 41, №45. -455201.

4. Ziletti A. Coherent transport in multi-branch circuits / A. Ziletti, F. Borgonovi, G. L. Celardo, F. M. Izrailev, L. Karlan, V. G. Zelevinsky // Phys. Rev. B. -2012. -Vol. 85, №5. -052201 (5p).

5. Büttiker M. Generalizet many-channel conductance formula with application to small rings / M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer, S. Pinhas // Phys. Rev. B. -1985. -Vol. 31, №10. -P. 6207-6215.

6. Ptitsyna N. A lattice model for resonance in open periodic wavequides/ N. Ptitsyna, S. P. Shipman // arXiv: 1101.0170v1 [math-ph]. -2010.

7. Чубурин Ю. П. Об одном дискретном операторе Шредингера на графе / Ю. П. Чубурин // Теор. и матем. физика. -2010. -Т. 165, № 1. - С. 119-133.

8. Арсеньев А. А. Резонансы и туннелирование при рассеянии на квантовой бильярде в приближении сильной связи / А. А. Арсеньев // Теор. и матем. физика. -2004. -Т. 141, № 1. - С. 100-112.

9. Лакаев С. Н. О спектре двухчастичного оператора Шредингера на решетке / С. Н. Лакаев, А. М. Халхужаев // Теор. и матем. физика. -2008. -Т. 155, № 2. - С. 287-300.

10. Chung F. Discrete Green's Function / F. Chung, S.-T. Yau // Journal of Combinatorial Theory, Series A. -2000. -Vol.91, №1-2. - P. 191-214.

11. Rivkind A. Eigenvalue repulsion estimates and some applications for the one-dimensional Anderson model / A. Rivkind, Y. Krivolapov, S. Fishman, A. Soffer // J. Phys. A.: Math. Theor. -2011. -Vol. 44, №. 30. -305206 (19p).

12. Альбеверио С. Решаемые модели в квантовой механике / С. Альбеверио, Ф. Гестези, Р. Хёэг-Крон, Х. Хольден. -М.: Мир, 1991. -568 с.

Публикации автора по теме диссертации

1. Тинюкова Т. С. Квазиуровни дискретного оператора Шредингера с убывающим потенциалом на графе / Т. С. Тинюкова, Ю. П. Чубурин // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные Науки. -2009. -Вып. 3. -С. 104–113.

2. Тинюкова Т. С. Квазиуровни дискретного оператора Шредингера для квантового волновода / Т. С. Тинюкова // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. -2011. -Вып. 2. -С. 88–97.

3. Тинюкова Т. С. Уравнение Липпмана–Швингера для квантовых проволок / Т. С. Тинюкова // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. -2011. -Вып. 1. -С. 99–104.

4. Тинюкова Т. С. Рассеяние в случае дискретного оператора Шредингера для пересекающихся квантовых проволок / Т. С. Тинюкова // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. -2012. -Вып. 3. -С. 74–84.

5. Тинюкова Т. С. Дискретное уравнение Шредингера для квантового волновода / Т. С. Тинюкова // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. -2012. -Вып. 4. -С. 80–93.

6. Тинюкова Т. С. Рассеяние электрона на кристаллической пленке / Т. С. Тинюкова, Ю. П. Чубурин // Теор. и матем. физика. -2013. -Т. 176. -№. 3. -С. 444–457.

7. Ашихмина Т. С. О свойствах одного конечно-разностного уравнения на графе / Т. С. Ашихмина // Современные методы теории краевых задач: материалы ВВМШ «Понтрягинские чтения – XX». -Воронеж, 2009. - С. 202.

8. Тинюкова Т. С. Уравнение Липпмана–Швингера для квантовых проволок / Т. С. Тинюкова // Современные методы теории краевых задач: материалы ВВМШ «Понтрягинские чтения – XXI». -Воронеж, 2010. -С. 280.

9. Тинюкова Т. С. Дискретное уравнение Шредингера для квантового волновода / Т. С. Тинюкова, Ю. П. Чубурин, // Современные методы теории краевых задач: материалы ВВМШ «Понтрягинские чтения – XXIII». -Воронеж. -2012. -С. 212.