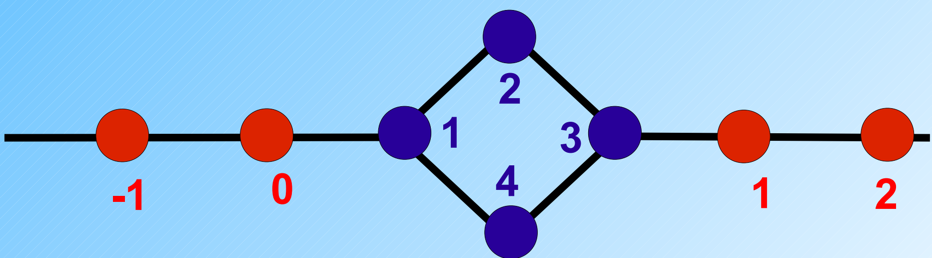
Н.И. Коробейникова, Ю.П. Чубурин

Дискретные математические модели квантовой механики

$$H = H_0 + V$$

$$(H_0\psi)(n) = \psi(n-1) + \psi(n+1)$$

$$V = \{v \cdot (1 + (-1)^{i+j})/2\}_{i,\, j=1,2,3,4}$$



Министерство образования и науки РФ
ФГБОУ ВПО «Удмуртский государственный университет»
Математический факультет
Кафедра математического анализа

Н.И. КОРОБЕЙНИКОВА
Ю.П. ЧУБУРИН

ДИСКРЕТНЫЕ МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Учебное пособие

Ижевск 2012

УДК 517.983(075)
ББК 22.162.3я7
К 68

Рекомендовано к изданию Учебно–методическим советом УдГУ

Рецензент: д.ф.-м.н., профессор В.Я. Дерр.

Коробейникова Н.И., Чубурин Ю.П.

К 68 Дискретные математические модели квантовой механики: учебное пособие. Ижевск: Изд-во «Удмуртский университет», 2012. 68 с.

В учебном пособии представлен математический аппарат (спектр, функция Грина, уравнение Липпмана–Швингера, рассеяние), который необходим при исследовании некоторых дискретных моделей физики твердого тела. Изложенные методы продемонстрированы на реальных примерах. Пособие адресовано студентам старших курсов и магистрантам физико-математических направлений подготовки. Также оно может быть использовано преподавателями на занятиях по функциональному анализу.

УДК 517.983(075)
ББК 22.162.3я7

Содержание

Введение

В последние десятилетия в квантовой физике твердого тела стали весьма популярными дискретные модели. Другими словами, физические системы часто описываются разностными уравнениями; при этом происхождение таких уравнений может быть никак не связано с аппроксимацией производных. Это, в частности, модель Гейзенберга–Изинга [1] в теории магнетизма; модель Хаббарда [1], которая весьма просто описывает взаимодействие частиц; модель Андерсона [2], используемая при исследовании случайного беспорядка.

В данном пособии мы будем рассматривать разностное приближение производных, а также приближение сильной связи для одномерного уравнения Шредингера. Подобные подходы в последние два-три десятилетия успешно использовались при описании микроэлектронных устройств (транзисторов, фильтров и т.д.) недалёкого будущего. В связи с тем, что эти устройства имееют наноразмеры, сравнимые с размерами молекул и атомов, для описания движения электронов через такие устройства (то есть «электронного транспорта») приходится, вместо законов электротехники, привлекать квантовую механику. Данные устройства обычно состоят из квантовых проволок и квантовых точек (см. [3, 4]; это, например, наноразмерные напыления металлов или полупроводников, имеющие соответствующую геометрию, на подложку (изолятор)). Движение электронов в квантовых проволоках часто можно успешно описывать одномерным уравнением Шредингера, а добавлению квантовой точки отвечает введенная в состав модели конечная матрица (см. об этом ниже). При этом ток обычно пропорционален вероятности прохождения через потенциальный барьер одного электрона, что делает актуальной хорошо исследованную задачу рассеяния.

Математическая сторона дела, в целом, хорошо известна физикам (см. [5]), но не привлекает большого внимания математиков (см. [6, 7]), хотя в данной области можно обнаружить интересные математические задачи.

Мы постарались изложить, в том числе на «реальных» примерах, первоначальные математические сведения (спектр, функция Грина, уравнение Липпмана–Швингера, рассеяние), которые имеют отношение ко всем перечисленным выше моделям, и, главным образом, к моделям наноустройств. Мы не касались более сложных вопросов, связанных с периодическими и многомерными операторами; не затрагивались квантовые волноводы и многочастичные операторы.

В учебном пособии содержится, помимо теории, большое количество задач разной степени сложности. Более сложные из них обычно снабжены указаниями или решениями, которые приведены в конце пособия. Также в конце работы дана сводка используемых обозначений и понятий.

Пособие может быть полезным студентам старших курсов и магистрам физико–математических направлений подготовки, а также преподавателям — как источник задач по функциональному анализу и тем для курсовых, выпускных квалификационных работ и магистерских диссертаций.

РАЗДЕЛ I. ПРОИСХОЖДЕНИЕ ДИСКРЕТНЫХ МОДЕЛЕЙ В ФИЗИКЕ

§1. Конечные разности

Пусть функция $\psi(x)$ определена на замкнутом промежутке $[a,\, b]$ (обозначение ψ вместо f вызвано обозначениями в физической литературе). При численном решении дифференциального уравнения функция и её производные заменяются своими значениями в фиксированном множестве точек. Поясним это. Пусть $n \geqslant 1$ — целое число, $a < b$. Положим $x_0 = a$, $x_n = b$ и разобъем отрезок $[a,\, b]$ на n частей точками деления $a < x_1 < \ldots < x_{n-1} < b$. Для простоты считаем, что все $\Delta x_m = x_{m+1} - x_m$ равны одному числу h. Все значения функции $\psi(x)$, $x \in [a,\, b]$ заменяем их конечным набором $\psi_m = \psi(x_m)$, $m = 0, 1, \ldots, n$. Первая производная приближенно вычисляется в точках x_m, $m = 0, 1, \ldots, n-1$ по формуле

$$\begin{gathered}\psi'(x_m) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\psi(x_m + \Delta x) - \psi(x_m)}{\Delta x} \approx \\ \approx \frac{\psi(x_m + h) - \psi(x_m)}{h} = \frac{\psi_{m+1} - \psi_m}{h}\end{gathered} \tag{1.1}$$

(считаем, что n достаточно велико, так, что h мало). Вторая производная вычисляется в точках x_m как производная от производной (см. 1.1):

$$\psi''(x_m) \approx \frac{\psi'(x_m + h) - \psi'(x_m)}{h} = \frac{\psi'_{m+1} - \psi'_m}{h} \approx$$

$$\approx \frac{\dfrac{\psi_{m+2} - \psi_{m+1}}{h} - \dfrac{\psi_{m+1} - \psi_m}{h}}{h} = \frac{\psi_{m+2} - 2\psi_{m+1} + \psi_m}{h^2}.$$

Однако, при вычислении $\psi''(x_m)$ следует брать значения x_j, наиболее близкие к x_m. Окончательно

$$\psi''(x_m) \approx \frac{\psi_{m+1} - 2\psi_m + \psi_{m-1}}{h^2}. \tag{1.2}$$

Аналогично можно получить выражения для производных любого порядка.

При численном решении дифференциальных уравнений значения функции и её производных заменяются их значениями в точках x_m и, таким образом, дифференциальное уравнение сводится к системе алгебраических уравнений с неизвестными ψ_m, $m = 0, 1, \ldots, n$ (см. примеры ниже). Всё вышесказанное можно повторить и для дифференциальных уравнений на всей числовой прямой. В этом случае имеем бесконечную совокупность точек x_m, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ таких, что $x_{m+1} - x_m = h$ для всех m.

П р и м е р 1.1. Рассмотрим дифференциальное уравнение вида $\psi' = (1 + x^2)\psi^2$, определенное на отрезке $[0, 1]$. Для численного решения имеем систему уравнений

$$\frac{\psi_{m+1} - \psi_m}{h} = (1 + x_m^2)\psi_m^2, \quad m = 0, 1, \ldots, n.$$

Отсюда $\psi_{m+1} = \psi_m + h(1 + (mh)^2)\psi_m^2$, $m = 0, 1, \ldots, n$. Получена рекуррентная формула, позволяющая последовательно выразить ψ_m, $m = 1, 2, \ldots, n$ через величины h и ψ_0, которые следует задать. При этом $\psi_0 = \psi(0)$ есть начальное условие, которое, впрочем, можно не задавать, а считать произвольной константой.

Упражнение 1. Решить численно следующие уравнения на отрезке $[0,\ 1]$ и сравнить с точными решениями.

1. $\psi' + x\psi = 0$, $\psi(0) = 1$, $h = 0{,}1$.

2. $\psi'' - 4\psi = 0$, $\psi(0) = 1$, $\psi'(0) = 0$, $h = 0{,}1$.

§2. Уравнение Шредингера

Одним из основных уравнений квантовой механики, которая изучает микрочастицы (электроны, атомы и т. д.), является (стационарное) уравнение Шредингера. В одномерном случае оно имеет вид

$$-\psi'' + V(x)\psi = E\psi \tag{2.1}$$

и обычно рассматривается на всей числовой прямой. Здесь $V(x)$ — вещественная кусочно-непрерывная функция, называемая потенциалом, E — числовой («спектральный») параметр. Дифференциальный оператор $H = H_0 + V(x)$, где $H_0 = -\dfrac{d^2}{dx^2}$, называется оператором Шредингера. Будем предполагать, что оператор H рассматривается в пространстве $L^2(\mathbb{R})$, а его область определения состоит из дважды дифференцируемых (хотя бы в обобщенном смысле) комплекснозначных функций ψ из $L^2(\mathbb{R})$ таких, что ψ', $\psi'' \in L^2(\mathbb{R})$. Уравнение (2.1) можно рассматривать как уравнение на собственные значения $H\psi = E\psi$. Для ограниченного потенциала можно доказать (см. [8, раздел X.2]), что H является (неограниченным) самосопряженным оператором, так что все собственные значения E вещественны. Самосопряженные операторы H_0, V и H (функция $V(x)$ рассматривается как оператор умножения) имеют физический смысл соответственно операторов кинетической, потенциальной и полной энергии микрочастицы, описываемой функцией ψ. Предположим, что выбрана такая собственная функция ψ, что $||\psi|| = 1$. Тогда $|\psi(x)|^2$ является плотностью вероятности того, что частица находится в точке x.

Уравнение (2.1) в конечно разностном приближении имеет вид (см. (1.2))

$$-\frac{\psi_{m+1} - 2\psi_m + \psi_{m-1}}{h^2} + V_m\psi_m = E\psi_m, \quad m \in \mathbb{Z}. \tag{2.2}$$

Перепишем уравнение (2.2) в виде

$$\psi_{m+1} + \psi_{m-1} - h^2V_m\psi_m = (-h^2E + 2)\psi_m.$$

Полагая $\widetilde{V}_m = -h^2V_m$ и $\widetilde{E} = -h^2E + 2$, получаем разностное уравнение

$$\psi_{m+1} + \psi_{m-1} + \widetilde{V}_m\psi_m = \widetilde{E}\psi_m. \tag{2.3}$$

Двухстороннюю последовательность $\psi = \{\psi_m\}_{m=-\infty}^{+\infty}$ можно отождествлять с функцией $\psi(m) = \psi_m$, $m \in \mathbb{Z}$, а также с бесконечномерным вектором

$$(\ldots,\, \psi(-1),\, \psi(0),\, \psi(1),\, \psi(2),\, \ldots,\, \psi(m),\, \ldots).$$

Член последовательности трактуется, соответственно, как значение функции в точке m или как m-я компонента вектора. В дальнейшем будем использовать обозначение $\psi = \psi(m)$, $m \in \mathbb{Z}$. Уравнение (2.3) приобретает вид (опускаем волны)

$$\psi(m+1) + \psi(m-1) + V(m)\psi(m) = E\psi(m). \tag{2.4}$$

Векторы ψ в дальнейшем принадлежат либо пространствам $l^2(\mathcal{M}) \cong \mathbb{C}^N$, где $\mathcal{M} = \{1, 2, \ldots, N\}$, и $l^2(\mathbb{Z})$, либо пространству $l^\infty(\mathbb{Z})$. Напомним, что $l^2(\mathbb{Z})$ — это гильбертово пространство функций ψ таких, что

$$||\psi|| = \Big(\sum_{n\in\mathbb{Z}} |\psi(n)|^2\Big)^{1/2} < \infty,$$

со скалярным произведением

$$(\psi, \varphi) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} \psi(n)\overline{\varphi(n)}.$$

Пространство $l^\infty(\mathbb{Z})$ — это банахово пространство ограниченных последовательностей с нормой $||\psi|| = \sup\limits_{n\in\mathbb{Z}} |\psi(n)|$. В дальнейшем, если не оговорено противное, под нормой подразумевается норма в $l^2(\mathbb{Z})$.

§3. Метод сильной связи

Рассмотрим движение электрона в конечной или бесконечной цепочке атомов, находящихся на одинаковых расстояниях $d > 0$ друг от друга. Пусть, для определенности, цепочка конечна и состоит из N узлов (атомов). Потенциал $V(x)$ в уравнении Шредингера (2.1) будем считать суммой потенциалов

$$V_j(x) = V_0(x - jd)$$

отдельных атомов (это означает, что мы пренебрегаем взаимодействием между атомами):

$$V(x) = \sum_{j=1}^{N} V_0(x - jd). \tag{3.1}$$

Приближенное решение

$$\psi(x) = \sum_{j=1}^{N} \alpha_j \psi_0(x - jd) \tag{3.2}$$

уравнения Шредингера для цепочки атомов ищем в виде линейной комбинации нормированных ($||\psi_0|| = 1$) решений

$$\psi_j(x) = \psi_0(x - jd)$$

уравнения Шредингера

$$-\psi_0''(x - jd) + V_0(x - jd)\psi_0(x - jd) = E_0\psi_0(x - jd) \tag{3.3}$$

для одного атома. Подставляя (3.1), (3.2) в (2.1) и пользуясь (3.3), получаем

$$\begin{gathered} -\psi'' + (V(x) - E)\psi = \\ = \sum_{j=1}^{N} \Big[\alpha_j \Big(- \psi_0''(x - jd) + V_0(x - jd)\psi_0(x - jd)\Big) + \\ +(V(x) - V_0(x - jd) - E)\psi_0(x - jd)\Big] = \\ = \sum_{j=1}^{N} \alpha_j (E_0 - E + V(x) - V_0(x - jd))\psi_0(x - jd) = 0. \end{gathered} \tag{3.4}$$

Поскольку оператор $H_0 + V_0(x)$ действует в $L^2(\mathbb{R})$, его собственная функция $\psi_0(x)$ в некотором смысле убывает при $|x| \to +\infty$. Будем считать, что убывание достаточно быстрое, так что сдвиги $\psi_0(x - jd)$ не сильно «перекрываются» и, следовательно, почти ортогональны:

$$(\psi_j,\, \psi_{j'}) \approx \delta_{jj'}, \quad j, j' = 1,\, \ldots,\, N, \tag{3.5}$$

где $\delta_{jj'} = \begin{cases} 1, & j = j', \\ 0, & j \neq j' \end{cases}$ — символ Кронекера. Умножая уравнение (3.4) скалярно на $\psi_{j'}(x) = \psi_0(x - j'd)$ и учитывая (3.5), получаем

$$-\varepsilon\alpha_{j'} + \sum_{j=1}^{N} \alpha_j \left((V - V_j)\psi_j, \psi_{j'}\right) =$$
$$= -\varepsilon\alpha_{j'} + \alpha_{j'} \left((V - V_{j'})\psi_{j'}, \psi_{j'}\right) + \sum_{j \neq j'} \alpha_j \left((V - V_j)\psi_j, \psi_{j'}\right) \approx 0,$$

где $E' = E - E_0$. Поскольку, по предположению, функции $\psi_j(x)$ быстро убывают при увеличении величины $|x - jd|$, то будем считать, что $((V - V_j)\psi_j,\, \psi_{j'}) \approx 0$, если $j \neq 0, \pm 1$ (так называемое «приближение ближайших соседей»). В итоге получаем систему уравнений

$$(E' - \varepsilon_{j'})\alpha_{j'} - \beta_{j'}(\alpha_{j'+1} + \alpha_{j'-1}) = 0, \tag{3.6}$$

где

$$\varepsilon_{j'} = ((V - V_{j'})\psi_{j'}, \psi_{j'}) = \int_{\mathbb{R}} |\psi_{j'}(x)|^2 \left(V(x) - V_{j'}(x)\right) dx$$

— энергия взаимодействия электрона с «чужими» атомами цепочки (в бесконечной цепочке $\varepsilon_{j'} = \varepsilon$ не зависит от j', так как при сдвиге на d интеграл не меняется),

$$\beta_{j'} = \int_{\mathbb{R}} \psi_{j'\pm1}(x) \left(V(x) - V_{j'\pm1}(x)\right) \overline{\psi_{j'}(x)}\, dx$$

— «интеграл переноса», то есть амплитуда вероятности P ($P = |\beta|^2$) перехода электрона с узла j' на ближайший узел $j' \pm 1$ под действием потенциала $V(x) - V_{j'\pm1}(x)$.

Заметим, что если $j' = 1$, то нулевой узел $\alpha_{j'-1} = \alpha_0$ отсутствует, и величину α_0 следует считать нулем (или $\alpha_0 = \alpha_N$ в случае кольца). Аналогичная ситуация с узлом $j' = N$. Соответствующие математические модели будут обсуждаться ниже. Для бесконечной цепочки j' принимает значения $0, \pm 1, \ldots, \pm n, \ldots$, следовательно, подобной проблемы нет.

Уравнение (3.6) является, в случае бесконечного числа узлов и $\beta = \beta_{j'} \neq 0$, частным случаем (с $V = 0$) разностного уравнения Шредингера (2.4). При этом смысл функций $\psi(m)$ в уравнении (2.4) и $\alpha_{j'}$ в уравнении (3.6) совершенно разный. Для неидеальных цепочек величины ε и β могут зависеть от j'. Если от j' зависит только ε, мы получаем полный аналог уравнения (2.4).

РАЗДЕЛ II. СПЕКТР И РЕЗОЛЬВЕНТА ДИСКРЕТНОГО ОПЕРАТОРА ШРЕДИНГЕРА

§4. Бесконечная цепочка

Как было показано в разделе I, дискретный оператор Шредингера для электрона в бесконечной идеальной цепочке атомов (также и в квантовой проволоке) имеет вид (см. уравнение (2.4) с $V = 0$ или уравнение (3.6))

$$(H_0\psi)(n) = \psi(n-1) + \psi(n+1), \quad n \in \mathbb{Z}, \tag{4.1}$$

где $\psi \in l^2(\mathbb{Z})$.

У п р а ж н е н и е 2. Доказать, что оператор H_0 ограничен и самосопряжен.

Найдем спектр $\sigma(H_0)$ данного оператора. Для этого понадобится следующее определение.

Определение 4.1. *Линейный оператор U, действующий из гильбертова пространства $\mathcal{H}_1$ в гильбертово пространство $\mathcal{H}_2$, называется* <u>*унитарным*</u>*, если он сюръективен и сохраняет скалярное произведение, то есть $(Ux, Uy) = (x, y)$ для всех $x, y \in \mathcal{H}_1$.*

У п р а ж н е н и е 3. Доказать, что унитарный оператор инъективен.

У п р а ж н е н и е 4. Доказать, что унитарный оператор сохраняет норму, то есть $\|Ux\| = \|x\|$.

З а м е ч а н и е 4.1. Из упражнения 4 вытекает, что $\|U\| = 1$.

У п р а ж н е н и е 5. Пусть A сюръективный оператор над $\mathbb{R}$, сохраняющий норму. Доказать, что оператор A является унитарным оператором.

Заметим, что утверждение в упражнении 5 справедливо и для пространства над $\mathbb{C}$, только для доказательства следует использовать более громоздкое «поляризационное тождество» (см. [9, Задача 4]).

Определение 4.2. *Если существует унитарный оператор $U : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$, то пространства $\mathcal{H}_1$ и $\mathcal{H}_2$ можно отождествить друг с другом взаимно-однозначным соответствием $x \in \mathcal{H}_1 \mapsto Ux \in \mathcal{H}_2$, которое сохраняет операции (в силу линейности U) и скалярное произведение. При таком отождествелении линейный оператор $A : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_1$ переходит в оператор $B = UAU^{-1} : \mathcal{H}_2 \to \mathcal{H}_2$ (см. рис. 4.1). Операторы A и B называют унитарно эквивалентными; они одинаковы по своим свойствам.*

В качестве унитарного оператора U возьмем дискретное преобразование Фурье, то есть оператор $F : l^2(\mathbb{Z}) \to L^2[0, 2\pi]$, действующий по формуле

$$\psi(n) \mapsto (F\psi)(k) = \widehat{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \psi(n) e^{-ikn}. \tag{4.2}$$

Ряд в (4.2) представляет собой ряд Фурье по ортонормированному базису $\left\{(2\pi)^{-1/2} e^{ikn}\right\}_{n\in\mathbb{Z}}$ в пространстве $L^2[0, 2\pi]$.

$$\begin{tikzcd}
\mathcal{H}_1 \arrow[r, "A"] \arrow[d, "U"'] & \mathcal{H}_1 \arrow[d, "U"] \\
\mathcal{H}_2 \arrow[r, "B"] & \mathcal{H}_2
\end{tikzcd}$$

Рис. 4.1. Диаграмма отождествлений

Упражнение 6. Доказать, что оператор F является унитарным.

Упражнение 7. Доказать, что если оператор A в $L^2[a, b]$ действует по формуле $(A\varphi)(k) = \alpha(k)\varphi(k)$, где $\alpha(k)$ — непрерывная функция на $[a, b]$, то

$$\sigma(A) = \{\alpha(k) \,:\, k \in [a, b]\} = \operatorname{im} \alpha.$$

Вычислим оператор $\widehat{H}_0 = FH_0F^{-1}$, унитарно эквивалентный оператору H_0. Имеем для $\psi = F^{-1}\widehat{\psi}$

$$\left(\widehat{H}\widehat{\psi}\right)(k) = (FH_0\psi)(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} [\psi(n-1) + \psi(n+1)]e^{-ikn} =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left(\psi(n-1)e^{-ik(n-1)}e^{-ik} + \psi(n+1)e^{-ik(n+1)}e^{ik}\right) =$$

$$= \left(e^{-ik} + e^{ik}\right)\widehat{\psi}(k) = 2\cos k \cdot \widehat{\psi}(k).$$

Следовательно, $\widehat{H}$ является оператором умножения на функцию $2\cos k$ в пространстве $L^2[0, 2\pi]$. Как известно (см. упражнение 7), спектр такого оператора совпадает с множеством значений функции $2\cos k$, то есть $\sigma(H_0) = [-2, 2]$.

Найдем теперь резольвенту $R_0(\lambda)$ оператора H_0. Предположим, что $G_0(n,\, n',\, \lambda)$ — ядро резольвенты, то есть, по определению, функция Грина оператора. В данном случае G_0 — (бесконечная) матрица оператора $R_0(\lambda)$, так что справедливо равенство

$$R_0(\lambda)\psi(n) = \sum_{n'=-\infty}^{+\infty} G_0(n,\, n',\, \lambda)\psi(n'), \quad n \in \mathbb{Z},$$

где $\psi \in l^2(\mathbb{Z})$, $\lambda \notin [-2,\, 2]$. Как мы выясним позже, для этого нужно потребовать выполнения равенства

$$(H_0 - \lambda I)G_0(n,\, n',\, \lambda) = \delta_{n,n'}, \tag{4.3}$$

где $\delta_{n,n'}$ — символ Кронекера. В дальнейшем будем пользоваться обозначением $\delta(n-n') = \delta_{n,n'}$. Докажем, что функция Грина оператора H_0 действительно существует и зависит лишь от разности аргументов:

$$G_0(n,\, n', \lambda) = G_0(n - n', \lambda),$$

так что условие (4.3) можно записать в виде

$$(H_0 - \lambda I)G_0(n,\, \lambda) = \delta(n). \tag{4.4}$$

Заметим, что функции $e^{\pm ikn}$, $n \in \mathbb{Z}$ являются решениями уравнения Шредингера (2.4) с $V = 0$ и $\lambda = 2\cos k$. Действительно:

$$H_0 e^{\pm ikn} = e^{\pm ik(n-1)} + e^{\pm ik(n+1)} = \left(e^{\mp ik} + e^{\pm ik}\right) e^{\pm ikn} = 2\cos k \cdot e^{\pm ink}.$$

Для $n \neq 0$ будем искать G_0 в виде $G_0(n,k) = Ce^{\pm ikn}$, тогда для таких n условие (4.4) выполнено (здесь и далее пользуемся для краткости обозначением вида $G_0(n,\, k)$ вместо $G_0(n,\, \lambda) = G_0(n,\, 2\cos k)$). Для $n = 0$ должно выполняться равенство

$$G_0(-1,\, \lambda) + G_0(1,\, \lambda) - \lambda G_0(0,\, \lambda) = 1. \tag{4.5}$$

Это равенство может быть справедливым лишь в случае разных знаков в показателе экспоненты для $n > 0$ и $n < 0$. Пусть $G_0(n,\, k) = Ce^{ikn}$ при $n > 0$ и $G_0(n,\, k) = Ce^{-ikn}$ при $n < 0$, то есть $G_0(n,\, k) = Ce^{ik|n|}$ при $n \neq 0$. Тогда условие (4.5) запишется в виде

$$C(2e^{ik} - \lambda) = C(2\cos k + 2i\sin k - 2\cos k) = 1,$$

откуда $C = \dfrac{1}{2i\sin k}$ и $G_0 = \dfrac{e^{ik|n|}}{2i\sin k}$. Следовательно, функция

$$G_0(n,\, n', k) = G_0(n - n', k) = \frac{e^{ik|n-n'|}}{2i\sin k} \tag{4.6}$$

удовлетворяет уравнению (4.3).

Докажем, что оператор с ядром вида (4.6) при определенном выборе ветви корня

$$\sin k = \pm\sqrt{1 - \cos^2 k} = \pm\sqrt{1 - (\lambda/2)^2}$$

действует в $l^2(\mathbb{Z})$, если $\lambda = 2\cos k \notin [-2,\, 2]$. Имеем

$$e^{ik} = \cos k + i\sin k = \frac{\lambda \pm \sqrt{\lambda^2 - 4}}{2} = \omega \pm \sqrt{\omega^2 - 1}, \tag{4.7}$$

где $\omega = \lambda/2$. Функция $g(\omega) = \omega \pm \sqrt{\omega^2 - 1}$ является обратной к функции Жуковского $\omega = \dfrac{1}{2}\left(z + \dfrac{1}{z}\right)$. Действительно, из последнего равенства получаем $z^2 - 2\omega z + 1 = 0$, откуда

$z = \omega \pm \sqrt{\omega^2 - 1}$. Как известно (см. [10]), функция Жуковского взаимно-однозначно отображает внутренность (также и внешность) единичного круга с центром в нуле на область $\mathbb{C} \setminus [-1,\, 1]$. Поэтому обратная функция двузначна и отбражает эту область, в зависимости от выбора ветви корня, либо на внутренность единичного круга (и тогда $\left|e^{ik|n|}\right| = \left|e^{ik}\right|^{|n|} < 1$), либо на его внешность (тогда $\left|e^{ik|n|}\right| > 1$). Заметим, что если в (4.7) выбрать в качестве $\sqrt{\omega^2 - 1}$ ветвь, отвечающую арифметическому корню (то есть $\sqrt{\omega^2 - 1} > 0$, если $\omega^2 - 1 > 0$), то для убывания функции G_0 при $n \to \infty$ следует взять $\sin k = -\sqrt{1 - (\lambda/2)^2}$. Действительно, тогда $|g(2)| = |2 - \sqrt{3}| = |e^{-ik}| < 1$, и выбранная ветвь корня отображает $\mathbb{C} \setminus [-1,\, 1]$ на область $\{|z| < 1\}$. Следовательно, $\left|e^{ik|n|}\right| = \left|e^{ik}\right|^{|n|} = |z|^{|n|} \to 0$ при $|n| \to \infty$. Докажем, что для данного выбора ветви корня оператор с ядром (матрицей) (4.6) действует в $l^2(\mathbb{Z})$. Имеем, для $q = |e^{ik}| < 1$,

$$\|(A\psi)(n)\|^2 = \frac{1}{4\sin^2 k} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left| \sum_{n'=-\infty}^{+\infty} e^{ik|n-n'|} \psi(n') \right|^2 =$$

$$= \frac{1}{4\sin^2 k} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left| \sum_{n''=-\infty}^{+\infty} e^{ik|n''|/2} \cdot e^{ik|n''|/2} \psi(n - n'') \right|^2 \leqslant$$

$$\leqslant \frac{1}{4\sin^2 k} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left(\sum_{n''=-\infty}^{+\infty} q^{|n''|} \right) \left(\sum_{n''=-\infty}^{+\infty} q^{|n''|} |\psi(n - n'')|^2 \right) =$$

$$= \frac{1}{4\sin^2 k} \left(\sum_{n''=-\infty}^{+\infty} q^{|n''|} \right) \left(\sum_{n''=-\infty}^{+\infty} q^{|n''|} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} |\psi(n - n'')|^2 \right) =$$

$$= \frac{1}{4\sin^2 k} \left(\sum_{n=-\infty}^{+\infty} q^{|n|} \right)^2 \cdot \|\psi\|^2 = C\|\psi\|^2$$

(было использовано неравенство Коши-Буняковского). Таким образом, получена оценка

$$\|(A\psi)(n)\|^2 \leqslant C\|\psi\|^2, \tag{4.8}$$

которая доказывает, что оператор A действует в $l^2(\mathbb{Z})$, а также ограничен в этом пространстве.

Теперь докажем, что оператор A является резольвентой $R_0(\lambda)$ оператора H_0. Для этого нужно проверить равенства

$$A(H_0 - \lambda I) = I, \qquad (H_0 - \lambda I)A = I. \tag{4.9}$$

Проверим второе из них. Имеем

$$(H_0 - \lambda I)A\psi = (H_0 - \lambda I)\sum_{n'=-\infty}^{+\infty} G_0(n-n',\lambda)\psi(n') =$$

$$= \sum_{n'=-\infty}^{+\infty} \left(G_0(n-1-n',\,\lambda) + G_0(n+1-n',\,\lambda) - \lambda\right)\psi(n') =$$

$$= \sum_{n'=-\infty}^{+\infty} \delta(n-n')\psi(n') = \psi(n),$$

что и доказывает утверждение.

Упражнение 8. Доказать первое равенство в (4.9).

§5. Спектр оператора Шредингера

В данном параграфе подробно рассмотрим оператор Шредингера $H = H_0 + V(n)$ с потенциалом простейшего вида $V(n) = V_0\delta(n)$, где V_0 — вещественная константа.

Упражнение 9. Доказать, что оператор H ограничен и самосопряжен.

Пусть λ — собственное значение линейного ограниченного оператора A, то есть для ненулевого вектора ψ (собственного вектора) выполнено равенство $A\psi = \lambda\psi$. Множество собственных векторов, отвечающих λ, вместе с нулевым элементом образует собственное подпространство; это не что иное, как $\ker(A - \lambda I)$. Размерность собственного подпространства $\varkappa = \dim\ker(A - \lambda I)$ называется кратностью собственного значения. Собственное значение называется изолированным, если в некоторой его окрестности нет других точек спектра.

Определение 5.3. *Назовем существенным спектром $\sigma_{ess}(A)$ оператора A множество $\sigma(A) \setminus \sigma_d(A)$, где $\sigma_d(A)$ — дискретный спектр, то есть множество изолированных собственных значений конечной кратности.*

Существенный спектр устойчив относительно определенного рода возмущений. Пусть A и V — ограниченные самосопряженные операторы в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$. Обозначим через $R(\lambda)$ резольвенту оператора A.

Теорема 5.1. (см. [13, Теорема XIII.14 и её следствия]) *Предположим, что для некоторого $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \sigma(A)$ оператор $VR(\lambda)$ компактен. Тогда*

$$\sigma_{ess}(A + V) = \sigma_{ess}(A).$$

Применим теорему 5.1 к оператору $H = H_0 + V_0\delta(n)$. Имеем для $V = V_0\delta(n)$, $\lambda \notin [-2,\, 2]$

$$VR_0(\lambda)\psi(n) = V_0(R_0(\lambda)\psi)(0)\delta(n) \in \{C\delta(n)\}.$$

Следовательно, $\dim \operatorname{im}(VR_0(\lambda)) = 1$, оператор $VR_0(\lambda)$ является оператором ранга 1 и поэтому компактен. Оператор H_0 не имеет изолированных собственных значений, следовательно, в силу теоремы 5.1,

$$\sigma_{ess}(H) = \sigma_{ess}(H_0) = \sigma(H_0) = [-2,\, 2].$$

Упражнение 10. Пусть $V = V(n) \in l^2(\mathbb{Z})$ понимается как оператор умножения на эту функцию. Доказать, что $\sigma_{ess}(H_0 + V) = [-2,\, 2]$.

Исследуем оператор $H = H_0 + V_0\delta(n)$ на изолированные собственные значения. Пусть $\lambda \in \mathbb{R} \setminus [-2,\, 2]$ (собственные значения самосопряженного оператора H вещественны), тогда уравнение на собственные значения $H\psi = \lambda\psi$ можно записать в виде $(H_0 - \lambda)\psi = -V_0\delta(n)\psi$ или

$$\psi(n) = -R_0(\lambda)V_0\delta(n)\psi(n) =$$
$$= -\frac{1}{2i\sin k}\sum_{n'=-\infty}^{+\infty} e^{ik|n-n'|}V_0\delta(n')\psi(n') = -\frac{V_0\psi(0)}{2i\sin k}e^{ik|n|}.$$

Таким образом,

$$\psi(n) = -\frac{V_0\psi(0)}{2i\sin k}e^{ik|n|}. \tag{5.1}$$

Тогда $\psi(0) = -\dfrac{V_0\psi(0)}{2i\sin k}$. Поскольку $\psi(0) \neq 0$ (иначе из (5.1) получаем $\psi = 0$), то

$$\sin k = -\frac{V_0 i}{2}. \tag{5.2}$$

Положим $k = i\varkappa$, где $\varkappa \in \mathbb{R}$, тогда $\sin k = i\operatorname{sh}\varkappa$ и (5.2) запишется в виде

$$\operatorname{sh}\varkappa = -\frac{V_0}{2}. \tag{5.3}$$

Это уравнение всегда имеет единственное решение, поскольку функция $\operatorname{sh}\varkappa = \dfrac{e^{\varkappa} - e^{-\varkappa}}{2}$ нечетная и монотонно возрастает (проверьте это!). Соответствующая «собственная функция»

$$\psi(n) = Ce^{-\varkappa|n|} \tag{5.4}$$

находится из (5.1). Это действительно собственная функция, то есть элемент из $l^2(\mathbb{Z})$, если $\varkappa > 0$ (соответственно, $V_0 < 0$), тогда λ — собственное значение. Если $V_0 > 0$, то $\varkappa < 0$ и $\psi(n)$ экспоненциально возрастает. В такой ситуации говорят, что соотвествующее λ является резонансом. Найдем

$$\lambda = 2\cos k = 2\sqrt{1 - \sin^2 k} = 2\sqrt{1 + \frac{V_0^2}{4}} = \sqrt{4 + V_0^2}. \tag{5.5}$$

В силу того, что $\cos k = \operatorname{ch}\varkappa = \dfrac{e^{\varkappa} + e^{-\varkappa}}{2} \geqslant 1$, в уравнении (5.5) берем арифметический корень. Таким образом, если $V_0 < 0$, то $\lambda = \sqrt{4 + V_0^2}$ является собственным зачением, а если $V_0 > 0$, то резонансом.

Согласно описанию аналитической функции $w = \sin z$ (см. [10]), уравнение (5.1) может иметь другие решения в результате сдвига $k \mapsto k + \pi n$. Сдвиг может вызвать лишь изменение знака у $\sin k$ в (5.2) и $\cos k$ в (5.5) или, эквивалентно, в правых частях этих уравнений. Таким образом, после сдвига на π получаем собственное значение $\lambda = -\sqrt{4+V_0^2}$ в случае $V_0 > 0$ и резонанс в этой же точке в случае $V_0 < 0$.

Итак, если $V_0 > 0$, то имеем единственное собственное значение $\lambda = -\sqrt{4+V_0^2}$ кратности единица (последнее вытекает из (5.4)) и резонанс $\lambda = \sqrt{4+V_0^2}$, а если $V_0 < 0$, то существует собственное значение $\lambda = \sqrt{4+V_0^2}$ кратности единица и резонанс $\lambda = -\sqrt{4+V_0^2}$.

Из проведенного рассуждения видно, что экспоненциальное возрастание «собственной функции», отвечающей резонансу, вызвано экспоненциальным возрастанием функции Грина $G_0(n-n',\, k) = \dfrac{e^{ik|n-n'|}}{2i\sin k}$. Перейдя от параметра k к параметру $\lambda = 2\cos k$, получим (при $\operatorname{Re}\lambda > 2$ корни арифметические)

$$G_0(n-n',\, \lambda) = \frac{(\cos k + i\sin k)^{|n-n'|}}{2i\sin k} =$$

$$= \frac{1}{-2i\sqrt{1-\left(\dfrac{\lambda}{2}\right)^2}}\left(\frac{\lambda}{2} - i\sqrt{1-\left(\frac{\lambda}{2}\right)^2}\right)^{|n-n'|} =$$

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

Согласно [11], функция G_0 как функция параметра λ определена на римановой поверхности, образованной двумя экземплярами комплексной плоскости $\mathbb{C}$, склеенными вдоль промежутка $[-2, 2]$. Резольвенте соответствуют λ на первом листе, на котором G_0 экспоненциально убывает при $|n-n'| \to \infty$. Резонансы, по определению, находятся на втором листе, на котором G_0 экспоненциально возрастает при $|n-n'| \to \infty$.

Упражнение 11. Найти изолированные собственные значения и собственные функции для оператора

$$H = H_0 + V_1\delta(n) + V_2\delta(n-n_0),$$

где V_1, $V_2 = \mathrm{const}$, $n_0 > 0$.

§6. Случай конечного числа узлов

Рассмотрим дискретное уравнение Шредингера для конечного множества узлов $\mathcal{M} = \{1, \ldots, N\}$, $N \geqslant 2$. Для того, чтобы было определено выражение $(H_0\psi)(n)$ с оператором вида (4.1) для $n = 1, N$, необходимо задать «граничные условия» в точках $n = 0, N+1$. Мы рассмотрим граничные условия двух видов: нулевые

$$\psi(0) = \psi(N+1) = 0 \tag{6.1}$$

и периодические

$$\psi(0) = \psi(N), \quad \psi(N+1) = \psi(1). \tag{6.2}$$

Оператор H_{01} вида (4.1) с граничными условиями (6.1) можно считать оператором в $l^2(\mathcal{M}) \cong \mathbb{C}^N$, определяемым равенствами

$$
(H_{01}\psi)(n) = \begin{cases} \psi(n-1) + \psi(n+1), \quad 2 \leqslant n \leqslant N-1, \\ \psi(2), \quad n = 1, \\ \psi(N-1), \quad n = N. \end{cases}
$$

Действие оператора H_{02} вида (4.1) с периодическими условиями (6.2) запишем в виде

$$
(H_{02}\psi)(n) = \begin{cases} \psi(n-1) + \psi(n+1), \quad 2 \leqslant n \leqslant N-1, \\ \psi(2) + \psi(N+1), \quad n = 1, \\ \psi(N-1) + \psi(1), \quad n = N. \end{cases}
$$

Упражнение 12. Найти матрицы операторов H_{0j}, $j = 1, 2$ в $\mathbb{C}^N$.

Из вида матриц вытекает самосопряженность операторов H_{0j}, $j = 1, 2$.

Найдем собственные векторы и собственные значения оператора H_{01}. Собственные функции $\psi_j(n)$ ищем в виде

$$
\psi_j(n) = C \sin(\alpha j n) = \frac{C}{2i} \left(e^{i\alpha j n} - e^{-i\alpha j n} \right), \quad j = 1, \ldots, N. \tag{6.3}
$$

Потребуем, чтобы выполнялись условия (6.1)

$$
\sin 0 = \sin(\alpha j (N+1)) = 0,
$$

для этого достаточно выбрать $\alpha = \pi/(N+1)$. Тогда, используя (6.3), получим

$$
\begin{aligned}
&H_0 \sin\left(\frac{\pi j n}{N+1}\right) = \\
&= \frac{1}{2i}\left(H_0 \exp\left(i\frac{\pi j n}{N+1}\right) - H_0 \exp\left(-i\frac{\pi j n}{N+1}\right)\right) = \\
&= \frac{1}{2i}\Bigg(\exp\left(i\frac{\pi j}{N+1}\right)\left(\exp\left(i\frac{\pi j n}{N+1}\right) - \exp\left(-i\frac{\pi j n}{N+1}\right)\right) + \\
&+ \exp\left(-i\frac{\pi j}{N+1}\right)\left(\exp\left(i\frac{\pi j n}{N+1}\right) - \exp\left(-i\frac{\pi j n}{N+1}\right)\right)\Bigg) = \\
&= \exp\left(i\frac{\pi j}{N+1}\right)\sin\left(\frac{\pi j n}{N+1}\right) + \exp\left(-i\frac{\pi j}{N+1}\right)\sin\left(\frac{\pi j n}{N+1}\right) = \\
&= 2\cos\left(\frac{\pi j}{N+1}\right)\cdot \sin\left(\frac{\pi j n}{N+1}\right).
\end{aligned}
$$

Следовательно, функции

$$\psi_j(n) = C \sin\left(\frac{\pi j n}{N+1}\right)$$

являются собственными функциями оператора H_{01}, отвечающими собственным значениям $\lambda_j = 2\cos\left(\frac{\pi j}{N+1}\right)$. При изменении j от 1 до N в силу монотонного убывания функции $\cos x$ на промежутке $(0, \pi)$ получаем неравенства

$$1 > \lambda_1 > \ldots > \lambda_N > -1.$$

Но, как известно, различным собственным значениям отвечают попарно ортогональные собственные векторы. Выберем константу C так, чтобы $\|\psi_j\| = 1$, $j = 1, \ldots, N$. Применив известное тождество [12]

$$\cos\alpha + \cos 2\alpha + \ldots + \cos n\alpha = \frac{\sin((2n+1)\alpha)/2 - \sin(\alpha/2)}{2\sin(\alpha/2)},$$

имеем

$$\|\psi_j\|^2 = C^2 \sum_{n=1}^{N} \sin^2\left(\frac{\pi j n}{N+1}\right) = \frac{C^2}{2} \sum_{n=1}^{N} \left(1 - \cos\left(\frac{2\pi j n}{N+1}\right)\right) =$$

$$= \frac{C^2 N}{2} - \frac{C^2}{2} \cdot \frac{\sin\left(\frac{2N+1}{2} \cdot \frac{2\pi j}{N+1}\right) - \sin\left(\frac{\pi j}{N+1}\right)}{2\sin\left(\frac{\pi j}{N+1}\right)} =$$

$$= \frac{C^2 N}{2} - \frac{C^2}{2} \cdot \frac{\sin\left(2\pi j - \frac{\pi j}{N+1}\right) - \sin\left(\frac{\pi j}{N+1}\right)}{2\sin\left(\frac{\pi j}{N+1}\right)} =$$

$$= \frac{C^2(N+1)}{2} = 1$$

в случае $C = \sqrt{\frac{2}{N+1}}$ (C не зависит от j). Таким образом, получаем ортонормированный базис

$$\psi_j(n) = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sin\left(\frac{\pi j n}{N+1}\right)$$

в $l^2(\mathcal{M})$, состоящий из собственных векторов оператора H_{01}.

Обсудим теперь оператор H_{02}. Собственные функции H_{02} ищем в виде $\varphi_j(n) = Ce^{i\alpha j n}$.

У п р а ж н е н и е 13. 1) Доказать, что функции $\varphi_j(n)$, $j = 1, \ldots, N$ удовлетворяют условиям (6.2) для $\alpha = \frac{2\pi}{N}$.
2) Доказать, что при $\alpha = \frac{2\pi}{N}$ и $C = \sqrt{\frac{1}{N}}$ эти функции образуют ортонормированный базис.

У п р а ж н е н и е 14. Доказать, что функции

$$\varphi_j(n) = \sqrt{\frac{1}{N}} \exp\left(i\frac{2\pi jn}{N}\right), \quad j = 1, \ldots, N$$

являются собственными векторами оператора H_{02}, отвечающими собственным значениям $\lambda_j = 2\cos\left(\frac{2\pi j}{N}\right)$.

У п р а ж н е н и е 15. Пусть A — самосопряженный оператор, действующий в $l^2(\mathcal{M}) \cong \mathbb{C}^N$, ψ_j, $j = 1, \ldots, N$ — ортонормированный базис в $l^2(\mathcal{M})$, состоящий из собственных векторов оператора A, отвечающих собственным значением λ_j (такой базис существует в силу теоремы Гильберта-Шмидта). Тогда для резольвенты $R(\lambda) = (A - \lambda I)^{-1}$ оператора A справедлива формула

$$R(\lambda) = \sum_{j=1}^{N} \frac{(\psi,\, \psi_j)\psi_j}{\lambda_j - \lambda}, \qquad \psi \in l^2(M).$$

У п р а ж н е н и е 16. Пользуясь упражнением 15, найти выражения для $R_{0j}(\lambda)\psi$, где $R_{0j}(\lambda)$ — резольвета H_{0j}, $j = 1, 2$.

У п р а ж н е н и е 17. Пусть A и B — ограниченные самосопряженные операторы в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$. Тогда число $\lambda \notin \sigma(A)$ является собственным значением оператора $A + B$ в том и только в том случае, если существует ненулевой ветор $\psi \in \mathcal{H}$ такой, что

$$\psi = -R_A(\lambda)B\psi, \tag{6.4}$$

где $R_A(\lambda) = (A - \lambda I)^{-1}$ — резольвента оператора A.

Определим функцию $\delta(n - n_0) = \delta_{nn_0}$ на множестве $\mathcal{M}$, где $n_0 \in \mathcal{M}$. Рассмотрим эту функцию как оператор умножения в $l^2(\mathcal{M}) : \psi(n) \mapsto \delta(n - n_0)\psi(n)$.

Упражнение 18. Найти матрицу этого оператора.

Рассмотрим операторы $H_j = H_{0j} + V\delta(n - n_0)$, $j = 1, 2$, где V — вещественная константа.

Упражнение 19. Пользуясь упражнениями 16 и 17, найти собственные значения операторов H_j, беря $A = H_{0j}$, отличные от точек $\sigma(H_{0j})$, для случая $N = 2$, $n_0 = 1$ и произвольного V. Сравнить с собственными значениями, полученными решением характеристического уравнения для матрицы.

§7. Резольвента оператора Шредингера с ограниченным потенциалом

В этом параграфе рассмотрим оператор $H = H_0 + V$, где V — ограниченный оператор в $l^2(\mathbb{Z})$. Найдем связь резольвент операторов H_0 и H.

Определение 7.4. *Назовем квазиуровнем оператора Шредингера H полюс его функции Грина.*

Теорема 7.2. *Пусть $H = H_0+V$, где V — ограниченный оператор в $l^2(\mathbb{Z})$. Тогда для резольвент $R(\lambda)$ и $R_0(\lambda)$ операторов H и H_0 справедлива формула*

$$(I + R_0(\lambda)V)^{-1} = 1 - R(\lambda)V. \tag{7.1}$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Имеем $(H_0 - \lambda I)R(\lambda) = (H_0 + V - \lambda I)R(\lambda) - VR(\lambda) = I - VR(\lambda)$, откуда $R(\lambda) = R_0(\lambda) - R_0(\lambda)VR(\lambda)$ или $(I + R_0(\lambda)V)R(\lambda) = R_0(\lambda)$. Из обратимости операторов $R(\lambda)$, $R_0(\lambda)$ и последнего равенства вытекает обратимость оператора $I + R_0(\lambda)V$, следовательно, $R(\lambda) = (I+R_0(\lambda)V)^{-1}R_0(\lambda)$. Умножая полученное равенство на V, получим $R(\lambda)V = (I + R_0(\lambda)V)^{-1}R_0(\lambda)V$ и тогда

$$R(\lambda)V = (I + R_0(\lambda)V)^{-1}(R_0(\lambda)V + I) - (I + R_0(\lambda)V)^{-1} = \\ = I - (I + R_0(\lambda)V)^{-1}.$$

Будем предполагать, что V является оператором конечного ранга (конечномерным), то есть $\dim \mathrm{im} V < \infty$. Равенство (7.1) справедливо и для соответствующих матриц (как правило, эти матрицы сводятся к конечным матрицам, см. раздел IV). Из этого равенства видно, что квазиуровни являются полюсами матрицы $(I + R_0(\lambda)V)^{-1}$. Оператор $R_0(\lambda)V$ является компактным в силу конечномерности V. Согласно [9, теорема VI.14], существование полюса у матрицы $(I + R_0(\lambda)V)^{-1}$ эквивалентно существованию ненулевого решения уравнения $\psi = -R_0(\lambda)V\psi$, а значит, и уравнения Шредингера $(H_0+V-\lambda)\psi = 0$ (ср. пример резонанса в §5). Из сказанного, в частности, вытекает, что изолированные собственные значения являются квазиуровнями.

Определение 7.5. *Назовем резонансом квазиуровень, не являющийся собственным значением.*

РАЗДЕЛ III. ТЕОРИЯ РАССЕЯНИЯ

§8. Уравнение Липпмана–Швингера

Определение 8.6. *Уравнением Липпмана–Швингера для оператора $H = H_0 + V(n)$, где $V \in l^1(\mathbb{Z})$, называется уравнение вида*

$$\psi(n) = e^{ikn} - R_0(\lambda \pm i0)V\psi(n) = \\ = e^{ikn} - \sum_{n'=-\infty}^{+\infty} G_0(n-n',\, k)V(n')\psi(n'), \tag{8.1}$$

где $k \in (0,\, \pi)$ или $k \in (-\pi,\, 0)$.

В определении 8.6 аргумент $k \in (0,\, \pi)$ отвечает нижнему пределу аргумента λ (то есть второй аргумент функции Грина $G_0(n-n',\, \lambda)$ стремится к $\lambda - i0$), а $k \in (-\pi,\, 0)$ — верхнему пределу (то есть второй аргумент функции Грина $G_0(n-n',\, \lambda)$ стремится к $\lambda + i0$); это следует из равенств $\dfrac{\lambda}{2} = \cos k$, $\cos\left(k + \dfrac{\pi}{2}\right) = -\sin k$ и рис. 22 в [10].

Уравнение (8.1) играет большую роль при изучении рассеяния частицы, это будет рассмотрено далее в §9. Заметим, что резольвента $R_0(\lambda)$ не существует для соответствующих $\lambda = 2\cos k \in (-2,\, 2)$; действительно,

$$|G_0(n-n',\, k)| = \frac{1}{2|\sin k|} = \mathrm{const}$$

не убывает при $n' \to \infty$ и потому не является ядром оператора в $l^2(\mathbb{Z})$. Однако, формулой

$$(A\varphi)(n) = \sum_{n'=-\infty}^{+\infty} G_0(n-n',\, k)V(n')\psi(n')$$

определяется линейный ограниченный оператор из $l^\infty(\mathbb{Z})$ в $l^\infty(\mathbb{Z})$.

Заметим, что потенциал V в (8.1) не обязательно является оператором умножения на функцию (см. раздел IV).

Упражнение 20. Проверить ограниченность оператора A как оператора из $l^\infty(\mathbb{Z})$ в $l^\infty(\mathbb{Z})$.

Решения ψ уравнения (8.1) будем искать, таким образом, в классе $l^\infty(\mathbb{Z})$.

Упражнение 21. Рассмотрим уравнение (8.1) с $\varepsilon V(n)$ вместо $V(n)$, где $\varepsilon > 0$ — малый параметр. Доказать, что для всех достаточно малых ε существует единственное решение уравнения в классе $l^\infty(\mathbb{Z})$.

Упражнение 22. Доказать, что решение ψ уравнения Липпмана–Швингера (8.1) является также решением уравнения Шредингера $H\psi = \lambda\psi$, где $\lambda = 2\cos k$.

Исследуем уравнение (8.1) в простом случае

$$V(n) = V_0\delta(n),$$

где $V_0 \neq 0$ — вещественная константа. Это уравнение примет вид

$$\psi(n) = e^{ikn} - V_0\frac{e^{ik|n|}}{2i\sin k}\psi(0). \tag{8.2}$$

Отсюда $\psi(0) = 1 - \dfrac{V_0\psi(0)}{2i\sin k}$ и

$$\psi(0) = \frac{1}{1 + \dfrac{V_0}{2i\sin k}} = \frac{2i\sin k}{2i\sin k + V_0}. \tag{8.3}$$

Из (8.2), (8.3) находим решение уравнения (8.2):

$$\psi(n) = e^{ikn} - \frac{V_0 e^{ik|n|}}{2i\sin k + V_0}. \tag{8.4}$$

Заметим, что если $n > 0$, то

$$\psi(n) = e^{ikn} - \frac{V_0}{2i\sin k + V_0} e^{ikn} = \frac{2i\sin k}{2i\sin k + V_0} e^{ikn} = a_+ e^{ikn}, \tag{8.5}$$

и при $n < 0$

$$\psi(n) = e^{ikn} - \frac{V_0}{2i\sin k + V_0} e^{-ikn} = e^{ikn} + a_- e^{-ikn}, \tag{8.6}$$

где числа

$$a_+ = \frac{2i\sin k}{2i\sin k + V_0}, \qquad a_- = -\frac{V_0}{2i\sin k + V_0}$$

называются коэффициентами прохождения и отражения соответственно (см. ниже смысл такого названия).

§9. Картина рассеяния

Рассмотрим теперь нестационарное уравнение Шредингера вида

$$i\psi' = H\psi \tag{9.1}$$

с начальным условием

$$\psi(n,\, 0) = \psi_0(n) \in l^2(\mathbb{Z}).$$

Здесь $\psi = \psi(n,\, t)$ — функция, при каждом $t \in \mathbb{R}$ принадлежащая (как функция аргумента n) пространству $l^2(\mathbb{Z})$. Предполагается, что ψ непрерывно дифференцируема на числовой прямой как $l^2(\mathbb{Z})$-значная функция. Это означает, что для каждого $t \in \mathbb{R}$ выполнено

$$\frac{\psi(n,\, t+\Delta t) - \psi(n,\, t)}{\Delta t} \to \psi'(n,\, t), \quad \Delta t \to 0,$$

где сходимость — это сходимость по норме в $l^2(\mathbb{Z})$, а производная $\psi'(n,\, t)$ является непрерывной функцией как отображение $t \in \mathbb{R} \mapsto \psi'(\cdot\ ,\, t) \in l^2(\mathbb{Z})$.

В простейшем случае $V = 0$ уравнение (9.1) принимает вид

$$i\psi' = H_0\psi. \tag{9.2}$$

После преобразования Фурье этого уравнения по переменной n (см. §4) получим уравнение

$$i\frac{\partial\widehat{\psi}}{\partial t} = 2\cos k\,\widehat{\psi}, \tag{9.3}$$

где $\widehat{\psi} = \widehat{\psi}(k,\, t)$ при каждом $t \in \mathbb{R}$ принадлежит пространству $L^2[-\pi,\, \pi]$ как функция от k. Уравнение (9.3) легко решается как уравнение с разделяющимися переменными. Учитывая начальное условие $\widehat{\psi}(k,\, 0) = \widehat{\psi}_0(k)$, получим решение $\widehat{\psi}(k,\, t) = \widehat{\psi}_0(k)\exp(-2it\cos k)$. Возвращаясь к функции $\psi(n,\, t)$, с помощью формулы для определения коэффициентов ряда Фурье, получим решение уравнения (9.2):

$$\psi(n,\, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\pi}^{\pi} \widehat{\psi}_0(k)e^{ink}e^{-2it\cos k}\,dk. \tag{9.4}$$

У п р а ж н е н и е 23. Проверить, что функция $\psi(n, t)$ из (9.4) непрерывно дифференцируема по t как $l^2(\mathbb{Z})$-значная функция и удовлетворяет требуемому начальному условию.

У п р а ж н е н и е 24. Доказать, что для решения $\psi(n, t)$ уравнения (9.1) справедливо равенство

$$\|\psi(n, t)\| = \|\psi_0(n)\| = \mathrm{const}, \quad t \in \mathbb{R}.$$

Если $\|\psi_0\| = 1$ и $A \subset \mathbb{Z}$, то

$$P = \sum_{n \in A} |\psi(n, t)|^2 \tag{9.5}$$

есть вероятность того, что частица, описываемая оператором H, находится в момент времени t в области A.

Определение 9.7. *Предположим, что функция $f(x)$ определена на числовой прямой. Её* *носителем* *называется множество*

$$\operatorname{supp} f = \overline{\{x \in \mathbb{R} \,:\, f(x) \neq 0\}}.$$

Если носитель компактен (в случае $\mathbb{R}$ это означает замкнутость и ограниченность), то $f(x)$ обращается тождественно в нуль вне любого отрезка $[a, b] \supset \operatorname{supp} f$.

Будем предполагать, что функции $C(k)$ и $P(k)$ бесконечно дифференцируемы на числовой прямой, причем $C(k)$ имеет компактный носитель.

У п р а ж н е н и е 25. Доказать, что множество

$$K = \overline{\{P'(k) \,:\, k \in \operatorname{supp} C(k)\}}$$

компактно.

В дальнейшем нам понадобится следующее утверждение, которое доказано, например, в [14, Дополнение 1 к §XI.3].

Теорема 9.3. (теорема о стационарной фазе) *Положим*

$$u(x,\, t) = \int_{-\infty}^{\infty} C(k) e^{i(xk - tP(k))}\, dk$$

и пусть G *— открытое множество, содержащее множество*

$$K = \overline{\{P'(k)\ :\ k \in \operatorname{supp} C(k)\}}.$$

Тогда для любого m *существует константа* C *такая, что для всех* x, t, *для которых* $\dfrac{x}{t} \notin G$, *имеет место неравенство*

$$|u(x,\, t)| \leqslant \frac{C}{(1 + |x| + |t|)^m}.$$

Упражнение 26. Пусть, в условиях теоремы 9.3, $\Omega = \mathbb{Z} \setminus G$. Доказать, что тогда

$$\|u(n,\, t)\|^2_{l^2(\Omega)} = \sum_{n \in \Omega} |u(n,\, t)|^2 \to 0, \qquad |t| \to +\infty.$$

Применим теорему о стационарной фазе к решению (9.4) уравнения (9.3), при этом $C(k) = \dfrac{\widehat{\psi}_0(k)}{\sqrt{2\pi}}$, так что функция $\widehat{\psi}_0$ должна быть бесконечно дифференцируемой и иметь компактный носитель. В нашем случае $P(k) = 2\cos k$.

Предположим, что $C(k) \geqslant 0$, и эта функция подобрана (выбором множителя) так, что $\|\psi(n,\, t)\| = 1$ для всех t (см. упражнение 24). Далее, считаем, что $\operatorname{supp} C(k)$ находится в δ-окрестности некоторой точки $k_0 \in (-\pi,\, 0)$, причем

$$(k_0 - \delta,\, k_0 + \delta) \subset (-\pi,\, 0)$$

и если $|k - k_0| < \delta$, то $|2\sin k - 2\sin k_0| < \varepsilon$, где $\varepsilon > 0$ — малое наперед заданное число. В силу упражения 26 для достаточно больших $|t|$ частица, с точностью до сколь угодно малой вероятности, находится в области

$$\left|\frac{n}{t} + 2\sin k_0\right| < \varepsilon.$$

Для $t < 0$ получаем

$$-2\sin k_0 \cdot t + \varepsilon t < n < -2\sin k_0 \cdot t - \varepsilon t.$$

Таким образом, частица, в основном, находится в промежутке длины $2\varepsilon|t|$ (стремящемся к бесконечности при $|t| \to +\infty$) и равномерно движется со скоростью $-2\sin k_0 > 0$ слева направо. То же самое получим и для $t > 0$. При этом волновой пакет (то есть функция $\psi(n, t)$, описывающая частицу в некотрой области) «расплывается» при $|t| \to +\infty$.

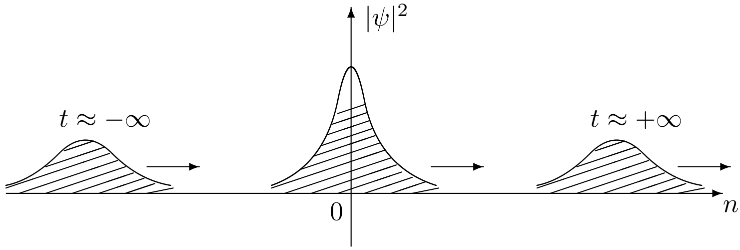


Рис. 9.2. Волновой пакет

Для наглядности, на рис. 9.2 графики сплошные; на самом деле график образован счетным множеством точек $(n, |\psi(n)|^2)$. Площади каждой из трех заштрихованных фигур на рисунке приближенно равны единице (в условных единицах).

То, что частица с отрицательным импульсом (импульс описывается функцией $C(k)$) движется слева направо, а не справа налево, вызвано тем, что, фактически, у оператора энергии H_0, а значит, у энергии, изменен знак (см. §2, §3).

Перейдем к описанию картины рассеяния для оператора $H = H_0 + V\delta(n)$. Решение ψ уравнения (9.1) ищем в виде

$$\psi(n,\,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} C(k)\psi(n,\,k)e^{-2it\cos k}\,dk, \tag{9.6}$$

где $C(k)$ — бесконечно дифференцируемая функция с компактным носителем, расположенным левее нуля, а $\psi(n) = \psi(n,\,k)$ — решение уравнения Липпмана–Швингера (8.1), которое в рассматриваемом случае имеет вид (8.4) (ср. (9.4) и (9.6); при $V = 0$ решение уравнения Липпмана–Швингера есть e^{ink}).

Упражнение 27. Проверить, что функция $\psi(n,\,t)$ из (9.6) удовлетворяет уравнению (9.1).

Пусть $n < 0$, тогда вследствие (9.6) и (8.6) имеем

$$\begin{aligned}\psi(n,\,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} C(k)e^{ikn}e^{-2it\cos k}\,dk+\\ +a_-\int_{-\infty}^{+\infty} C(k)e^{-ikn}e^{-2it\cos k}\,dk.\end{aligned} \tag{9.7}$$

Если при этом $t < 0$, то первое слагаемое в (9.7) описывает частицу, перемещающуюся слева направо (см. выше). Для второго слагаемого в области, где ψ заметно отличается от нуля, должно выполняться условие

$$\frac{n}{t} \approx -2\sin(-k_0) = 2\sin k_0,$$

чего не будет для $t < 0$ из-за разных знаков правой и левой частей. Таким образом, второе слагаемое в рассматриваемом случае не играет роли в рассеянии. Но оно играет роль в случае $n < 0$ и $t > 0$ и описывает отраженную от «потенциального барьера» частицу: её скорость меняется на противоположную, и «волновой пакет» перемещается, расплываясь, справа налево.

При $n > 0$ и $t > 0$ имеется также волновой пакет, порожденный, согласно (8.5), интегралом

$$a_+ \int_{-\infty}^{+\infty} C(k) e^{ikn} e^{-2it\cos k}\, dk,$$

который описывает частицу, прошедшую через потенциальный барьер и движущийся слева направо.

Области, в которых, в основном, локализованы рассматриваемые пакеты, не пересекаются при $t \to -\infty$ или $t \to +\infty$. Вследствие формулы (9.5), упражнения 24 и обсуждения выше, вероятность нахождения частицы в области $n < 0$ при $t \to -\infty$ стремится к единице. Вероятность P_- нахождения частицы при $t \to \infty$ в области $n < 0$ (то есть вероятность отражения) дается, в пределе, выражением

$$|a_-|^2 \sum_{n=-1}^{+\infty} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} C(k) e^{-ikn} \cdot e^{-2it\cos k}\, dk \right|^2 =$$

$$= |a_-|^2 \sum_{n=-1}^{+\infty} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} C(-k) e^{ikn} \cdot e^{-2it\cos k}\, dk \right|^2 \to |a_-|^2 \cdot 1 = P_-,$$

а вероятность P_+ нахождением частицы при $t \to \infty$ в области $n > 0$ (вероятность прохождения) определяется выражением

$$|a_+|^2 \sum_{n=1}^{+\infty} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} C(k) e^{ikn} \cdot e^{-2it\cos k}\, dk \right|^2 \to |a_+|^2 = P_+.$$

Очевидно, что $P_- + P_+ = 1$.

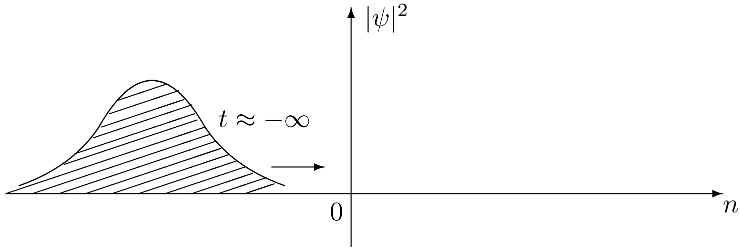


Рис. 9.3. Налетающий волновой пакет

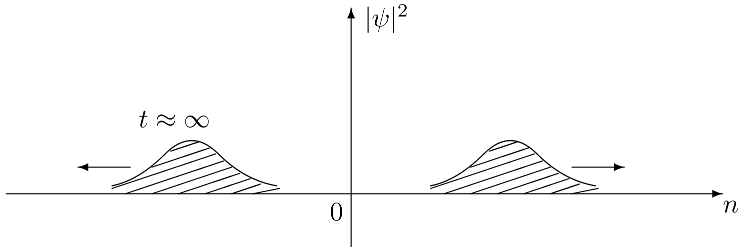


Рис. 9.4. Рассеянный волновой пакет

Сумма заштрихованных площадей P_- и P_+ на рис. 9.4 равна площади на рис. 9.3 и равна единице.

Изложенная методика может использоваться и для потенциалов более общего вида, например, удовлетворяющих оценке $|V(n)| \leqslant Ce^{-\alpha n}$, $\alpha > 0$ (см. [15]).

Упражнение 28. Найти вероятности P_- и P_+ для случая $V(n) = V_1\delta(n) + V_2\delta(n - n_0)$, где V_1, $V_2 = \mathrm{const}$, $n_0 > 0$.

РАЗДЕЛ IV. НЕЛОКАЛЬНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ

§10. Общая схема

Предположим, что имеется плоский неориентированный связный граф Γ без петель со счетным множеством вершин (узлов) $A = \{a_n\}_{n=1}^{\infty}$ и с множеством ребер $B = \{(a_{n_i}, a_{n_j})\}$. Предполагаем, что из каждой вершины выходит конечное число ребер, не превосходящее некоторое заданное число.

Далее, предположим, что существует ограниченная функция f, сопоставляющая каждому ребру (a_{n_i}, a_{n_j}) некоторое вещественное число $f(a_{n_i}, a_{n_j}) \geqslant 0$. Рассмотрим оператор

$$H : l^2(A) \to l^2(A),$$

действующий по формуле

$$(H\psi)(a_n) = \sum_{(a_n, a_{n_i}) \in B} f(a_n, a_{n_i})\psi(a_{n_i}). \tag{10.1}$$

Обычно одночастичные одномерные операторы, используемые в квантовой теории твердого тела, имеют вид (10.1). Более того, как правило, часть графа, уходящая на бесконечность, представляет собой конечное число (обычно две) полупрямых с узлами, на которых оператор H действует как оператор H_0 (см. (4.1)). Действие оператора на оставшейся ограниченной части графа задается некоторой конечной матрицей («нелокальным» потенциалом — в отличие от «локального» потенциала, то есть оператора умножения на функцию). Исследование модели с конечным числом полупрямых сводится к исследованию решений конечной линейной системы.

Проведем математическое исследование двух подобных операторов; схожие (более сложные) операторы встречаются во многих физических статьях. В этих работах проводятся компьтерные расчеты для фиксированных наборов параметров.

§11. Точка на проволоке

Рассмотрим следующую модель (см. рис. 11.5): к квантовой точке («примеси»), состоящей из одного узла, присоединены два проводника (квантовые проволоки). Предполагаем, что амплитуда перехода электрона на соседний узел внутри проводников равна единице и амплитуда перехода с проводников на квантовую точку и обратно равна $v > 0$ (соответствующие вероятности будут равны 1 и v^2).

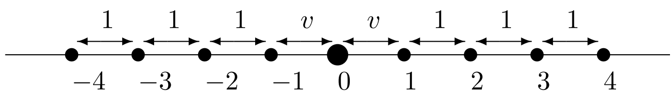


Рис. 11.5. Модель 1

Тем самым определен граф Γ с вершинами $A = \mathbb{Z}$ и ребрами $B = \{(n, n+1)\}$, где $n \in \mathbb{Z}$. В нашем случае определелена функция f, которая принимает значения, равные либо 1, либо v.

Пусть $n \in \mathbb{Z}$. Рассмотрим оператор $H : l^2(\mathbb{Z}) \to l^2(\mathbb{Z})$, определенный равенством

$$H\psi(n) = \begin{cases} \psi(n-1) + \psi(n+1), \quad n \neq 0, \pm 1, \\ v\psi(0) + \psi(2), \quad n = 1, \\ \psi(-2) + v\psi(0), \quad n = -1, \\ v\psi(-1) + v\psi(1), \quad n = 0. \end{cases}$$

Оператор H, очевидно, является частным случаем общего определения (10.1). Его можно записать в виде

$$\begin{gathered} H\psi(n) = H_0\psi(n) - (1-v)(\psi(-1) + \psi(1))\delta_{n,0} - \\ -(1-v)\psi(0)(\delta_{n,1} + \delta_{n,-1}). \end{gathered} \tag{11.1}$$

Упражнение 29. Проверить ограниченность и самосопряженность оператора H в $l^2(\mathbb{Z})$.

В равенстве (11.1) оператор H записан как сумма операторов H_0 и $V(n)$. В параграфе 5 найдена функция Грина оператора H_0, будем использовать этот результат при изучении нашего оператора, а также будем опираться в нашем исследовании на спектральные свойства операторов вида $H_0 + V(n)$.

Поставим следующие задачи:

1) найти резольвенту оператора H;

2) исследовать спектральные свойства H;

3) найти решения уравнения Липпмана–Швингера для H;

4) описать картину рассеяния частицы, моделируемой оператором H.

Спектральные свойства оператора H

Найдем резольвенту $R(\lambda)$ оператора H. Для этого решим уравнение $(H-\lambda\, I)\psi(n)=\varphi(n)$ относительно ψ или

$$(H_0-\lambda\, I)\psi(n)=\varphi(n)+(1-v)(\psi(-1)+\psi(1))\delta_{n,\,0}+$$
$$+(1-v)\psi(0)(\delta_{n,\,1}+\delta_{n,-1}).$$

Зная резольвенту $R_0(\lambda)=(H_0-\lambda\, I)^{-1}$ оператора H_0 (см. §4), выразим $\psi(n)$:

$$\psi(n)=\sum_{m=-\infty}^{+\infty} G_0(n-m,\lambda)\Big(\varphi(m)+(1-v)(\psi(-1)+\psi(1))\delta_{m,\,0}+$$
$$+(1-v)\psi(0)(\delta_{m,\,1}+\delta_{m,-1})\Big).$$

Пусть $\lambda=2\cos k$, $\sqrt{\cos^2 k-1}=-i\sin k$, тогда

$$\sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{ik|n-m|}\delta_{m,\,0}=e^{ik|n|},\quad \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{ik|n-m|}\delta_{m,\,1}=e^{ik|n-1|},$$
$$\sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{ik|n-m|}\delta_{m,-1}=e^{ik|n+1|}.$$

Следовательно,

$$\psi(n)=\frac{1}{2i\sin k}\left(\sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{ik|n-m|}\varphi(m)+\right.$$
$$+(1-v)\left(\psi(-1)+\psi(1)\right)e^{ik|n|}+$$
$$\left.+(1-v)\psi(0)\left(e^{ik|n-1|}+e^{ik|n+1|}\right)\right).$$

Положим $\psi(0)=x$, $\psi(-1)+\psi(1)=y$,

$$\sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{ik|m|}\varphi(m)=A \text{ и } \sum_{m=-\infty}^{+\infty}\left(e^{ik|m+1|}+e^{ik|m-1|}\right)\varphi(m)=B.$$

Определим неизвестные x и y из системы

$$\begin{cases} \left(e^{ik} - e^{-ik} - 2(1-v)e^{ik}\right) x - (1-v)y = A, \\ -2(1-v)(e^{2ik}+1)x + \left(e^{ik} - e^{-ik} - 2(1-v)e^{ik}\right) y = B. \end{cases}$$

Это линейная неоднородная система относительно неизвестных x и y. Применим метод Крамера, для чего вычислим определители:

$$\Delta = \begin{vmatrix} e^{ik} - e^{-ik} - 2(1-v)e^{ik} & -(1-v) \\ -2(1-v)(e^{2ik}+1) & e^{ik} - e^{-ik} - 2(1-v)e^{ik} \end{vmatrix} =$$

$$= \left(e^{2ik}-1\right)\left(2v^2 - e^{-2ik} - 1\right) = \left(e^{2ik}-1\right)\left(2v^2 - \lambda e^{-ik}\right),$$

$$\Delta_x = \begin{vmatrix} A & -(1-v) \\ B & e^{ik} - e^{-ik} - 2(1-v)e^{ik} \end{vmatrix} =$$

$$= e^{-ik}\left(e^{2ik}-1\right)\left(v\sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{ik|m|}\varphi + (1-v)\varphi(0)\right),$$

$$\Delta_y = \begin{vmatrix} e^{ik} - e^{-ik} - 2(1-v)e^{ik} & A \\ -2(1-v)(e^{2ik}+1) & B \end{vmatrix} =$$

$$= e^{-ik}\left(e^{2ik}-1\right)\Bigg(\left(e^{ik}+e^{-ik}\right)\sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{ik|m|}\varphi(m) +$$

$$+ \left((2v-1)e^{ik} - e^{-ik}\right)\varphi(0)\Bigg) =$$

$$= e^{-ik}\left(e^{2ik}-1\right)\left(\lambda\sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{ik|m|}\varphi(m) + (2v-\lambda)\,\varphi(0)\right).$$

Отсюда

$$x = \psi(0) = \frac{v\sum\limits_{m\in\mathbb{Z}} e^{ik|m|}\varphi(m) + (1-v)\varphi(0)}{e^{ik}\left(2v^2 - \lambda e^{-ik}\right)},$$

$$y = \psi(-1) + \psi(1) =$$

$$= \frac{\lambda \sum\limits_{m\in\mathbb{Z}} e^{ik|m|}\varphi(m) + (2v-\lambda)\,\varphi(0)}{e^{ik}\left(2v^2 - \lambda e^{-ik}\right)}.$$

Таким образом, резольвента оператора H найдена:

$$\psi(n) = R(\lambda)\varphi(n) = \frac{1}{2i\sin k\,(2v^2e^{ik}-\lambda)}\left(\sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{ik|n-m|}\varphi(m)+\right.$$

$$+e^{ik|n|}(1-v)\Big(\lambda\sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{ik|m|}\varphi(m) + (2v-\lambda)\,\varphi(0)\Big)+$$

$$\left.+(1-v)\left(e^{ik|n-1|}+e^{ik|n+1|}\right)\left(v\sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{ik|m|}\varphi + (1-v)\varphi(0)\right)\right).$$

Квазиуровни оператора H являются полюсами функции Грина. Следовательно, квазиуровни оператора H определяются из уравнений $\sin k = 0$ и $2v^2 - e^{-2ik} - 1 = 0$. Первое уравнение дает решение $k = \pi l, l \in \mathbb{Z}$, что соответствует $\lambda = \pm 2$. Решим второе уравнение

$$(2v^2-1)(\cos^2 k + \sin^2 k) - (\cos(-2k) + i\sin(-2k)) = 0,$$

для этого приведем к однородному тригонометрическому уравнению второго порядка:

$$2(v^2-1)\cos^2 k + 2v^2\sin^2 k + 2i\sin k\cos k = 0.$$

Отсюда

$$v^2\mathrm{tg}^2 k + i\,\mathrm{tg}\,k + v^2 - 1 = 0 \text{ или } (\mathrm{tg}\,k + i)\cdot\left(\mathrm{tg}\,k - \frac{v^2-1}{v^2}i\right) = 0.$$

Воспользуемся тождеством

$$1 + \mathrm{tg}^2 k = \frac{1}{\cos^2 k}.$$

Тогда при $|v| > \dfrac{\sqrt{2}}{2}$ получим $\lambda = \pm\dfrac{2v^2}{\sqrt{2v^2-1}}$, а при $0 < |v| < \dfrac{\sqrt{2}}{2}$ значение спектрального параметра λ равно $\pm\dfrac{2v^2 i}{\sqrt{|2v^2-1|}}$.

Упражнение 30. Определить, когда λ является собственным значением оператора H, а когда резонансом. Сформулировать соответствующие утверждения.

Упражнение 31. Найти существенный спектр оператора H.

Задача рассеяния

Уравнение Липпмана-Швингера определяется следующим образом $\Big($см. (8.1); учитываем вид (11.1) оператора $V\psi(n) = -(1-v)(\psi(-1)+\psi(1))\delta_{n,0} - (1-v)\psi(0)(\delta_{n,1}+\delta_{n,-1})\Big)$:

$$\psi(n) = e^{ikn} + (1-v)R_0(\lambda+i0)\Big((\psi(-1)+\psi(1))\delta_{m,0}+ \\ +\psi(0)\left(\delta_{m,1}+\delta_{m,-1}\right)\Big)$$

или

$$\psi(n) = e^{ikn} + \frac{1-v}{2i\sin k}\Big((\psi(-1)+\psi(1))e^{ik|n|}+ \\ +\psi(0)\left(e^{ik|n-1|}+e^{ik|n+1|}\right)\Big). \tag{11.2}$$

Для нахождения решения $\psi(n)$ определим неизвестные $\psi(0) = x$ и $\psi(-1)+\psi(1) = y$ из системы, полученной из (11.2):

$$\begin{cases} \left((2v-1)e^{ik} - e^{-ik}\right)x - (1-v)y = e^{ik} - e^{-ik}, \\ -2(1-v)(e^{2ik}+1)x + \left((2v-1)e^{ik} - e^{-ik}\right)y = e^{2ik} - e^{-2ik}. \end{cases}$$

Используя метод Крамера, находим

$$\psi(0) = \frac{v(e^{ik} - e^{-ik})}{e^{ik}\left(2v^2 - \lambda e^{-ik}\right)}, \ \psi(-1) + \psi(-1) = \frac{e^{2ik} - e^{-2ik}}{e^{ik}\left(2v^2 - \lambda e^{-ik}\right)}.$$

Отсюда и из (11.2) получаем решение уравнения Липпмана–Швингера

$$\psi(n) = e^{ikn} + \frac{1-v}{e^{ik}(2v^2 - \lambda e^{-ik})}\Big(\lambda e^{ik|n|} + ve^{ik|n-1|} + ve^{ik|n+1|}\Big).$$

Упражнение 32. Найти коэффициенты прохождения a_+ и отражения a_-.

Упражнение 33. Исследовать условия, при которых имеет место полное отражение и (или) полное прохождение частицы.

Упражнение 34. Найти другой (эквивалентный) вид оператора H для графа, изображенного на рис. 11.5. Квантовая точка, занумерованная на рис. 11.5 нулем, нумеруется числом 1, а оставшийся бесконечный участок графа — числами 0, ± 1, ± 2, ... При этом вместо одной функции $\psi(n)$ вводится пара функций $\psi = (\psi_1(n), \psi_2(m))$, каждая из которых определена на своем участке графа.

§12. Точка вне проволоки

Рассмотрим теперь квантовую точку, находящуюся вблизи проволоки, но не на ней самой (см. рис. 12.6). Предполагаем, что амплитуда перехода на соседний узел в проволоке равна единице, а с проволоки на квантовую точку и обратно равна $v > 0$.

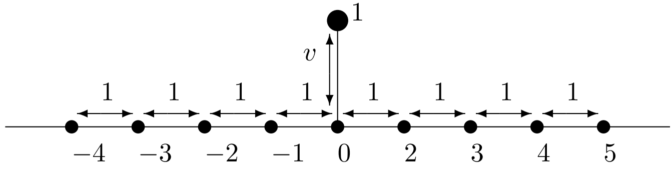


Рис. 12.6. Модель 2

Это определяет граф Γ с вершинами $A = \{n\}$ и ребрами $B = \{(n, n+1) \,:\, n \neq 1\} \cup \{(0,\, 2)\}$, где $n \in \mathbb{Z}$, а также функцию f, которая принимает значения, равные либо 1, либо v.

В соответствии с (10.1) рассмотрим оператор

$$H \,:\, l^2(\mathbb{Z}) \to l^2(\mathbb{Z}),$$

действующий по формуле

$$\begin{gathered}(H\psi)(n) = (H_0\psi)(n) + (\psi(2) + (v-1)\psi(1))\delta_{n,\,0} + \\ + ((v-1)\psi(0) - \psi(2))\delta_{n,\,1} + (\psi(0) - \psi(1))\delta_{n,\,2}.\end{gathered} \tag{12.1}$$

Спектральные свойства H

Для того, чтобы найти резольвенту, решим уравнение $(H - \lambda I)\psi(n) = \varphi(n)$ для заданного $\varphi \in l^2(\mathbb{Z})$ относительно ψ. Перепишем его в виде

$$(H_0 + V(n) - \lambda I)\psi(n) = \varphi(n). \tag{12.2}$$

Отсюда получим

$$\psi(n) = (H_0 - \lambda I)^{-1}(\varphi(n) - V(n)\psi(n)),$$

то есть (см. §4)

$$\psi(n)=\sum_{m=-\infty}^{+\infty}\frac{1}{2i\sin k}e^{ik|n-m|}\Big(\varphi(m)-(\psi(2)+(v-1)\psi(1))\delta_{m,0}-$$
$$-((v-1)\psi(0)-\psi(2))\delta_{m,1}-(\psi(0)-\psi(1))\delta_{m,2}\Big).$$

Учитывая равенства

$$\sum_{m=-\infty}^{+\infty}e^{ik|n-m|}\delta_{m,0}=e^{ik|n|},\ \ \sum_{m=-\infty}^{+\infty}e^{ik|n-m|}\delta_{m,1}=e^{ik|n-1|},$$
$$\sum_{m=-\infty}^{+\infty}e^{ik|n-m|}\delta_{m,2}=e^{ik|n-2|},$$

получим

$$\psi(n)=\frac{1}{2i\sin k}\Bigg(\sum_{m=-\infty}^{+\infty}e^{ik|n-m|}\varphi(m)-$$
$$-\Big(\psi(2)+(v-1)\psi(1)\Big)e^{ik|n|}-$$
$$-\Big((v-1)\psi(0)-\psi(2)\Big)e^{ik|n-1|}- \tag{12.3}$$
$$-\Big(\psi(0)-\psi(1)\Big)e^{ik|n-2|}\Bigg).$$

Таким образом, для нахождения ψ необходимо определить значения функции $\psi(n)$ в точках $n=0$, $n=1$ и $n=2$.

Введем обозначения

$$A=\sum_{m=-\infty}^{+\infty}e^{ik|m|}\varphi(m),\ \ B=\sum_{m=-\infty}^{+\infty}e^{ik|m-1|}\varphi(m),$$
$$C=\sum_{m=-\infty}^{+\infty}e^{ik|m-2|}\varphi(m).$$

Подставляя $n = 0$, $n = 1$ и $n = 2$ в выражение (12.3), получим систему

$$\begin{cases} \left(ve^{ik} - e^{-ik} + e^{2ik}\right)\psi(0) + \left(v - 1 - e^{2ik}\right)\psi(1) + \\ \qquad + \left(1 - e^{ik}\right)\psi(2) = A, \\ \left(v - 1 + e^{ik}\right)\psi(0) + \left((v-1)e^{ik} - e^{-ik}\right)\psi(1) + \\ \qquad + \left(e^{ik} - 1\right)\psi(2) = B, \\ \left((v-1)e^{ik} + 1\right)\psi(0) + \left((v-1)e^{2ik} - 1\right)\psi(1) + \\ \qquad + \left(e^{2ik} - e^{-ik}\right)\psi(2) = C. \end{cases}$$

Вычислим определитель системы:

$$\Delta = \begin{vmatrix} ve^{ik} - e^{-ik} + e^{2ik} & v - 1 - e^{2ik} & 1 - e^{ik} \\ v - 1 + e^{ik} & (v-1)e^{ik} - e^{-ik} & e^{ik} - 1 \\ (v-1)e^{ik} + 1 & (v-1)e^{2ik} - 1 & e^{2ik} - e^{-ik} \end{vmatrix} =$$

$$= e^{-ik}\left(v^2 + 2i\sin 2k\right)\left(e^{2ik} - 1\right)^2.$$

Согласно формуле Крамера, $\psi(0) = \dfrac{\Delta_{\psi(0)}}{\Delta}$, где

$$\Delta_{\psi(0)} = \begin{vmatrix} A & v - 1 - e^{2ik} & 1 - e^{ik} \\ B & (v-1)e^{ik} - e^{-ik} & e^{ik} - 1 \\ C & (v-1)e^{2ik} - 1 & e^{2ik} - e^{-ik} \end{vmatrix} =$$

$$= \left(\left(1 + e^{-2ik}\right)\sum_{m=0}^{-\infty} e^{-ikm}\varphi(m) + ve^{-ik}\varphi(1) + \right.$$

$$\left. + \left(e^{-ik} + e^{-3ik}\right)\sum_{m=2}^{+\infty} e^{ikm}\varphi(m) \right)\left(e^{2ik} - 1\right)^2.$$

Аналогично $\psi(1) = \dfrac{\Delta_{\psi(1)}}{\Delta}$, где

$$\Delta_{\psi(1)} = \begin{vmatrix} ve^{ik} - e^{-ik} + e^{2ik} & A & 1 - e^{ik} \\ v - 1 + e^{ik} & B & e^{ik} - 1 \\ (v-1)e^{ik} + 1 & C & e^{2ik} - e^{-ik} \end{vmatrix} =$$

$$= \left(ve^{-ik} \sum_{m=0}^{-\infty} e^{-ikm}\varphi(m) + (e^{-2ik} - 1)\varphi(1) + \right.$$

$$\left. + ve^{-2ik} \sum_{m=2}^{+\infty} e^{ikm}\varphi(m) \right) \left(e^{2ik} - 1\right)^2$$

и $\psi(2) = \dfrac{\Delta_{\psi(2)}}{\Delta}$, где

$$\Delta_{\psi(2)} = \begin{vmatrix} ve^{ik} - e^{-ik} + e^{2ik} & v - 1 - e^{2ik} & A \\ v - 1 + e^{ik} & (v-1)e^{ik} - e^{-ik} & B \\ (v-1)e^{ik} + 1 & (v-1)e^{2ik} - 1 & C \end{vmatrix} =$$

$$= \left(\left(e^{ik} + e^{-ik}\right) \sum_{m=0}^{-\infty} e^{-ikm}\varphi(m) + v\varphi(1) + \right.$$

$$\left. + \left(-v^2 e^{-2ik} + e^{-2ik} + e^{-4ik}\right) \sum_{m=2}^{+\infty} e^{ikm}\varphi(m) \right) \left(e^{2ik} - 1\right)^2.$$

Положим $\Delta' = e^{-ik}\left(v^2 + 2i\sin 2k\right)$, тогда

$$\Delta = \Delta' \cdot \left(e^{2ik} - 1\right)^2.$$

Подводя итог вышесказанному, сформулируем лемму.

Лемма 12.1. *Пусть $\lambda \notin \sigma(H)$. Тогда $\Delta \neq 0$ и справедлива следующая формула*

$$\psi(n) = (R(\lambda)\varphi)(n) =$$

$$= \frac{1}{(2i \sin k)\Delta'} \left(\Delta' \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{ik|n-m|}\varphi(m) + \right.$$

$$+ \Big(\Delta_2' + (v-1)\Delta_1' \Big) e^{ik|n|} + \tag{12.4}$$

$$+ \Big((v-1)\Delta_0' - \Delta_2' \Big) e^{ik|n-1|} +$$

$$\left. + \Big(\Delta_0' - \Delta_1' \Big) e^{ik|n-2|} \right),$$

где для $p \in \{0, 1, 2\}$

$$\Delta_p' = -\frac{\Delta_{\psi(p)}}{(e^{2ik}-1)^2} =$$

$$= -A_p \sum_{m=0}^{-\infty} e^{-ikm}\varphi(m) - B_p\varphi(1) - C_p \sum_{m=2}^{+\infty} e^{ikm}\varphi(m),$$

$$\begin{aligned}
&A_0 = 1 + e^{-2ik}, && B_0 = ve^{-ik}, && C_0 = e^{-ik} + e^{-3ik},\\
&A_1 = ve^{-ik}, && B_1 = e^{-2ik} - 1, && C_1 = ve^{-2ik},\\
&A_2 = e^{ik} + e^{-ik}, && B_2 = v, && C_2 = -v^2 e^{-2ik} + e^{-2ik} + e^{-4ik}.
\end{aligned}$$

Теорема 12.4. *Оператор H ограничен, самосопряжен, и существенный спектр этого оператора совпадает с отрезком $[-2, 2]$.*

Упражнение 35. Доказать теорему 12.4.

Лемма 12.2. *Число $\lambda \notin [-2, 2]$ принадлежит дискретному спектру оператора H тогда и только тогда, когда $\Delta' = 0$.*

Д о к а з а т е л ь с т в о. Это следует из теоремы 12.4 и леммы 12.1, а также из рассуждений в §7.

Теорема 12.5. *Оператор H имеет квазиуровни в точках $\lambda_{1,2} = \pm\sqrt{2+\sqrt{4+v^4}}$ (собственные значения), в точках $\lambda_{3,4} = \pm i\sqrt{\sqrt{4+v^4}-2}$ (резонансы) и в точках $\lambda_{5,6} = \pm 2$ (резонансы).*

Д о к а з а т е л ь с т в о. Согласно лемме 12.2,

$$\Delta' = e^{-ik}\left(v^2 + 2i\sin 2k\right) = 0.$$

Тогда имеем $v^2 + 2i\sin 2k = 0$. Учитывая, что

$$\lambda = 2\cos k \quad \text{и} \quad \sin k = -\sqrt{1-\frac{\lambda^2}{4}},$$

получаем уравнение

$$\lambda\sqrt{1-\frac{\lambda^2}{4}} = \frac{1}{2}iv^2.$$

Отсюда $\left(\lambda^2-2\right)^2 = 4+v^4$ или

$$\lambda = \pm\sqrt{2+\sqrt{4+v^4}},\ \lambda = \pm i\sqrt{\sqrt{4+v^4}-2}.$$

Значения $\lambda = \pm 2$ являются полюсами резольвенты оператора H (см. лемму 12.1). Покажем, что они не являются собственными значениями оператора H. Для этого рассмотрим уравнение (12.2) при $\varphi(n) = 0$ для всех $n \in \mathbb{Z}$.

Пусть $\lambda = 2$ (если $\lambda = -2$, то доказательство аналогичное). Собственную функцию будем определять из уравнения

$$\begin{aligned}(H_0 - 2I)\psi(n) = -(\psi(2) + (v-1)\psi(1))\delta_{n,0} - \\ ((v-1)\psi(0) - \psi(2))\delta_{n,1} - (\psi(0) - \psi(1))\delta_{n,2}.\end{aligned} \tag{12.5}$$

Пусть $n \neq 0,\ 1,\ 2$, тогда получаем разностное уравнение

$$\psi(n-1) + \psi(n+1) - 2\psi(n) = 0.$$

Общее решение этого уравнения ищем в виде

$$\psi(n) = C_1 q^n + C_2 q^{-n}.$$

При этом возможны варианты: $q = 1$ или $C_1 q^{2n} + C_2 = 0$. Запишем уравнение (12.5) при $n = 0,\ 1,\ 2:$

$$\begin{cases} \psi(-1) + \psi(1) - 2\psi(0) = -\psi(2) - (v-1)\psi(1), \\ \psi(0) + \psi(2) - 2\psi(1) = -(v-1)\psi(0) + \psi(2), \\ \psi(1) + \psi(3) - 2\psi(2) = -\psi(0) + \psi(1). \end{cases}$$

Если $q = 1$, то получаем либо тривиальное решение, либо противоречие. Противоречие возникает при $n = 0$ и $n = 1$. В первом случае параметр v должен быть равен нулю, а во втором — двум. Этого быть не может, так как мы решаем одно уравнение (12.5). Если $C_1 q^{2n} + C_2 = 0$, тогда из первого и второго уравнения системы получаем, что одна из констант C_1 или C_2 должна быть равна нулю, что противоречит условию. Или получаем противоречие в том, что в первом уравнении системы параметр v равен двум, а во втором — нулю. Таким образом, теорема доказана.

Задача рассеяния

Уравнение Липпмана–Швингера имеет вид

$$\psi(n) = e^{ikn} - R(\lambda + i0)\Big((\psi(2) + (v-1)\psi(1))\delta_{n,0} + \\ ((v-1)\psi(0) + \psi(2))\delta_{n,1} + (\psi(0) - \psi(1))\delta_{n,2} \Big).$$

Отсюда, подставляя $n = 0,\ 1,\ 2$, получаем систему

$$\begin{cases} \left(ve^{ik} - e^{-ik} + e^{2ik}\right)\psi(0) + \left(v - 1 - e^{2ik}\right)\psi(1) + \\ \qquad + \left(1 - e^{ik}\right)\psi(2) = e^{ik} - e^{-ik}, \\ \left(v - 1 + e^{ik}\right)\psi(0) + \left((v-1)e^{ik} - e^{-ik}\right)\psi(1) + \\ \qquad + \left(e^{ik} - 1\right)\psi(2) = e^{ik}\left(e^{ik} - e^{-ik}\right), \\ \left((v-1)e^{ik} + 1\right)\psi(0) + \left((v-1)e^{2ik} - 1\right)\psi(1) + \\ \qquad + \left(e^{2ik} - e^{-ik}\right)\psi(2) = e^{2ik}\left(e^{ik} - e^{-ik}\right). \end{cases}$$

Применяя метод Крамера относительно $\psi(0)$, $\psi(1)$, $\psi(2)$, находим

$$\psi(0) = \frac{2i\sin 2k}{v^2 + 2i\sin 2k},\ \psi(1) = \frac{\left(e^{ik} - 1\right)\left(v + ve^{-ik} - e^{ik}\right)}{v^2 + 2i\sin 2k},$$

$$\psi(2) = \frac{e^{-ik}\left(e^{4ik} - 1\right)}{v^2 + 2i\sin 2k}.$$

Таким образом, доказана следующая теорема.

Теорема 12.6. *Пусть $\Delta' \neq 0$, где $\lambda \in (-2,\ 2)$. Тогда уравнение Липпмана–Швингера имеет единственное решение.*

Упражнение 36. Найти коэффициенты прохождения a_+ и отражения a_-.

Упражнение 37. Исследовать условия, при которых имеет место полное отражение и (или) полное прохождение частицы.

Упражнение 38. Найти другой (эквивалентный) вид оператора H для графа, изображенного на рис. 12.6. Квантовая точка (точка вне проволоки с координатой 1) нумеруется числом 1, а оставшийся бесконечный участок графа — числами 0, ±1, ±2, ... При этом вместо одной функции $\psi(n)$ вводится пара функций $\psi = (\psi_1(n), \psi_2(m))$, каждая из которых определена на своем участке графа.

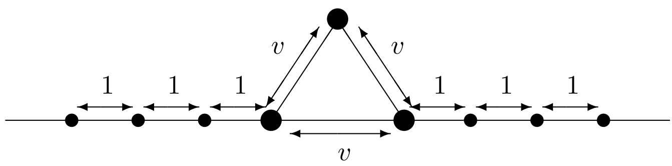


Рис. 12.7. Модель 3

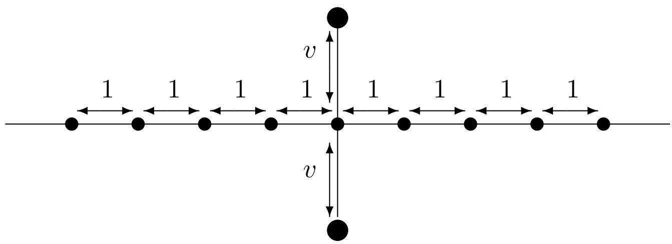


Рис. 12.8. Модель 4

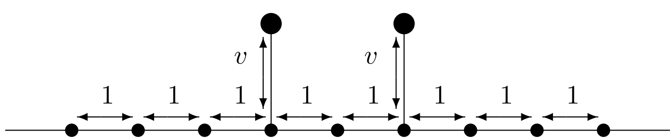


Рис. 12.9. Модель 5

Упражнение 39. Найти вид операторов H для графов, изображенных на рис. 12.7, 12.8, 12.9. Вершины графа нужно занумеровать целыми числами $0, \pm 1, \pm 2, \ldots$.

Упражнение 40. Найти вид операторов H для графов, изображенных на рис. 12.7, 12.8, 12.9. Конечный участок графа (квантовая точка) нумеруется числами $1, 2, \ldots, N$, а оставшийся бесконечный — числами $0, \pm 1, \pm 2, \ldots$. При этом вместо одной функции $\psi(n)$ вводится пара функций $\psi = (\psi_1(n), \psi_2(m))$, каждая из которых определена на своем участке графа.

Указания к упражнениям

У п р а ж н е н и е 5. Использовать равенство

$$\|x+y\|^2 = \|x\|^2 + \|y\|^2 + 2(x, y).$$

Заметим, что утверждение в упражнении 5 справедливо и для пространства над $\mathbb{C}$, только для доказательства следует использовать «поляризационное тождество» (см. [9, Задача 4]):

$$(x, y) = \frac{1}{4}\left(\|x+y\|^2 - \|x-y\|^2 - i\|x+iy\|^2 + i\|x-iy\|^2\right).$$

У п р а ж н е н и е 6. Использовать упражнение 5 и равенство Парсеваля для ряда Фурье в гильбертовом пространстве.

У п р а ж н е н и е 7. Если $\lambda \notin [a, b]$, то резольвента $R(\lambda) = (A - \lambda I)^{-1}$ оператора A существует и явно вычисляется из уравнения $(A - \lambda I)\psi = \varphi$ в $L^2[a\ b]$ относительно ψ, так что $\sigma(A) \subset [a, b]$. С другой стороны, если $\lambda \in [a, b]$, то легко построить последовательность функций $\psi_n \in L^2[a, b]$, $n = 1, 2, \dots$, таких, что $\|\psi_n\| = 1$ и $(A - \lambda I)\psi_n = \varphi_n \to 0$, $n \to \infty$ (в качестве таких функций можно взять, в случае $\lambda \neq a, b$, $\psi_n(k) = h_k \chi_{[\lambda-1/n,\, \lambda+1/n]}(k)$, где $\chi_{[\lambda-1/n,\, \lambda+1/n]}(k)$ — это характеристическая функция отрезка, а $h_k = \sqrt{n/2}$. Тогда, если в предположении противного $\lambda \notin \sigma(A)$, получаем $\psi_n = R(\lambda)\varphi_n \to 0$, $n \to \infty$ — противоречие.

У п р а ж н е н и е 10. Для доказательства компактности оператора $VR_0(\lambda)$ достаточно проверить, что ядро оператора $V(n_1)G_0(n_1 - n_1',\, \lambda)$ квадратично суммируемо, то есть

$$\sum_{n_1=-\infty}^{+\infty} \sum_{n_1'=-\infty}^{+\infty} |V(n_1)|^2 |G_0(n_1 - n_1',\, \lambda)| < +\infty.$$

В качестве λ можно взять $\lambda = 3$. Уравнение $2\cos k = 3$ разрешимо, так как для $k = i\varkappa$, $\varkappa \in \mathbb{R}$, $2\cos k = 2\cos(i\varkappa) = 2\operatorname{ch}\varkappa$.

Упражнение 11. Задача сводится к задаче на собственные значения матрицы 2×2; неизвестными в соответствующей однородной линейной системе являются $\psi(0)$ и $\psi(n_0)$.

Упражнение 13. Проверим ортогональность:

$$\left(e^{i\alpha jn},\, e^{i\alpha j'n}\right) = \sum_{n=1}^{N} e^{i\alpha(j-j')n} = e^{i\alpha(j-j')} \cdot \frac{1 - e^{i\alpha(j-j')N}}{1 - e^{i\alpha(j-j')}} =$$

$$= e^{i\alpha(j-j')} \cdot \frac{1 - e^{2i\pi(j-j')}}{1 - e^{i\alpha(j-j')}} = 0, \quad j \neq j'.$$

Упражнение 15. Достаточно проверить равенства

$$(A - \lambda I)R(\lambda)\psi = R(\lambda)(A - \lambda I)\psi = \psi, \quad \psi \in l^2(M).$$

Упражнение 21. Использовать обратимость оператора $1 - \varepsilon A$ для $\|\varepsilon A\| < 1$.

Упражнение 22. Использовать равенство (4.3), проверив его для $\lambda \in (-2,\, 2)$.

Упражнение 23. Поскольку преобразование Фурье сохраняет норму, достаточно проверить непрерывную дифференцируемость для преобразования Фурье $\widehat{\psi}_0(k,\, t)$. Формально

$$\frac{\partial \widehat{\psi}}{\partial t} = -2i\cos k e^{-2it\cos k}\widehat{\psi}_0(k) \in L^2[-\pi,\, \pi]$$

(умножение на ограниченную функцию, очевидно, сохраняет принадлежность $L^2[-\pi,\, \pi]$). Рассмотрим

$$\left\| \frac{\widehat{\psi}(k,\,t+\Delta t)-\widehat{\psi}(k,\,t)}{\Delta t} - \frac{\partial\widehat{\psi}(k,\,t)}{\partial t} \right\|^2 =$$

$$= \int_{-\pi}^{\pi} \left| \frac{e^{-2i(t+\Delta t)\cos k} - e^{-2it\cos k}}{\Delta t} - 2i\cos k e^{-2it\cos k} \right|^2 \times$$

$$\times \left| \widehat{\psi}_0(k) \right|^2 \, dk \to 0, \quad \Delta t \to 0$$

по теореме Лебега: подынтегральная функция поточечно стремится к нулю и, кроме того, равномерно ограничена суммируемой функцией $C\left|\widehat{\psi}\right|^2$; это следует из равенства (теорема Лагранжа)

$$\frac{e^{-2i(t+\Delta t)\cos k} - e^{-2it\cos k}}{\Delta t} = 2i\cos k e^{-2i\theta t\cos k},$$

где θ находится между t и $t+\Delta t$. Аналогично доказывается непрерывность функции $\dfrac{\partial\widehat{\psi}}{\partial t}$.

Упражнение 24. Легко проверить, что

$$\frac{d}{dt}(\psi,\,\psi) = \left(\frac{d\psi}{dt},\,\psi\right) + \left(\psi,\,\frac{d\psi}{dt}\right)$$

(см. доказательство формулы дифференцирования обычного произведения). Отсюда, используя уравнение (9.1) и самосопряженность оператора H, получаем

$$i\frac{d}{dt}(\psi,\,\psi) = i\left(\frac{d\psi}{dt},\,\psi\right) + i\left(\psi,\,\frac{d\psi}{dt}\right) = \left(i\frac{d\psi}{dt},\,\psi\right) - \left(\psi,\,i\frac{d\psi}{dt}\right) =$$

$$= (H\psi,\,\psi) - (\psi,\,H\psi) \equiv 0.$$

Следовательно, $\dfrac{d\|\psi\|^2}{dt} \equiv 0$ и

$$\|\psi(n,\,t)\|^2 \equiv \mathrm{const} = \|\psi(n,\,0)\|^2 = \|\psi_0(n)\|^2.$$

У п р а ж н е н и е 26. Выбирая $m > 1$, имеем

$$\sum_{n\in\Omega} |u(n,\, t)|^2 \leqslant C^2 \sum_{n\in\Omega} \frac{1}{(1+|n|+|t|)^{2m}} \leqslant$$

$$\leqslant C^2 \sum_{n\in\Omega} \frac{1}{(1+|n|)^m (1+|t|)^m} \leqslant \frac{C^2}{(1+|t|)^m} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(1+|n|)^m} =$$

$$= \frac{C'}{(1+|t|)^m} \to 0, \qquad |t| \to +\infty.$$

У п р а ж н е н и е 28. Задача нахождения решения уравнения Липпмана-Швингера сводится к решению линейной системы из двух уравнений с двумя неизвестными $\psi(0)$ и $\psi(n_0)$. При нахождении a_+ и a_- следует взять $n \geqslant n_0$ и $n \leqslant 0$ сответственно.

Основные обозначения и понятия

- Пусть X, Y — нормированные пространства. Линейный оператор $A : X \to Y$ называется ограниченным, если существует константа $C \geqslant 0$ такая, что $\|Ax\| \leqslant C\|x\|$, $x \in X$. Нормой $\|A\|$ оператора A называется наименьшая из этих констант.

- Ограниченный линейный оператор A, действующий в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$ со скалярным произведением $(\cdot,\, \cdot)$, называется самосопряженным, если $(A\psi,\, \varphi) = (\varphi,\, A\psi)$ для любых элементов $\psi,\, \varphi \in \mathcal{H}$.

- Банахово пространство $l^1(\mathbb{Z})$ состоит из всех функций $\psi(n)$, $n \in \mathbb{Z}$ таких, что $\|\psi\| = \|\psi\|_1 = \sum\limits_{n\in\mathbb{Z}} |\psi(n)| < \infty$.

- Банахово пространство $l^\infty(\mathbb{Z})$ состоит из всех функций $\psi(n)$, $n \in \mathbb{Z}$ таких, что $\|\psi\| = \|\psi\|_\infty = \sup\limits_{n\in\mathbb{Z}} |\psi(n)| < \infty$.

- Гильбертово пространство $l^2(\mathbb{Z})$ состоит из всех функций $\psi(n)$, $n \in \mathbb{Z}$ таких, что $\|\psi\| = \|\psi\|_2 = \left(\sum\limits_{n\in\mathbb{Z}} |\psi(n)|^2\right)^{1/2} < \infty$; скалярное произведение в $l^2(\mathbb{Z})$ дается формулой
$$(\psi,\, \varphi) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} \psi(n)\overline{\varphi(n)}.$$

- Гильбертово пространство $L^2[a,\, b]$ состоит из всех измеримых функций $f(t)$, определенных на $[a,\, b]$ таких, что
$$\|f\| = \left(\int_a^b |f(t)|^2\, dt\right)^{1/2} < \infty;$$

скалярное произведение в $L^2[a, b]$ дается формулой

$$(f, g) = \int_a^b f(t)\overline{g(t)}\,dt.$$

- Символ Кронекера δ_{ij} — индикатор равенства элементов, формально функция двух целых переменных i и j, определяемая равенством $\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j, \\ 0, & i \neq j. \end{cases}$

- Спектром $\sigma(A)$ линейного ограниченного оператора $A : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, где $\mathcal{H}$ — гильбертово пространство, называется множество $\sigma(A) = \mathbb{C} \setminus \rho(A)$, где $\rho(A)$ (резольвентное множество) состоит из точек $\lambda \in \mathbb{C}$, в которых существует обратный оператор $(A - \lambda I)^{-1}$, который называется резольвентой $R(\lambda)$ оператора A в точке λ.

- Пусть X, Y — линейные пространства. Образом линейного оператора $A : X \to Y$ называется множество

$$\operatorname{im} A = \{y \in Y \,:\, \exists x \in X,\ Ax = y\}.$$

- Пусть X, Y — линейные пространства. Ядром линейного оператора $A : X \to Y$ называется множество

$$\ker A = \{x \in X \,:\, Ax = 0\}.$$

- Пусть X, Y — линейные пространства. Линейный оператор $A : X \to Y$ называется инъективным, если $\ker A = \{0\}$.

- Пусть X, Y — линейные пространства. Линейный оператор $A : X \to Y$ называется сюръективным, если $\operatorname{im} A = Y$.

- Пусть X, Y — линейные пространства. Линейный оператор $A : X \to Y$ называется биективным, если он инъективный и сюрьективный.

- Пусть X — линейное пространство. Число элементов (мощность) максимального линейно независимого подмножества (базиса) пространства X называется размерностью X и обозначается через $\dim X$.

- Рангом линейного оператора A называется размерность образа этого оператора, то есть $\operatorname{rank} A = \dim \operatorname{im} A$.

- Пусть X — линейное пространство со скалярным произведением $(\psi,\, \varphi)$. Пусть $\|\psi\|$ — норма, порожденная скалярным произведением, то есть $\|\psi\| = \sqrt{(\psi,\, \psi)}$. Тогда для любых элементов $\psi,\, \varphi \in X$ имеем:

$$|(\psi,\, \varphi)| \leqslant \|\psi\| \cdot \|\varphi\|. \tag{12.6}$$

  Неравенство (12.6) называется неравенством Коши-Буняковского.

- Пусть $\{e_n\}_{n=1}^{\infty}$ — ортонормированный базис в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$ со скалярным произведением $(\cdot,\, \cdot)$. Тогда для любого $\psi \in \mathcal{H}$ выполнено равенство Парсеваля

$$\|\psi\|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} |(\psi,\, e_n)|^2.$$

Список литературы

1. Сазерленд Б. Замечательные модели. 70 лет точно решаемым квантовым задачам многих тел. М.–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2008. 388 с.

2. Штокман Х.–Ю. Квантовый хаос. М.: Физматлит, 2004. 374 с.

3. Orellana P.A., Dominguez-Adame F., Gomez I., Ladrón de Guevara M.L. Transport through a quantum wire with a side quantum–dot array // Phys. Rev. B. 2003. 67. 085321–(1-5).

4. Sha Zhang, Hui LI, Wei-Jiang Gong Impurity-modulated electron properties in a double-quantum-dot Aharonov–Bohm ring // J. Appl. Phys. 2011. 109. 013714–(1–10).

5. M. Valiente, Few quantum particles on one dimensional lattices. Scattering, binding and transport, Dissertation, Humboldt University, Berlin, 2010.

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

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

8. Рид М., Саймон Б. Методы современной математической физики. Т.2.: Гармонический анализ. Самосопряженность. М.: Мир, 1978. 395 с.

9. Рид М., Саймон Б. Методы современной математической физики. Т.1.: Функциональный анализ. М.: Мир, 1977. 360 с.

10. Шабат Б.В. Введение в комплексный анализ. М.: Наука, 1969. 749 с.

11. Смирнов В.И. Курс высшей математики. Т.3. Ч.2. М.:Наука, 1974. 576 с.

12. Выгодский М.Я. Справочник по элементарной математике. М.: Наука, 1979. 336 с.

13. Рид М., Саймон Б. Методы современной математической физики. Т.4.: Анализ операторов. М.: Мир, 1982. 428 с.

14. Рид М., Саймон Б. Методы современной математической физики. Т.3.: Теория рассеяния. М.: Мир, 1982. 443 с.

15. Морозова Л.Е. Задача рассеяния для одномерно дискретного оператора Шредингера с убывающим потенциалом // Изв. ин-та математики и информатики УдГУ. 2006. Вып.1(35). С. 83–88.

Учебное издание

Наталья Ивановна Коробейникова,
Юрий Павлович Чубурин

ДИСКРЕТНЫЕ МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Учебное пособие

Напечатано в авторской редакции
с оригинал-макета заказчика
Компьютерный набор и верстка Н.И. Коробейникова
Подписано в печать 03.12.12. Формат 60x84 1/16.
Печать офсетная. Усл.печ.л. 4,25. Уч.-изд.л. 2,03.
Тираж 30 экз. Заказ №

Издательство «Удмуртский университет»
426034, Ижевск, ул. Университетская, 1, корп.4